HAL
open science

Modélisation mathématique et analyse numérique des modèles de type Bloch pour les boîtes quantiques

Kole Keita

▶ **To cite this version:**

Kole Keita. Modélisation mathématique et analyse numérique des modèles de type Bloch pour les boîtes quantiques. Algèbres quantiques [math.QA]. Université de Grenoble, 2014. Français. NNT : 2014GRENM044 . tel-01094229v2

HAL Id: tel-01094229

https://theses.hal.science/tel-01094229v2

Submitted on 22 May 2017

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

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

UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Mathématiques appliquées**

Arrêté ministériel : du 7 août 2006

Présentée par

Kole KEITA

Thèse dirigée par **Brigitte BIDÉGARAY–FESQUET**

préparée au sein **du Laboratoire Jean Kuntzmann (LJK)**
et de **l'école doctorale Mathématiques, Sciences et Technologies de l'Information, Informatique (ED MSTII).**

Modélisation mathématique et analyse numérique des modèles de type Bloch pour les boîtes quantiques.

Thèse soutenue publiquement le **le 25 septembre 2014**,
devant le jury composé de :

Monsieur Stéphane LABBÉ
Professeur de l'Université Joseph Fourier, Grenoble, Président
Monsieur Christophe BESSE
Professeur de l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier, Rapporteur
Monsieur Didier FELBACQ
Professeur de l'Université Montpellier II, Rapporteur
Monsieur Stéphane DESCOMBES
Professeur de l'Université Nice Sophia Antipolis, Examinateur
Monsieur Clément JOURDANA
Maître de Conférences de l'Université Joseph Fourier, Grenoble, Examinateur
Madame Brigitte BIDÉGARAY FESQUET
Chargée de recherche CNRS, Directeur de thèse

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialités : **Mathématiques appliquées**

Présentée par

Kole KEITA

Thèse dirigée par **Brigitte BIDÉGARAY–FESQUET**

préparée au sein du **Laboratoire Jean Kuntzmann (LJK)**
et de **l'école doctorale Mathématiques, Sciences et Technologies de l'Information, Informatique (ED MSTII)**.

Modélisation mathématique et analyse numérique des modèles de type Bloch pour les boîtes quantiques

Thèse soutenue publiquement **25 septembre 2014**,
devant le jury composé de :

M. Stéphane LABBÉ	Professeur de l'Université Joseph Fourier, Grenoble
M. Christophe BESSE	Professeur de l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier
M. Didier FELBACQ	Professeur de l'Université Montpellier II
M. Stéphane DESCOMBES	Professeur de l'Université Nice Sophia Antipolis
M. Clément JOURDANA	Maître de Conférences de l'Université Joseph Fourier
Mme Brigitte BIDÉGARAY FESQUET	Chargée de recherche CNRS

Remerciements

Je commence par remercier tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'aboutissement de cette thèse.

Je tiens à remercier ma directrice de thèse Brigitte Bidégaray-Fesquet pour la confiance qu'elle m'a accordée pendant mes stages de Master 1, Master 2 et tout au long de ma thèse. Grâce à sa disponibilité, son accompagnement intensif, ses conseils et aussi son soutien infaillible pendant les moments difficiles, je ne me suis pas rendu compte de la durée de cette thèse. Sa maîtrise du sujet, ses compétences multiples et sa rigueur scientifique m'ont énormement servi pendant ces années. Enfin sa clairvoyance a toujours été au rendez-vous pendant nos moments de travail.

Je remercie Mr Didier Felbacq et Mr Christophe Besse d'avoir accepté de rapporter mes travaux de thèse malgré des délais très courts. Je remercie également les autres membres du jury Mr Stéphane Descombes, Mr Stéphane Labbé et Mr Clément Jourdana d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Mention spéciale à Mr Clément Jourdana avec qui j'ai discuté de manière constructive de nombreuses fois pendant ma thèse. Je le remercie pour ses conseils concernant les méthodes de travail, sa disponibilité pendant les moments difficiles et le partage de ses connaissances sur la résolution numérique de problèmes issus de la mécanique quantique.

C'est un honneur pour moi d'avoir travaillé avec Mr Eric Dumas. Je tiens à le remercier pour ses explications sur l'étude des problèmes de Cauchy des équations hyperboliques non-linéaires et la dérivation formelle des modèles asymptotiques. Merci aussi pour sa bonne humeur pendant ces moments de travail.

Je tiens particulièrement à remercier tous mes collègues doctorants du Laboratoire Jean Kuntzmann grâce auxquels ces années ont été merveilleuses et inoubliables. Il est primordial pour moi de remercier mes amis Mahamar Dicko et Alimata Diarra pour ces moments mémorables. Leur soutien continuera sans aucun doute après la thèse.

Je vais terminer cette partie en remerciant mon père qui m'a inscrit à l'école en absence d'une mère qui nous a quittés très tôt. Il m'a laissé une large autonomie par rapport à mes choix d'orientation scolaire. Je remercie aussi ma soeur et ma femme de m'accompagner et me soutenir dans les moments difficiles de ma vie.

Table des matières

1 Introduction générale **5**

1.1 Historique 6

1.2 Fabrication des boîtes quantiques 7

1.3 Travaux théoriques 8

2 Modélisation **11**

2.1 Introduction 13

2.2 Deux dérivations du modèle de Bloch classique 14

2.2.1 Première quantification 14

2.2.2 Seconde quantification 15

2.2.3 Équation de Liouville 17

2.2.4 Propriétés qualitatives et quantitatives 19

2.2.5 Modèle à deux espèces d'électron 20

2.2.6 Théorème de Wick 21

2.3 Hamiltonien libre 23

2.3.1 Hamiltonien libre en première quantification 23

2.3.2 Hamiltonien libre en seconde quantification 23

2.3.3 Évolution libre de la densité en première quantification 24

2.3.4 Évolution libre de la densité en seconde quantification 24

2.4 Action d'un champ électrique 27

2.4.1 Hamiltonien de l'interaction laser–boîte 27

2.4.2 Évolution temporelle de la densité en première quantification 28

2.4.3 Évolution temporelle de la densité en seconde quantification 29

2.4.4 Modèle de Bloch 30

2.5 Interaction de Coulomb 31

2.5.1 Hamiltonien de Coulomb pour les paires électron–trou 32

2.5.2 Hamiltonien de Coulomb dans le modèle conduction–valence 34

2.5.3 Dérivation du modèle de Bloch pour l'interaction de Coulomb 37

2.5.4 Écriture matricielle 45

2.5.5 Corrections apportées par l'interaction de Coulomb aux énergies et fréquences du système . . . 46
2.6 Interaction électron–phonon . . . 49
2.6.1 Potentiel d'interaction électron–phonon en première quantification . 49
2.6.2 Développement de l'hamiltonien électron–phonon . . . 50
2.6.3 Détermination du modèle de Bloch pour l'interaction électron–phonon 52
2.7 Couplage du modèle de Bloch avec les équations de Maxwell . . . 60

3 Analyse mathématique 62
3.1 Introduction . . . 63
3.1.1 Semi-groupe d'évolution . . . 63
3.1.2 Théorème de Trotter–Kato . . . 64
3.2 Propriétés qualitatives . . . 66
3.2.1 Conservation de la trace . . . 66
3.2.2 Hermicité de la matrice densité . . . 67
3.2.3 Positivité de la matrice densité . . . 68
3.3 Problème de Cauchy local . . . 72
3.3.1 Problème de Cauchy du modèle avec l'interaction de Coulomb . . . 72
3.3.2 Problème de Cauchy du modèle avec l'interaction électron–phonon . 77
3.4 Problème de Cauchy global . . . 79
3.4.1 Formulation du problème . . . 79
3.4.2 Énoncé du théorème . . . 81
3.5 Adimensionnement du modèle Maxwell-Bloch . . . 83
3.5.1 Adimensionnement du modèle de Bloch . . . 83
3.5.2 Adimensionnement des équations de Maxwell . . . 84
3.6 Analyse asymptotique . . . 86
3.6.1 Mise à l'échelle . . . 86
3.6.2 Dérivation d'un modèle asymptotique . . . 92

4 Simulations numériques 98
4.1 Introduction . . . 99
4.2 Schémas pour les équations de Maxwell . . . 100
4.2.1 Équations de Maxwell unidimensionnelles . . . 100
4.2.2 Discrétisation . . . 100
4.3 Schémas pour le modèle de Bloch . . . 102
4.3.1 Méthode de splitting . . . 102
4.3.2 Approximation de la matrice densité . . . 103
4.3.3 Approximation de la densité assistée par les phonons . . . 109
4.3.4 Solutions numériques des modèles de Bloch . . . 110
4.4 Modèle Maxwell–Bloch discrétisé . . . 113

4.4.1 Couplage Maxwell–Bloch faible avec l'interaction de Coulomb 114
4.4.2 Couplage Maxwell–Bloch faible avec l'interaction électron-phonon . 115
4.4.3 Condition aux bords 115
4.5 Tests numériques 117
4.5.1 Transparence auto-induite 117
4.5.2 Transfert de Cohérence 129
4.5.3 Analyse numérique des termes de Coulomb 130
4.5.4 L'interaction électron–phonon dans les boîtes quantiques 132

5 Conclusion et perspectives 137

A Détermination des fonctions propres et énergies des boîtes quantiques 140

B Moment dipolaire pour les boîtes cubiques 143

C Paramètres de Coulomb pour les boîtes cubiques 146

D Matrice de couplage électron–phonon optique pour les boîtes cubiques 154

Bibliographie 160

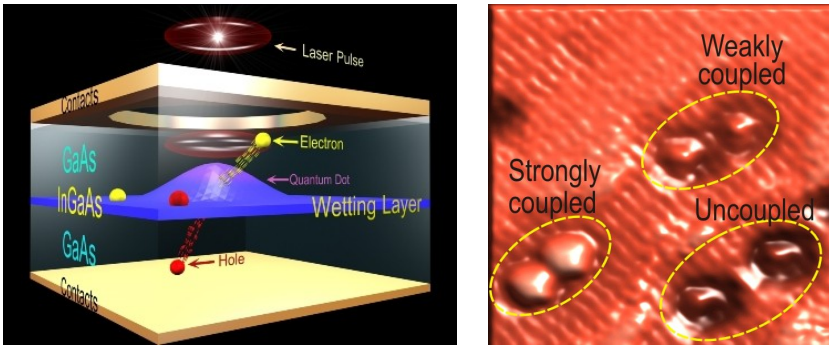
Chapitre 1

Introduction générale

Sommaire

1.1 Historique **6**
1.2 Fabrication des boîtes quantiques **7**
1.3 Travaux théoriques **8**

Les boîtes quantiques font l'objet d'études poussées depuis des dizaines d'années grâce à leurs propriétés quantiques remarquables. Ces propriétés découlent du fort confinement des électrons dans les trois directions de l'espace, contrairement aux puits et fils quantiques pour lesquels les particules sont confinées respectivement suivant une et deux directions de l'espace. Le confinement dans les trois directions de l'espace procure aux boîtes quantiques une configuration identique à celle des atomes, à savoir un spectre énergétique discret. Cela rend possible la manipulation les états propres des boîtes quantiques de la même manière que les physiciens manipulent les états atomiques. Les boîtes quantiques mesurent en général quelques dizaines de nanomètres.



(a) (b)

FIGURE 1.1 – (a) Représentation artistique d'une boîte quantique et son interaction avec le laser [Source : [Uni05]]. (b) Les boîtes fortement, faiblement couplées ou existence d'une couche de mouillage (wetting layer) et les boîtes non couplées [Source : [HPD+09]].

1.1 Historique

En 2007, les chercheurs de la Nanyang Technological University à Singapour ont publié des travaux portant sur la téléportation d'états quantiques entre des boîtes quantiques différentes. Il s'agit de produire des états quantiques intriqués entre les particules de toutes les boîtes. Les états quantiques intriqués sont des états associés à l'ensemble des particules de toutes les boîtes quantiques mais pas à une particule isolée.
Le mode de fabrication des boîtes quantiques avec états quantiques intriqués réduisent les effets de la décohérence pour que la téléportation et les calculs quantiques soient réalisées efficacement et facilement à température ambiante. Les sources de décohérence dans les boîtes quantiques peuvent être l'instabilité des polarons (couplage électron–phonon), la nature de l'excitation inter-bande et les fluctuations électrostatiques.

Dans la même année, Michael Wong, professeur assistant en ingénierie chimique et biomoléculaire et son doctorant Subashini Asokan ont obtenu des résultats innovants dans le domaine de le synthèse des boîtes quantiques. Ils ont montré que les boîtes quantiques sont les meilleurs candidats pour la fabrication des panneaux solaires car elles sont efficaces

et moins coûteuses que les panneaux conçus à partir des cellules photovoltaïques classiques au silicium.

En fin 2008, les chercheurs de l'Université de l'Alberta au Canada ont mis en œuvre une expérience très impressionnante dans le cadre des boîtes quantiques. Ils ont construit des boîtes quantiques équivalentes à un seul atome et ceci est une issue vers l'espoir de la réalisation des ordinateurs quantiques moins gourmands dans la consommation de l'énergie. Ce sont les boîtes quantiques constituées d'un seul atome dans une matrice de silicium et elles permettent de faire des calculs à température ambiante. Ces boîtes quantiques sont équivalentes à des transistors de puces électroniques mais leurs tailles et leurs consommations d'énergie sont très petites. Elles mesurent quelques nanomètres de diamètres et les particules ont la possibilité de mouvoir d'une boîte à une autre comme dans une molécule et les liaisons entre les boîtes sont naturelles.

Récemment en 2011, l'équipe de recherche du département des sciences pharmaceutiques et du département d'ingénierie électrique et informatique de l'Université de Toronto (Canada) ont présenté une méthode d'auto-assemblage des complexes nanomatériaux dont les briques de base sont les boîtes quantiques. Le transfert d'énergie d'une boîte à une autre a été demontré au sein de ces nanomatériaux synthétisés.

La majorité des scientifiques travaillant sur les boîtes quantiques estiment qu'elles sont les bons candidats pour l'informatique quantique à cause de leur spectre énergétique discret et parce que certaines configurations de l'ordinateur quantique sont réalisables avec les boîtes quantiques [LD98, SIM99] due à la simple manipulation des spins des électrons piégés.

1.2 Fabrication des boîtes quantiques

Les boîtes quantiques se distinguent suivant les modes de fabrication et d'application. On peut citer

- les boîtes obtenues par confinement d'un gaz d'électron bidimensionnel, appelées principalement boîtes mésoscopiques. Les gaz d'électron bidimensionnels sont souvent obtenu dans les matériaux semi-conducteurs tels que GaAs/AlGaAs,
- les boîtes qui apparaissent lors des fluctuations de l'épaisseur d'un puit quantique, appelées boîtes d'interfaces,
- les nanocristaux de semi-conducteurs, obtenus chimiquement sous formes de colloïdes,
- les boîtes auto-assemblées obtenues en matière solide et après les croissances par épitaxie. Elles sont différentes des boîtes obtenues par confinement d'un gaz d'électron bidimensionnel car ces dernières sont obtenues par gravure des puits quantiques ou bien par confinement électrostatique grâce à des électrodes.

Les boîtes qui nous intéressent particulièrement sont les boîtes auto-assemblées.

Croissance par épitaxie

La méthode épitaxiale utilisée pour obtenir des boîtes quantiques est la croissance épitaxiale par jets moléculaires (MBE : Molecular Beam Epitaxy). Elle a été expérimentée dans les années 70 aux États-Unis, puis en Europe, Russie et Japon. C'est un outil très puissant de fabrication des nanostructures, employé aujourd'hui dans plusieurs laboratoires dans le monde. La croissance épitaxiale par jets moléculaires consiste à déposer des jets d'atomes et de molécules sur un réseau cristallin composé d'atomes de même nature ou de natures différentes. Le réseau cristallin sur lequel le dépot se fait est appelé substrat Lors du jet moléculaire, les boîtes quantiques se forment dans les cas où les deux matériaux (substrat et atomes déposés) ont les mailles différentes (distances inter-atomiques). La figure (1.2) représente la mise en œuvre de la méthode épitaxiale.

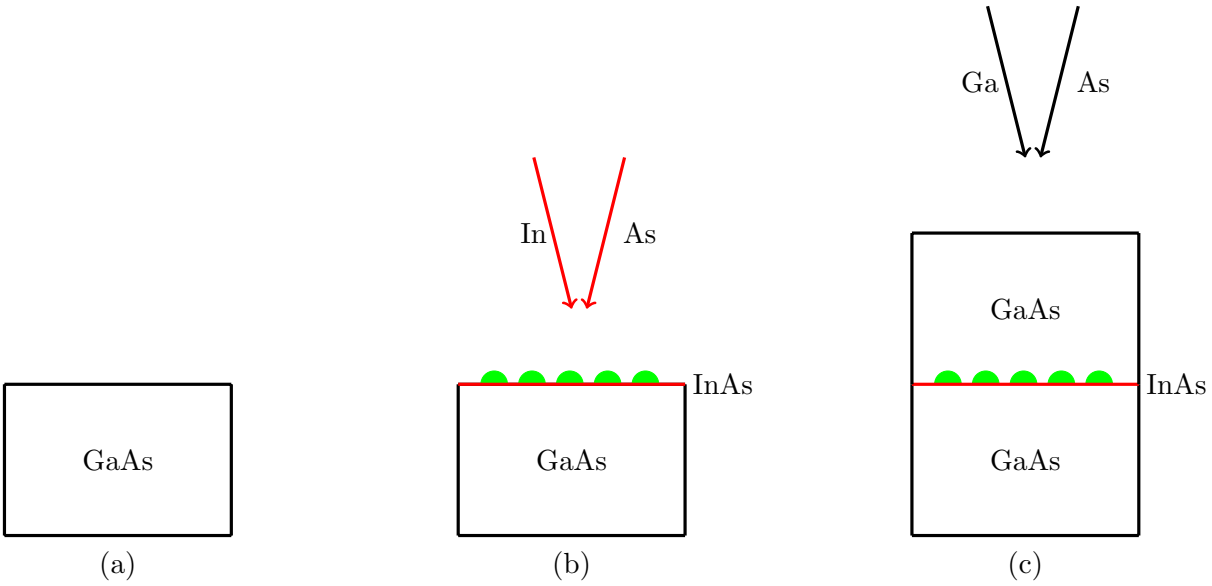


FIGURE 1.2 – Épitaxie par jets d'arsenic (As), de gallium (Ga) et d'indium (In). (a) Substrat d'arséniure de Galllium (GaAs). (b) Jet d'indium (In) et d'arsenic (As) sur l'arséniure de gallium (GaAs) et formation des boîtes quantiques (demi-cercle vert). (c) Jet d'arsenic et de gallium (création du substrat).

1.3 Travaux théoriques

Les énergies des électrons à l'intérieur des boîtes quantiques sont distribuées discrètement grâce au confinement suivant les trois directions de l'espace. Les opérateurs associés à ces énergies discrètes sont les hamiltoniens. Les hamitoniens pour les boîtes de formes sphériques et de constantes diélectriques différentes à celle de sa matrice à l'intérieur de laquelle elles se trouvent sont donnés dans [BP99]. Nous retrouvons dans cet article les

déterminations des énergies propres associées à la somme des hamiltoniens dans le cas des boîtes contenant une seule particule (électron). Dans le cas de plusieurs particules en interaction, nous pouvons citer l'article [HLK90] qui détermine numériquement les énergies des électrons et des trous.
D'autres études réalisées sur les boîtes sont la détermination et l'analyse des perbutations susceptibles d'apparaître dans les systèmes de boîtes quantiques ([BJ04, Kaw07]). Les perbutations proviennent des corrélations dans les interactions au sein des systèmes de boîtes quantiques. Dans ces études de pertubations, toutes les interactions existantes dans les systèmes ne sont pas pris en compte.
Pour pouvoir bien reproduire les effets tels que les excitations optiques dans les systèmes de boîtes quantiques, certains auteurs ont préféré modéliser ces nanostructures avec les équations de type Bloch. Les équations de type Bloch donnent l'évolution temporelle des densités des énergies discrètes des particules et autorisent les couplages entre les densités des énergies (pas négligeable pour les systèmes de plusieurs états d'énergie discrets).
Le chapitre 20 du livre [HK09] est consacré principalement à la dérivation des dynamiques de ces densités. Cette dérivation nécessite la connaissance des opérateurs hamiltoniens du système général. Les hamiltoniens considérés dans la dérivation sont les hamiltoniens libres des particules et celui du couplage entre le champ électrique et les boîtes. Les équations données dans le livre sont assez simples pour une modélisation propre et rigoureuse des boîtes parce que les perturbations et les termes de relaxation ne sont pas pris en compte.
Dans le même livre, on retrouve d'autres équations de type Bloch employées pour modéliser les boîtes quantiques et ces équations correspondant aux modèles donnés dans [GH02, GH03, HK96]. Elles ont été obtenues après des transformations directes des équations de type Bloch dérivées pour les puits quantiques. Les problèmes qui se posent avec ces transformations se trouvent au niveau des indexations des états d'énergie des électrons. En effet, les états d'énergie dans les puits quantiques sont indexés par les vecteurs et forment un continum. Dans ce cadre, les interactions entre les particules ne sont possibles que si elles ont des vecteurs d'onde de signes opposés. Il s'ensuit un modèle de Bloch constitué de modèles à deux niveaux d'énergie deux-à-deux couplés via les bandes d'électrons et de trous. La matrice qui contiendrait ces variables serait creuse.
En fait, l'extrapolation d'un modèle de puits quantiques vers un modèle de boîtes quantiques ne peut pas se faire ainsi et on peut envisager de prendre en compte les couplages de toutes les densités dans les modèles de Bloch ([Bid10]). On commence par écrire une variable matricielle (matrice densité) qui contient toutes les densités puis on écrit la dynamique de cette variable matricielle en utilisant les dynamiques de ces éléments (équation de Liouville).
Les équations de type Bloch sont traitées dans plusieurs contextes. Nous trouvons dans [BBR01] l'analyse mathématique des termes de relaxation intervenant dans les équations de type Bloch dans le cadre de l'interaction entre la matière (gaz ou matériau amorphe

isotrope) et le champ lumineux. Les équations de Bloch couplées avec les équations de Maxwell sont analysées numériquement dans [Bid03] dans lequel on retrouve les comparaisons de complexité entre deux méthodes de couplage numérique. Ce sont les méthodes de Crank–Nicolson et de splitting, toutes les deux couplées fortement et faiblement avec le schéma de Yee (schéma aux différences finies). Les équations de Bloch analysées font intervenir les termes de relaxation. Les méthodes numériques sont utilisées par la suite dans [BBFB$^+$04, Sau05] pour simuler l'interaction entre le laser et les cristaux non linéaires. L'étude mathématique du système couplé de Maxwell–Bloch est effectuée dans [Bid06] pour prouver l'existence d'une unique solution locale en temps, l'existence de la solution globale en temps étant étudiée dans [Joc02, DS12].

Les contributions de cette thèse concernent trois aspects :

- l'écriture de modèles de type Bloch non linéaires donnant l'évolution temporelle de la matrice densité. La différence avec les modèles préexistants se trouve au niveau des termes non linéaires qui proviennent de l'interaction entre les électrons à l'intérieur de la boîte (interaction de Coulomb) et de l'interaction entre les électrons et les phonons (particules associées à la vibration et à la polarisation optique).
- l'analyse mathématique des propriétés qualitatives des solutions des modèles de Bloch non linéaires obtenus. Nous prouvons l'existence d'une unique solution locale et globale pour les systèmes formés à partir du couplage entre les modèles de Bloch non linéaires obtenus dans cette thèse et les équations de Maxwell.
- l'étude numérique des modèles couplés de Maxwell–Bloch non linéaires, dans un objectif de validation des modèles continus et numériques dérivés.

Le document de thèse se répartit de la manière suivante :

1. Le premier chapitre (**chapitre 2**) est consacré aux dérivations des modèles de type Bloch (équation de Liouville). Dans le même chapitre, nous donnons le couplage de ces modèles de Bloch avec les équations de Maxwell. Le système couplé obtenu modélise l'interaction entre le laser et les boîtes quantiques.
2. Le **chapitre 3** porte sur l'étude mathématique des propriétés qualitatives du modèle de Bloch, l'étude de différents problèmes de Cauchy des modèles couplés de Maxwell–Bloch et une dérivation formelle d'un modèle asymptotique à partir des modèles de Bloch.
3. Le dernier chapitre (**chapitre 4**) présente l'étude numérique du modèle de Maxwell–Bloch. Des tests numériques illustrent des phénomènes tels que la transparence auto-induite, le transfert de cohérence et permettent de valider en partie les modèles dérivés.

Chapitre 2

Modélisation

Sommaire

2.1 Introduction **13**

2.2 Deux dérivations du modèle de Bloch classique **14**

2.2.1 Première quantification 14

2.2.2 Seconde quantification 15

2.2.3 Équation de Liouville 17

2.2.4 Propriétés qualitatives et quantitatives 19

2.2.5 Modèle à deux espèces d'électron 20

2.2.6 Théorème de Wick 21

2.3 Hamiltonien libre **23**

2.3.1 Hamiltonien libre en première quantification 23

2.3.2 Hamiltonien libre en seconde quantification 23

2.3.3 Évolution libre de la densité en première quantification 24

2.3.4 Évolution libre de la densité en seconde quantification 24

2.4 Action d'un champ électrique **27**

2.4.1 Hamiltonien de l'interaction laser–boîte 27

2.4.2 Évolution temporelle de la densité en première quantification . . 28

2.4.3 Évolution temporelle de la densité en seconde quantification . . . 29

2.4.4 Modèle de Bloch 30

2.5 Interaction de Coulomb **31**

2.5.1 Hamiltonien de Coulomb pour les paires électron–trou 32

2.5.2 Hamiltonien de Coulomb dans le modèle conduction–valence . . 34

2.5.3 Dérivation du modèle de Bloch pour l'interaction de Coulomb . . 37

2.5.4 Écriture matricielle 45

2.5.5 Corrections apportées par l'interaction de Coulomb aux énergies et fréquences du système 46

2.6 Interaction électron–phonon **49**

2.6.1 Potentiel d'interaction électron–phonon en première quantification 49

2.6.2 Développement de l'hamiltonien électron–phonon 50
2.6.3 Détermination du modèle de Bloch pour l'interaction électron–phonon 52
2.7 Couplage du modèle de Bloch avec les équations de Maxwell . 60

2.1 Introduction

Le modèle de Bloch donne les dynamiques des densités énergétiques des états quantiques des systèmes. Ces dynamiques dépendent de l'énergie totale du système. Plusieurs types d'énergies existent au sein des systèmes quantiques. Nous pouvons citer

- l'énergie libre associée aux particules libres,
- l'énergie de Coulomb engendrée par les interactions entre les particules du système,
- l'énergie de collision et de relaxation,
- l'énergie provenant de l'interaction avec les champs extérieurs.

L'énergie totale est la somme de toutes ces énergies.
Pour modéliser les boîtes quantiques, nous avons décidé d'utiliser les modèles de Bloch car ils sont les bons candidats grâce aux raisons expliquées dans le chapitre 1.
Plusieurs travaux effectués sur les modèles de Bloch pour les boîtes prennent en compte soit un nombre limité de niveaux d'énergie, soit une simplification de la structure de la matrice densité. Un modèle de Bloch a été dérivé dans [Bid10] en considérant que les énergies libres des particules et les énergies d'interaction avec un champ électrique extérieur. D'autres énergies telles que celles des interactions particule–phonon, sont ajoutées dans [GH02, GH03] mais les modèles dérivés dans ces articles sont les transformations des modèles dérivés à l'origine pour les puits quantiques et les couplages entre les densités y sont négligés. On retrouve dans [HP97, HRM99] des modèles de Bloch pour les boîtes quantiques, qui prennent en compte les potentiels de Coulomb, mais les termes qui apparaissent dans le modèle et les dérivations ne sont pas explicités.

Notre contribution dans ce chapitre porte sur la dérivation classique de modèles de Bloch tenant compte des énergies de Coulomb et des énergies de relaxation (interaction électron–phonon) dans les boîtes quantiques. Nous formons un modèle de Bloch final en ajoutant les parties obtenues avec les modèles simplifiés existant et dépendant des énergies libres des particules et des énergies d'interaction avec le champ extérieur (voir [Bid10]).

Le chapitre commence avec une section détaillée sur les deux types de dérivation classique des équations de type Bloch (équation de Liouville). Ensuite nous donnons les modèles de Bloch obtenus avec l'énergie libre dans la section 2.3, l'énergie d'interaction avec un champ extérieur dans la section 2.4, l'énergie de Coulomb dans la section 2.5 et l'énergie d'interaction électron–phonon dans la section 2.6. Enfin la section 2.7 donne le couplage entre le modèle de Bloch final et les équations de Maxwell (pour l'interaction laser–matière).

2.2 Deux dérivations du modèle de Bloch classique

Les systèmes quantiques sont composés en général d'un grand nombre de particules en interaction complexe. La considération des systèmes isolés dans la littérature permet de diminuer le nombre de degrés de liberté car le nombre d'observables, les mesures et le nombre d'équations croît uniformement avec le nombre de particules.
Les informations capables d'être recueillies sur les équations quantiques sont souvent inutilisables et très compliquées à analyser lors de la détermination des résultats macroscopiques sur les variables comme la résistance électrique, la température, etc...
La matrice densité donnée par la physique statistique, permet d'avoir un pont entre le monde quantique et le monde macroscopique. Sa dynamique est donnée par le modèle de Bloch. Le modèle fournit des informations quantiques du système et ces informations peuvent être utilisées pour une étude plus raffinée des variables macroscopiques.

2.2.1 Première quantification

En mécanique quantique, l'état d'un système est déterminé par un vecteur appelé vecteur d'état, de carré intégrable sur tout le domaine. Ce vecteur appartient à un espace de Hilbert et dépend du temps t et de la variable d'espace $r \in \mathbb{R}^3$; on le note $\psi(r,t)$. Il est déterminé via l'équation de Schrödinger :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi(r,t) = H\psi(r,t),$$

où H est l'hamiltonien total du système, dépendant d'un potentiel $V(r,t)$,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r,t),$$

et m_e est la masse de l'électron.
La norme du vecteur d'état $\psi(r,t)$ est la probabilité de trouver la particule à la position r et au temps t.

Cas du système à un électron. Le vecteur d'état d'un système à un seul électron appartient à un espace de Hilbert, engendré par un ensemble de fonctions propres associées aux états quantiques. Ces fonctions propres sont notées $\{\psi_j(r)\}_{j\in\mathbb{N}}$. On se ramène dans la suite à un nombre fini N d'états propres et on considère $\{\psi_j(r)\}_{j\in\{1,...,N\}}$.
L'état du système est déterminé à partir des fonctions propres et du N-uplet de nombres complexes dépendant du temps $(C_1(t),...,C_N(t)) \in \mathbb{C}^N$:

$$\psi(r,t) = \sum_{j=1}^{N} C_j(t)\psi_j(r). \tag{2.1}$$

Les fonctions propres $\{\psi_j(r)\}_j$ sont orthonormales et obtenues à partir de l'équation aux valeurs propres de Schrödinger qui est donnée pour tout $j \in \{1,...,N\}$:

$$H\psi_j = \mathcal{E}_j\psi_j, \tag{2.2}$$

où $\mathcal{E}_j$ est l'énergie propre associée à la fonction propre ψ_j.

Cas du système à plusieurs électrons. Lorsque l'on veut prendre en compte les interactions entre particules, il faut considérer un état du système $\psi(r_1, ..., r_M, t)$ qui dépend des positions des M particules. Dans le cas des particules identiques, les états de ces M particules sont soit anti-symétriques (fermions) ou soit symétriques (bosons). Ces deux propriétés conditionnent l'espace des états du système. L'espace des états n'est pas le produit tensoriel des espaces de Hilbert des M particules isolées

$$\mathcal{H}_1(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{H}_2(\mathbb{R}^3) \otimes ... \otimes \mathcal{H}_M(\mathbb{R}^3),$$

avec $\mathcal{H}_j(\mathbb{R}^3)$ l'espace de Hilbert associé à la particule isolée j.
L'espace des états des M particules identiques s'obtient à partir du produit tensoriel des espaces et des opérations d'anti-symétrisations et de symétrisations (voir [CLM06]).
La prise en compte de cet espace fonctionnel est complexe et nécessite des approximations.

2.2.2 Seconde quantification

Dans le formalisme de la seconde quantification, la variable d'état $\psi(r,t)$ et son adjoint $\psi^*(r,t)$ sont remplacés par les opérateurs de champ $\hat{\psi}(r,t)$ et $\hat{\psi}^\dagger(r,t)$:

$$\psi(r,t) \to \hat{\psi}(r,t),$$

$$\psi^*(r,t) \to \hat{\psi}^\dagger(r,t).$$

Définition 1 (Commutateur et anti-commutateur)**.** *Soient $\hat{A}$ et $\hat{B}$ deux opérateurs, le commutateur de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ est défini par*

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A},$$

et l'anti-commutateur des deux opérateurs est défini par

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Électrons. Les deux opérateurs de champ $\hat{\psi}(r,t)$ et $\hat{\psi}^\dagger(r,t)$ obéissent aux lois d'anti-commutation :

$$\{\hat{\psi}(r,t), \hat{\psi}(r',t)\} = \{\hat{\psi}^\dagger(r,t), \hat{\psi}^\dagger(r',t)\} = 0,$$

et

$$\{\hat{\psi}(r,t), \hat{\psi}^\dagger(r',t)\} = \delta(r - r').$$

Cela signifie qu'il ne peut pas y avoir deux électrons au même endroit.
Les opérateurs de champ $\hat{\psi}(r,t)$ et $\hat{\psi}^\dagger(r,t)$ permettent respectivement de détruire et de créer les électrons suivant les états propres du système. Ces opérateurs se décomposent

suivant les états propres d'un système à une seule particule et cette décomposition fait intervenir les opérateurs d'annihilation c_j et de création $c_j^\dagger$.
Les opérateurs de champ $\hat{\psi}(r,t)$ et $\hat{\psi}^\dagger(r,t)$ sont respectivement donnés par

$$\hat{\psi}(r,t) = \sum_j c_j \psi_j(r) \quad \text{et} \quad \hat{\psi}^\dagger(r,t) = \sum_j c_j^\dagger \psi_j^*(r), \tag{2.4}$$

où les fonctions $\psi_j(r)$ sont solution de (2.2).
Les opérateurs d'annihilation c_j et de création $c_j^\dagger$ obéissent aux lois d'anti-commutation :

$$\{c_j, c_k\} = \{c_j^\dagger, c_k^\dagger\} = 0,$$

$$\{c_j, c_k^\dagger\} = \delta_{jk}.$$

Phonons. Le concept de la dualité onde–corpuscule de la mécanique quantique permet d'associer les phonons à certains types d'ondes. Les phonons sont les bosons associés aux ondes élastiques qui apparaissent dans les solides cristallins (phonons acoustiques) et aussi associés aux ondes de polarisation du champ électromagnétique (phonons optiques).

Phonons acoustiques. Les opérateurs associés aux champs de déplacement et aux moments cinétiques sont donnés dans l'appendix de [HK09].
Soit $\mathbf{X}_j(r,t)$ la jème composante du champ de déplacement à la position r et au temps t et $\mathbf{p}_j(r,t) = \mathrm{i}\hbar\partial_t \mathbf{X}_j(r,t)$ son impulsion. Les deux opérateurs canoniques sont

$$\mathbf{X}_j(r,t) \to \hat{\mathbf{X}}_j(r,t),$$

$$\mathbf{p}_j(r,t) \to \hat{\mathbf{p}}_j(r,t).$$

Les opérateurs de déplacement et d'impulsion obéissent aux lois de commutation :

$$\forall j, l \in \{1,2,3\}, \quad [\hat{\mathbf{X}}_j(r,t), \hat{\mathbf{X}}_l(r',t)] = [\hat{\mathbf{p}}_j(r,t), \hat{\mathbf{p}}_l(r',t)] = 0,$$

$$[\hat{\mathbf{X}}_j(r,t), \hat{\mathbf{p}}_l(r',t)] = \mathrm{i}\hbar\delta_{jl}\delta(r-r').$$

L'écriture de l'opérateur du champ de déplacement $\hat{\mathbf{X}}(r,t)$ dans la base des ondes planes est donné par l'équation $(A.69)$ de [HK09] et aussi par l'équation (83) de [Kit87] :

$$\hat{\mathbf{X}}(r,t) = \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mathbf{q}} \left(\exp(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}} + \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}}^\dagger \right) e_{\mathbf{q}} B_{\mathbf{q}}, \tag{2.7}$$

où $e_{\mathbf{q}}$ est le vecteur unitaire associé au vecteur d'onde $\mathbf{q}$ dont l'expression est

$$e_{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|}, \quad B_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2d\omega_{\mathbf{q}}}},$$

où d est la densité du système, $\omega_{\mathbf{q}}$ la fréquence des phonons de vecteur d'onde $\mathbf{q}$. Le vecteur d'onde $\mathbf{q}$ appartient au réseau réciproque du réseau cristallin.

Les opérateurs $b_{\mathbf{q}}$ et $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ sont les opérateurs d'annihilation et de création de quanta de phonon de vecteur d'onde $\mathbf{q}$. Pour tous vecteurs d'onde $\mathbf{q}$ et $\mathbf{q}'$, ces opérateurs obéissent aux lois de commutation :

$$[b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}] = [b_{\mathbf{q}}^{\dagger}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = 0,$$
$$[b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}.$$

L'opérateur de dilatation, relatif aux expressions du potentiel de l'interaction électron–phonon, est la dérivée du champ de déplacement (2.7) par rapport aux trois coordonnées de l'espace :

$$D(r,t) = \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{X}}(r,t)}{\partial r_1}, \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}(r,t)}{\partial r_2}, \frac{\partial \hat{\mathbf{X}}(r,t)}{\partial r_3} \right).$$

Cela nous donne

$$D(r,t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\mathcal{E}_{\mathbf{q}} \exp(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}} + \mathcal{E}_{\mathbf{q}}^{*} \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right)$$

avec $\mathcal{E}_{\mathbf{q}} = \mathrm{i}\frac{B_{\mathbf{q}}}{V^{\frac{1}{2}}}|\mathbf{q}|$.

Phonons optiques. Pour les phonons optiques, référons nous à la page 138 de [Kit87]. Nous n'avons pas un champ de déplacement cette fois-ci mais un champ de polarisation qui permet de déterminer le potentiel électrostatique de l'interaction entre les électrons et les phonons optiques.
Le champ de polarisation est donné par

$$\mathbf{Q}(r,t) = F \sum_{\mathbf{q}} \left(\exp(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}} + \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right) e_{\mathbf{q}},$$

où F est une constante qui peut être déterminée dans le cas du modèle de Fröhlich.

Dans le formalisme de Schrödinger, l'état du système est donné par une variable mathématique $\psi(r,t)$ qui n'est pas un observable quantique (voir [CDL97a, CDL97b]). Nous allons donc définir la matrice densité à partir de $\psi(r,t)$ qui a l'avantage d'être un observable ; elle sera solution de l'équation de Bloch qui peut se dériver dans les deux formalismes de la première et seconde quantification.

2.2.3 Équation de Liouville

La variable de l'équation de Liouville est une matrice appelée matrice densité et notée ρ. Cette matrice fournit des informations sur les taux d'occupation des états quantiques et les probabilités de transition entre ces états. L'élément diagonal de la matrice ρ, noté ρ_{jj} avec $j \in \{1, ..., N\}$ est la probabilité d'occupation de l'état quantique j. Les éléments non-diagonaux sont des nombres complexes dont les modules, notés $|\rho_{jk}|$, avec $j, k \in$

$\{1, ..., N\}$ et $j \neq k$, peuvent être interprétés comme des probabilités de transition entre les états j et k. Les éléments diagonaux et non-diagonaux de la matrice densité sont appelés respectivement populations et cohérences.

Première quantification. Dans ce formalisme, l'équation de Liouville se dérive à partir de l'équation de Schrödinger. La matrice densité est égale au produit du vecteur d'état par son adjoint

$$\rho(t) = \psi(r,t)\psi^*(r,t). \tag{2.9}$$

La dynamique de la matrice densité ρ (équation de Bloch) se déduit de celle du vecteur d'état $\psi(x,t)$ (équation de Schrödinger). La dynamique de l'adjoint $\psi^*(x,t)$ est

$$-\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi^*(r,t) = \psi^*(r,t)H,$$

car l'hamiltonien H est un opérateur hermitien (postulat de la mécanique quantique).
La dérivée temporelle de ρ donne :

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho(t) &= \mathrm{i}\hbar\partial_t\psi(r,t)\psi^*(r,t) + \psi(r,t)\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi^*(r,t) \\ &= H\rho - \rho H \\ &= [H,\rho]. \end{aligned} \tag{2.10}$$

Cette équation s'appelle l'équation de Liouville.
Nous avons vu que le vecteur d'état d'un système à un seul électron se décompose sous la forme donnée par (2.1). L'écriture de l'adjoint du vecteur d'état dans cette même forme donne

$$\psi^*(r,t) = \sum_{j=1}^{N} \bar{C}_j(t)\psi_j^*(r).$$

Grâce à l'orthonormalité de la base des fonctions propres, nous avons pour tous j, k et temps t,

$$\rho_{jk}(t) = C_j(t)\bar{C}_k(t). \tag{2.11}$$

Seconde quantification. Dans ce formalisme, la matrice densité est égale à la moyenne du produit des deux opérateurs de champ $\hat{\psi}(r,t)$ et $\hat{\psi}^\dagger(r,t)$ qui ont été obtenus à partir du vecteur d'état et son adjoint de la première quantification. Cette moyenne se note

$$\rho(t) = \left\langle \hat{\psi}^\dagger(r,t)\hat{\psi}(r,t) \right\rangle. \tag{2.12}$$

Dans (2.12), remplaçons les opérateurs par les décompositions (2.4). L'orthonormalité de la base des états propres permet d'obtenir pour chaque élément de la matrice densité

$$\rho_{jk} = \left\langle c_k^\dagger c_j \right\rangle.$$

L'élément ρ_{jk} est égal à l'observable qui permet d'annihiler un électron à l'état j et créer un autre électron à l'état k.

Les éléments de la matrice densité ρ_{jk} rentrent dans le cadre de la représentation de Heisenberg [Hei26], qui permet de déterminer l'évolution temporelle de l'observable associé à l'opérateur $\hat{A}$. L'observable de l'opérateur $\hat{A}$ se calcule par rapport à un opérateur statistique $\hat{S}_0$ la densité initiale du système (voir par exemple [HP97]).

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{S}_0 \hat{A}).$$

La variation temporelle de $\left\langle \hat{A} \right\rangle$ est donnée par l'équation de Heisenberg

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \left\langle \hat{A} \right\rangle = \left\langle \left[\hat{A}, H \right] \right\rangle. \tag{2.13}$$

En remplaçant l'opérateur $\hat{A}$ par $c_k^\dagger c_j$ dans l'équation (2.13), nous obtenons

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk} = \left\langle \left[c_k^\dagger c_j, H \right] \right\rangle. \tag{2.14}$$

2.2.4 Propriétés qualitatives et quantitatives

Dans cette thèse, nous allons nous attacher particulièrement à la recherche des modèles continus et numériques qui préservent un certain nombre de propriétés. La matrice densité doit vérifier certaines propriétés portant sur

- les probabilités d'occupation des états ρ_{jj} ;
- les modules des probabilités de transition entre les états $|\rho_{jk}|$;
- la somme des probabilités d'occupation des états quantiques : la somme des éléments diagonaux de ρ, c'est-à-dire tout simplement la trace de la matrice densité ;
- le lien entre les probabilités de transition pour les deux sens de transition, c'est-à-dire le lien entre ρ_{jk} et ρ_{kj}, pour tous j et k.

Trace de la matrice densité. L'opérateur trace, noté Tr, appliqué à une matrice, donne la somme des éléments diagonaux de cette matrice. Nous avons ainsi

$$\mathrm{Tr}(\rho) = \sum_j \rho_{jj}.$$

Puisque les éléments ρ_{jj} sont les probabilités d'occupation des états, la somme de ces probabilités doit être égale au nombre total d'électrons. Pour que le modèle ait un sens physique, il faut la conservation du nombre d'électrons pour tout temps t : $\mathrm{Tr}(\rho(t)) = \mathrm{Tr}(\rho_0)$.

Hermicité de la matrice densité. Une matrice carrée M est dite hermitienne lorsqu'elle est égale à la transposée de son conjugué $M = (\bar{M})^t = M^*$. Les formules (2.9) et (2.12) montrent que la matrice densité est hermitienne par définition. L'hermicité de la matrice densité garantit l'égalité entre les modules des éléments ρ_{jk} et ρ_{kj}.

Positivité de la matrice densité. La positivité de la matrice densité permet de déduire les signes des populations et les bornes des modules des cohérences. La matrice ρ est dite positive si

$$\forall X \in \mathbb{C}^N, \qquad X^* \rho X \geq 0.$$

En utilisant la formule (2.9), on montre que la matrice densité est positive par définition. Soit $X \in \mathbb{C}^N$, on a

$$X^* \rho X = X^* \psi(r,t) \psi^*(r,t) X = Y^* Y,$$

avec $Y = \psi^*(r,t)X$.
Pour une matrice ρ positive, les deux propriétés suivantes sont vérifiées :

$$\forall j,k \in \{1,...,N\}, \qquad \rho_{jj} \geq 0 \quad \text{et} \quad |\rho_{jk}|^2 \leq \rho_{jj}\rho_{kk}.$$

La seconde propriété s'obtient en prenant un vecteur dont tous les éléments sont nuls sauf le $j$ème et $k$ème éléments. Elle traduit le fait que la transition entre deux niveaux dépend notamment de leur peuplement.

2.2.5 Modèle à deux espèces d'électron

Les systèmes quantiques à deux espèces d'électron sont ceux contenant deux bandes, la bande de conduction et la bande de valence. Pour ces types de systèmes, on peut citer les puits quantiques, les fils quantiques et les boîtes quantiques. Dans ces systèmes, on définit quatre opérateurs de champ qui se décomposent suivant les états propres des deux bandes.

$$\hat{\psi}_{\mathrm{c}}(r,t) = \sum_j c_j \psi_j^{\mathrm{c}}(r) \quad \text{et} \quad \hat{\psi}_{\mathrm{c}}^\dagger(r,t) = \sum_j c_j^\dagger \psi_j^{\mathrm{c}*}(r), \tag{2.15a}$$

$$\hat{\psi}_{\mathrm{v}}(r,t) = \sum_j v_j \psi_j^{\mathrm{v}}(r) \quad \text{et} \quad \hat{\psi}_{\mathrm{v}}^\dagger(r,t) = \sum_j v_j^\dagger \psi_j^{\mathrm{v}*}(r). \tag{2.15b}$$

Les opérateurs d'annihilation et de création obéissent aux lois d'anti-commutation.

$$\{c_j, c_k^\dagger\} = \delta_{jk}, \quad \{c_j, c_k\} = \{c_j^\dagger, c_k^\dagger\} = 0, \tag{2.16a}$$

$$\{v_j, v_k^\dagger\} = \delta_{jk}, \quad \{v_j, v_k\} = \{v_j^\dagger, v_k^\dagger\} = 0. \tag{2.16b}$$

Ces relations d'anti-commutation découlent de (2.3). Les opérateurs d'annihilation et de création pour deux espèces différentes d'électron commutent :

$$[v_j, c_k] = [v_j, c_k^\dagger] = [v_j^\dagger, c_k^\dagger] = 0. \tag{2.17}$$

On définit une unique matrice densité pour le système à deux espèces d'électron

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho^{\mathrm{c}} & \rho^{\mathrm{cv}} \\ \rho^{\mathrm{vc}} & \rho^{\mathrm{v}} \end{pmatrix}, \tag{2.18}$$

avec $\rho^{\mathrm{c}}_{jk} = \left\langle c^{\dagger}_k c_j \right\rangle$, $\rho^{\mathrm{v}}_{jk} = \left\langle v^{\dagger}_k v_j \right\rangle$, $\rho^{\mathrm{cv}}_{jk} = \left\langle v^{\dagger}_k c_j \right\rangle$ et $\rho^{\mathrm{vc}}_{jk} = \left\langle c^{\dagger}_k v_j \right\rangle$.
L'évolution temporelle des différents éléments est donnée par l'équation (2.13).
Dans les systèmes à deux espèces, on retrouve deux types de cohérences. Les cohérences au sein de la même bande $\rho^{\mathrm{c}}_{jk} = \left\langle c^{\dagger}_k c_j \right\rangle$ et $\rho^{\mathrm{v}}_{jk} = \left\langle v^{\dagger}_k v_j \right\rangle$ pour $j \neq k$ sont appelés les cohérences intra-bandes. Les cohérences entre deux bandes $\rho^{\mathrm{cv}}_{jk} = \left\langle v^{\dagger}_k c_j \right\rangle$ et $\rho^{\mathrm{vc}}_{jk} = \left\langle c^{\dagger}_k v_j \right\rangle$ sont les cohérences inter-bandes.

2.2.6 Théorème de Wick

Le théorème de Wick est largement utilisé en physique statistique et en mécanique quantique, dans le cadre des calculs des observables physiques complexes. Il a été démontré dans [Wic50, Das08, Elb95]. Avant d'énoncer le théorème, définissons deux notions : l'ordre normal et la contraction des opérateurs.

Définition 2 (Ordre normal)**.** *L'ordre normal est un ordre dans lequel tous les opérateurs de création se trouvent à gauche et ceux d'annihilation à droite.*

Définition 3 (Contraction)**.** *Soient A et B deux opérateurs d'annihilation et/ou de création (ou encore des combinaisons linéaires des opérateurs d'annihilation et de création). La contraction du produit AB notée $C(AB)$, est la différence entre l'opérateur et sa forme normale.*

$$C(AB) = AB - N(AB),$$

où $N(O)$ est l'écriture de l'observable O dans l'ordre normal.

Exemple 1.

$$C(c_j c_k) = c_j c_k - N(c_j c_k) = c_j c_k - c_j c_k = 0,$$
$$C(c^{\dagger}_j c^{\dagger}_k) = c^{\dagger}_j c^{\dagger}_k - N(c^{\dagger}_j c^{\dagger}_k) = c^{\dagger}_j c^{\dagger}_k - c^{\dagger}_j c^{\dagger}_k = 0,$$
$$C(c_j c^{\dagger}_k) = c_j c^{\dagger}_k - N(c_j c^{\dagger}_k) = c_j c^{\dagger}_k - c^{\dagger}_k c_j = [c_j, c^{\dagger}_k].$$

Théorème 1 (Théorème de Wick)**.** *La valeur moyenne d'un produit d'opérateurs $\Pi^{p}_{j=1} A_j$ (création et/ou d'annihilation) est égale à la somme de tous les produits possibles des observables de paires de ces opérateurs. Chaque produit est multiplié par la signature de la permutation requise pour amener ensemble les opérateurs contractés.*

Exemple 2. *Calculons la moyenne du produit de deux opérateurs de création et deux opérateurs d'annihilation. Soient α_1, α_2, α_3 et α_4 quatre indices, $c^{\dagger}_{\alpha_1}$ et $c^{\dagger}_{\alpha_2}$ deux opérateurs de création et c_{α_3} et c_{α_3} deux opérateurs d'annihilation.*

$$\left\langle c^{\dagger}_{\alpha_1} c^{\dagger}_{\alpha_2} c_{\alpha_3} c_{\alpha_4} \right\rangle = \left\langle c^{\dagger}_{\alpha_1} c_{\alpha_4} \right\rangle \left\langle c^{\dagger}_{\alpha_2} c_{\alpha_3} \right\rangle - \left\langle c^{\dagger}_{\alpha_1} c_{\alpha_3} \right\rangle \left\langle c^{\dagger}_{\alpha_2} c_{\alpha_4} \right\rangle.$$

Convention d'écriture 1. *Dans les transformations sur les ordres des opérateurs de création et d'annihilation, nous soulignons les opérateurs qui doivent être permutés à l'étape d'après*

- *dans le cas de deux opérateurs, l'opérateur de droite doit passer à gauche et celui de gauche à droite,*

- *dans le cas de plusieurs opérateurs soulignés, il faut considérer tout d'abord les deux premiers opérateurs à gauche, les permuter avec le processus de deux opérateurs, après permuter les deux opérateurs à droite du premier opérateur à gauche, ainsi de suite jusqu'à ce que le premier opérateur de gauche du départ se trouve à droite de tous les opérateurs soulignés.*

Dans la suite du document, les dérivations faites en première quantification concernent les systèmes contenant un seul électron et quant aux dérivations en seconde quantification, elles sont faites pour les systèmes à plusieurs électrons et à deux bandes d'énergie.

2.3 Hamiltonien libre

L'hamiltonien d'un système est l'opérateur associé à son énergie. Il faut donc pour tout type de système (les gaz d'électrons, les cristaux, les puits quantiques et les boîtes quantiques) considérer tout d'abord l'énergie libre. L'hamiltonien associé à l'énergie libre est donné dans [HK09] pour les gaz d'électrons, dans [GH03] pour les semi-conducteurs, et dans [HK09, Bid10, GH03] pour les boîtes quantiques.
Dans les boîtes quantiques, nous avons deux hamiltoniens pour les deux espèces d'électrons (voir par exemple [Bid10, BT12]).

2.3.1 Hamiltonien libre en première quantification

L'hamiltonien associé à l'énergie libre dans les boîtes quantiques est égale à la somme de l'opérateur $-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta$ et du potentiel de confinement $V_c(r)$. Le potentiel de confinement dépend des caractéristiques physiques de la boîte. L'hamiltonien est donné par

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V_c(r). \tag{2.19}$$

Puisque le laplacien est un opérateur auto-adjoint, $\hat{H}_0$ est également hermitien si $V_c(r)$ est une fonction à valeurs réelles. Les premiers états propres associés à l'hamiltonien $\hat{H}_0$ sont les états liés et leur spectre énergétique est discret. Les éléments $\{\mathcal{E}_1, ..., \mathcal{E}_N\}$ du spectre énergétique sont les valeurs propres de l'opérateur $\hat{H}_0$. Pour tout j, on a

$$\hat{H}_0\psi_j(r) = \mathcal{E}_j\psi_j(r). \tag{2.20}$$

2.3.2 Hamiltonien libre en seconde quantification

En seconde quantification, les hamiltoniens associés aux valeurs propres de (2.19) sont

$$H_j^{\mathrm{c}} = \int \hat{\psi}_{\mathrm{c}}^{\dagger}(r,t)\hat{H}_{0,j}^{\mathrm{c}}\hat{\psi}_{\mathrm{c}}(r,t)dr, \tag{2.21a}$$

$$H_j^{\mathrm{v}} = \int \hat{\psi}_{\mathrm{v}}^{\dagger}(r,t)\hat{H}_{0,j}^{\mathrm{v}}\hat{\psi}_{\mathrm{v}}(r,t)dr, \tag{2.21b}$$

où pour tout $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$

$$\hat{H}_{0,j}^{\delta}\psi_\alpha(r) = \begin{cases} \mathcal{E}_j^{\delta}\psi_j(r) & \text{si} \quad \alpha = j, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Remplaçons les opérateurs de champ par les décompositions (2.15) dans (2.21)

$$H_j^{\mathrm{c}} = \sum_{\alpha,\alpha'} \left(\int \psi_\alpha^{\mathrm{c}*}(r)\hat{H}_{0,j}^{\mathrm{c}}\psi_{\alpha'}^{\mathrm{c}}(r)dr \right) c_\alpha^{\dagger}c_{\alpha'},$$

$$H_j^{\mathrm{v}} = \sum_{\alpha,\alpha'} \left(\int \psi_\alpha^{\mathrm{v}*}(r) \hat{H}_{0,j}^{\mathrm{v}} \psi_{\alpha'}^{\mathrm{v}}(r) dr \right) v_\alpha^\dagger v_{\alpha'}.$$

En utilisant les propriétés d'orthonormalité des fonctions propres, on obtient

$$H_j^{\mathrm{c}} = \mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} c_j^\dagger c_j \quad \text{et} \quad H_j^{\mathrm{v}} = \mathcal{E}_j^{\mathrm{v}} v_j^\dagger v_j.$$

L'hamiltonien total du système libre est donné par

$$H_0 = \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{c}}} H_j^{\mathrm{c}} + \sum_{k=1}^{N_{\mathrm{v}}} H_k^{\mathrm{v}} = H_0^{\mathrm{c}} + H_0^{\mathrm{v}},$$

où N_{c} et N_{v} sont les nombres d'états propres considérés respectivement dans les bandes de conduction et de valence.

2.3.3 Évolution libre de la densité en première quantification

Dans le formalisme de Schrödinger, l'évolution temporelle de la densité est donnée par l'équation de Liouville (2.10).

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk} &= \left[\hat{H}_0, \rho\right]_{jk} \\ &= \hat{H}_0 \rho_{jk} - \rho_{jk} \hat{H}_0. \end{aligned} \tag{2.23}$$

En utilisant l'équation aux valeurs propres (2.2), les deux termes à droite de l'égalité de (2.23) donnent

$$\hat{H}_0 \rho_{jk} = \mathcal{E}_j \rho_{jk} \quad \text{et} \quad \rho_{jk} \hat{H}_0 = \mathcal{E}_k \rho_{jk},$$

et finalement

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk} = (\mathcal{E}_j - \mathcal{E}_k) \rho_{jk}.$$

Écriture matricielle.

En posant $\tilde{E}_0 = \mathrm{diag}\,(\mathcal{E}_1, ..., \mathcal{E}_N)$, l'évolution de la matrice densité (2.9) s'écrit

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho|_{\mathrm{Libre}} = \left[\tilde{E}_0, \rho\right].$$

2.3.4 Évolution libre de la densité en seconde quantification

La dérivation du modèle de Bloch commence avec l'équation de Heisenberg (2.14). Elle consiste à expliciter les seconds membres :

$$\left[c_k^\dagger c_j, H_0\right] = \left[c_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right] + \left[c_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{v}}\right], \tag{2.24}$$

$$\left[v_k^\dagger v_j, H_0\right] = \left[v_k^\dagger v_j, H_0^{\mathrm{c}}\right] + \left[v_k^\dagger v_j, H_0^{\mathrm{v}}\right] \tag{2.25}$$

et

$$\left[v_k^\dagger c_j, H_0\right] = \left[v_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right] + \left[v_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{v}}\right]. \tag{2.26}$$

Commutateurs nuls.

Les relations de commutation entre les opérateurs d'annihilation et de création, données par (2.17), permettent d'affirmer que les commutateurs $\left[c_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{v}}\right]$ et $\left[v_k^\dagger v_j, H_0^{\mathrm{c}}\right]$ sont nuls.

Évolution des densités de la bande de conduction.

L'évolution temporelle de la densité intra-bande de la bande de conduction ρ_{jk}^{c} ne dépend que du commutateur $\left[c_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right]$.

$$\left[c_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right] = \sum_\alpha \mathcal{E}_\alpha^{\mathrm{c}} \left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger c_\alpha\right],$$

en utilisant la convention d'écriture 1, on a

$$\begin{aligned}
\left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger c_\alpha\right] &= c_k^\dagger \underline{c_j c_\alpha^\dagger} c_\alpha - c_\alpha^\dagger c_\alpha c_k^\dagger c_j \\
&= \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger c_\alpha - \underline{c_k^\dagger c_\alpha^\dagger} \underline{c_j c_\alpha} - c_\alpha^\dagger c_\alpha c_k^\dagger c_j \\
&= \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger c_\alpha - c_\alpha^\dagger \underline{c_k^\dagger c_\alpha} c_j - c_\alpha^\dagger c_\alpha c_k^\dagger c_j \\
&= \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger c_\alpha - \delta_{\alpha,k} c_\alpha^\dagger c_j.
\end{aligned}$$

On obtient ainsi l'évolution de ρ_{jk}^{c}

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{c}} = \left\langle \left[c_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right] \right\rangle = (\mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} - \mathcal{E}_k^{\mathrm{c}}) \langle c_k^\dagger c_j \rangle = (\mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} - \mathcal{E}_k^{\mathrm{c}}) \rho_{jk}^{\mathrm{c}}. \tag{2.27}$$

Évolution des densités de la bande de valence.

De la même manière que précédemment, nous obtenons

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{v}} = (\mathcal{E}_j^{\mathrm{v}} - \mathcal{E}_k^{\mathrm{v}}) \rho_{jk}^{\mathrm{v}}. \tag{2.28}$$

Évolution des densités inter-bandes.

Pour les densités inter-bandes, les deux commutateurs $\left[v_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right]$ et $\left[v_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{v}}\right]$ sont non-nuls. On calcule

$$\left[v_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{c}}\right] = \sum_\alpha \mathcal{E}_\alpha^{\mathrm{c}} \left[v_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger c_\alpha\right] = \mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} v_k^\dagger c_j$$

et

$$\left[v_k^\dagger c_j, H_0^{\mathrm{v}}\right] = \sum_\alpha \mathcal{E}_\alpha^{\mathrm{v}} \left[v_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger v_\alpha\right] = -\mathcal{E}_k^{\mathrm{v}} v_k^\dagger c_j,$$

ce qui donne l'équation d'évolution

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{cv}} = (\mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} - \mathcal{E}_k^{\mathrm{v}}) \rho_{jk}^{\mathrm{cv}}. \tag{2.29}$$

Écriture matricielle.

Posons

$$E_0 = \mathrm{diag}\left(\mathcal{E}_1^{\mathrm{c}}, ..., \mathcal{E}_{N_{\mathrm{c}}}^{\mathrm{c}}, \mathcal{E}_1^{\mathrm{v}}, ..., \mathcal{E}_{N_{\mathrm{v}}}^{\mathrm{v}}\right)$$

la matrice diagonale contenant les énergies des différents états propres. On regroupe les équations (2.27), (2.28) et (2.29) dans une équation matricielle avec la variable ρ et on obtient

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho|_{\mathrm{Libre}} = [E_0, \rho]. \tag{2.30}$$

2.4 Action d'un champ électrique

L'étude de l'interaction entre les boîtes quantiques et le champ électromagnétique permet de déterminer les caractérisations des boîtes et de connaître les avantages de leur utilisation dans des dispositifs optiques.
L'interaction entre la lumière et la matière a été envisagée dans le cas des atomes isolés, des cristaux, des puits quantiques, des fils quantiques et même des boîtes quantiques. Les modèles utilisés pour prédire le comportement des lasers à boîtes quantiques sont donnés dans [GH03]. Ils font intervenir des termes liés par exemple aux émissions spontanées, émissions stimulées. Ces modèles ont été dérivés et mis en œuvre pour les puits quantiques [SKM94].
Dans notre cas, pour écrire le modèle de Bloch pour l'interaction laser–boîte, nous allons tout d'abord écrire l'opérateur hamiltonien total de l'interaction entre le laser et les boîtes quantiques et après utiliser cet hamiltonien pour construire le modèle de Bloch grâce à l'équation d'Heisenberg ou de Schrödinger.

2.4.1 Hamiltonien de l'interaction laser–boîte

Première quantification

Dans l'approche classique, le potentiel de l'interaction entre le champ électromagnétique et la matière est donné souvent par l'approximation dipolaire. L'approximation dipolaire donne le premier terme du développement limité du potentiel de couplage entre le champ et le dipôle électrique. Ce terme du premier ordre est l'opposé du produit scalaire du champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{R},t)$ et l'opérateur dipolaire $\mathbf{p}(r)$ où le vecteur $\mathbf{R}$ est la position macroscopique de la boîte considérée.

$$V(r,t) = -\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{p}(r) = -\sum_{\mu\in\{x,y,z\}} \mathbf{E}^*_\mu(\mathbf{R},t)\mathbf{p}_\mu(r). \tag{2.31}$$

La formule de l'opérateur dipolaire est donnée par

$$\mathbf{p}(r) = er,$$

où e est la charge de l'électron.

Seconde quantification

L'hamiltonien associé au potentiel (2.31) en seconde quantification est donné par

$$\begin{aligned} H^{Lc} &= \int \hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{c}}(r,t)V(r,t)\hat{\psi}_{\mathrm{c}}(r,t) \\ &= -\int \hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{c}}(r,t)\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{p}(r)\hat{\psi}_{\mathrm{c}}(r,t)dr \\ &= -e\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\int \hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{c}}(r,t)r\hat{\psi}_{\mathrm{c}}(r,t)dr. \end{aligned} \tag{2.32}$$

Remplaçons les opérateurs champs par leurs expressions (2.15) dans (2.32) :

$$H^{Lc} = -e \sum_{\alpha,\alpha'} c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \cdot \int \psi_\alpha^{c*}(r) r \psi_{\alpha'}^{c}(r) dr.$$

Posons

$$\mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{c} = -e \int \psi_\alpha^{c*}(r) r \psi_{\alpha'}^{c}(r) dr,$$

où $\mathbf{M}^c$ est une matrice à valeurs dans $\mathbb{C}^3$. L'hamiltonien devient ainsi

$$H^{Lc} = \sum_{\alpha,\alpha'} \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \cdot \mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{v} c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}. \tag{2.33}$$

De la même manière, les hamiltoniens pour la bande de valence et les hamiltoniens inter-bandes donnent respectivement

$$H^{Lv} = \sum_{\alpha,\alpha'} \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \cdot \mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{v} v_\alpha^\dagger v_{\alpha'}, \tag{2.34}$$

$$H^{Lcv} = \sum_{\alpha,\alpha'} \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \cdot \left(\mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{cv} c_\alpha^\dagger v_{\alpha'} + \mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{vc} v_\alpha^\dagger c_{\alpha'} \right), \tag{2.35}$$

où les éléments des matrices $\mathbf{M}^v$ et $\mathbf{M}^{cv}$ sont donnés par

$$\mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{v} = -e \int \psi_\alpha^{v*}(r) r \psi_{\alpha'}^{v}(r) dr \quad \text{et} \quad \mathbf{M}_{\alpha,\alpha'}^{cv} = -e \int \psi_\alpha^{c*}(r) r \psi_{\alpha'}^{v}(r) dr.$$

Les trois matrices $\mathbf{M}^c$, $\mathbf{M}^v$ et $\mathbf{M}^{cv}$ sont appelées moments dipolaires.
L'hamiltonien total de l'interaction entre le laser et les boîtes quantiques est la somme des trois hamiltoniens (2.33), (2.34) et (2.35).

$$H^L = H^{Lc} + H^{Lv} + H^{Lcv}.$$

2.4.2 Évolution temporelle de la densité en première quantification

Soit $\mathbf{M}(r)$ la matrice représentant l'opérateur dipolaire $P(r)$ dans la base des états propres de $\hat{H}_0$. L'évolution de la densité ρ_{jk} se déduit à partir de l'équation de Liouville (2.10).

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk} &= [V(r,t), \rho]_{jk} \\ &= \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \cdot [\mathbf{M}, \rho]_{jk}. \end{aligned}$$

La variation de la matrice densité (2.9) donne

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho|_{\text{Champ}} = \mathbf{E}(\mathbf{R},t) \cdot [\mathbf{M}, \rho]. \tag{2.36}$$

2.4.3 Évolution temporelle de la densité en seconde quantification

L'évolution de la matrice densité en seconde quantification découle de l'équation de Heisenberg (2.14). Les calculs reposent sur la détermination du commutateur au second membre de l'équation (2.13), associé à l'hamiltonien H^L et aux opérateurs qui composent les éléments de la matrice densité. Grâce aux relations de commutation entre les opérateurs d'annihilation et de création, nous pouvons tout d'abord identifier tous les termes nuls dans les expressions des commutateurs.

Commutateurs nuls

Grâce aux relations de commutation et d'anti-commutation entre les opérateurs d'annihilation et de création, nous avons

$$\left[c_k^\dagger c_j, H^{L\mathrm{v}}\right] = \left[v_k^\dagger v_j, H^{Lc}\right] = 0.$$

Évolution temporelle des densités de conduction

La dynamique des éléments ρ^{c}_{jk} dépend des observables $\left\langle \left[c_k^\dagger c_j, H^{Lc}\right]\right\rangle$ et $\left\langle \left[c_k^\dagger c_j, H^{L\mathrm{cv}}\right]\right\rangle$ dont les commutateurs se décomposent ainsi

$$\left[c_k^\dagger c_j, H^{Lc}\right] = \sum_{\alpha,\alpha'} \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot \mathbf{M}^{\mathrm{c}}_{\alpha,\alpha'} \left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\right]$$

et

$$\left[c_k^\dagger c_j, H^{L\mathrm{cv}}\right] = \sum_{\alpha,\alpha'} \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot \left(\mathbf{M}^{\mathrm{cv}}_{\alpha,\alpha'} \left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger v_{\alpha'}\right] + \mathbf{M}^{\mathrm{vc}}_{\alpha,\alpha'} \left[c_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\right]\right).$$

La détermination de la dynamique revient aux calculs des commutateurs $\left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\right]$, $\left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger v_{\alpha'}\right]$ et $\left[c_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\right]$. En utilisant les relations d'anti-commutation (2.16) et en appliquant la convention d'écriture 1, on obtient

$$\begin{aligned}
\left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\right] &= c_k^\dagger \underline{c_j c_\alpha^\dagger} c_{\alpha'} - c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} c_k^\dagger c_j \\
&= \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger c_{\alpha'} - \underline{c_k^\dagger c_\alpha^\dagger c_j c_{\alpha'}} - c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} c_k^\dagger c_j \\
&= \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger c_{\alpha'} - c_\alpha^\dagger \underline{c_k^\dagger c_{\alpha'}} c_j - c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} c_k^\dagger c_j \\
&= \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger c_{\alpha'} - \delta_{\alpha',k} c_\alpha^\dagger c_j.
\end{aligned}$$

De la même manière, on a

$$\left[c_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger v_{\alpha'}\right] = \delta_{\alpha,j} c_k^\dagger v_{\alpha'},$$

et

$$\left[c_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\right] = -\delta_{\alpha',k} v_\alpha^\dagger c_j.$$

L'évolution temporelle de la densité donne

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{c}}_{jk} &= \left\langle\left[c^\dagger_k c_j, H^L\right]\right\rangle \\
&= \sum_\alpha \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\left(\mathbf{M}^{\mathrm{c}}_{j,\alpha}\left\langle c^\dagger_k c_\alpha\right\rangle - \mathbf{M}^{\mathrm{c}}_{\alpha,k}\left\langle c^\dagger_\alpha c_j\right\rangle + \mathbf{M}^{\mathrm{cv}}_{j,\alpha}\left\langle c^\dagger_k v_\alpha\right\rangle - \mathbf{M}^{\mathrm{vc}}_{\alpha,k}\left\langle v^\dagger_\alpha c_j\right\rangle\right) \\
&= \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\left([\mathbf{M}^{\mathrm{c}},\rho^{\mathrm{c}}]_{jk} + (M^{\mathrm{cv}}\rho^{\mathrm{vc}})_{jk} - (\rho^{\mathrm{cv}}M^{\mathrm{vc}})_{jk}\right). \qquad (2.38)
\end{aligned}$$

Évolution temporelle des densités de valence

De la même que précédemment, nous obtenons

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{v}}_{jk} = \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\left([\mathbf{M}^{\mathrm{v}},\rho^{\mathrm{v}}]_{jk} + (M^{\mathrm{vc}}\rho^{\mathrm{cv}})_{jk} - (\rho^{\mathrm{vc}}M^{\mathrm{cv}})_{jk}\right). \qquad (2.39)$$

Évolution temporelle des densités inter-bandes

La dynamique des densités inter-bandes ρ^{cv}_{jk} dépend du commutateur

$$\begin{aligned}
\left[v^\dagger_k c_j, H^L\right] &= \sum_{\alpha,\alpha'}\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\left(\mathbf{M}^{\mathrm{c}}_{\alpha,\alpha'}\left[v^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha c_{\alpha'}\right] + \mathbf{M}^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha'}\left[v^\dagger_k c_j, v^\dagger_\alpha v_{\alpha'}\right]\right. \\
&\qquad \left. + \mathbf{M}^{\mathrm{cv}}_{\alpha,\alpha'}\left[v^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha v_{\alpha'}\right]\right).
\end{aligned}$$

En appliquant la convention d'écriture 1 et en utilisant les relations de commutation et d'anti-commutation, les commutateurs valent

$$\left[v^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha c_{\alpha'}\right] = \delta_{\alpha,j} v^\dagger_k c_{\alpha'},$$

$$\left[v^\dagger_k c_j, v^\dagger_\alpha v_{\alpha'}\right] = -\delta_{\alpha',k} v^\dagger_\alpha c_j$$

et

$$\left[v^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha v_{\alpha'}\right] = \delta_{\alpha,j} v^\dagger_k v_{\alpha'} - \delta_{\alpha',k} c^\dagger_\alpha c_j.$$

Finalement nous obtenons

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{cv}}_{jk} = \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot(\mathbf{M}^{\mathrm{c}}\rho^{\mathrm{cv}} - \rho^{\mathrm{cv}}\mathbf{M}^{\mathrm{v}} + \mathbf{M}^{\mathrm{cv}}\rho^{\mathrm{v}} - \rho^{\mathrm{c}}\mathbf{M}^{\mathrm{cv}})_{jk}. \qquad (2.40)$$

On regroupe les équations (2.38), (2.39) et (2.40) dans une unique équation matricielle pour la matrice densité (2.18) :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho|_{\mathrm{Champ}} = \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot[\mathbf{M},\rho]. \qquad (2.41)$$

2.4.4 Modèle de Bloch

Le modèle de Bloch pour l'interaction entre le laser et les boîtes quantiques est composé des équations (2.3.3) et (2.36) en première quantification et des équations (2.30) et (2.41) en seconde quantification. Les deux formalismes donnent bien des équations de Liouvillle. Le modèle de Bloch pour l'interaction laser–boîte quantique :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho = [E_0,\rho] + \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot[\mathbf{M},\rho]. \qquad (2.42)$$

2.5 Interaction de Coulomb

Dans les systèmes à plusieurs particules, comme les gaz d'électrons, les cristaux, les puits quantiques, les fils quantiques et même les boîtes quantiques, les particules chargées se repoussent ou s'attirent. Elles se repoussent si les charges sont de même signe et s'attirent dans le cas contraire. Ces deux actions (répulsion et attraction) constituent l'interaction de Coulomb et nous allons montrer qu'elles modifient les états quantiques du système. L'interaction de Coulomb est une correction des modèles mathématiques simplifiés, utilisés pour étudier les propriétés microscopiques ou même macroscopiques des systèmes physiques.
Dans [HK09], au chapitre 7, un hamiltonien de Coulomb est développé pour les gaz d'électrons dans les solides en utilisant l'approximation du modèle du jellium qui consiste à négliger le détail de la structure des gaz et à considérer celle-ci comme un fond de charges positives. Cet hamiltonien est écrit en première quantification en considérant les densités de charges pour les électrons ρ_e et pour les ions ρ_i

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha' \in \{e,i\}} \int \rho_\alpha(r) W(r,r') \rho_{\alpha'}(r') dr dr', \tag{2.43}$$

où $W(r,r')$ est le potentiel d'interaction.
Après une transformation de Fourier 3D en espace de (2.43) et un passage en seconde quantification, en transformation des densités de charges en opérateurs canoniques, on trouve

$$\hat{H}_C = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s,s'} V_{\mathbf{q}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},s'} \hat{a}_{\mathbf{k}',s'} \hat{a}_{\mathbf{k}',s}, \tag{2.44}$$

où $V_{\mathbf{q}}$ est le potentiel de Coulomb, son expression est donnée dans [HK09] et $\hat{a}_{\mathbf{k},s}$ et $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k},s}$ sont respectivement les opérateurs d'annihilation et de création pour le vecteur d'état $\mathbf{k}$ et le spin s.
Le chapitre 12 de [HK09] porte sur les équations de Bloch des puits quantiques. L'hamiltonien de l'interaction de Coulomb utilisé dans la dérivation du modèle ne dépend pas des spins des particules mais dépend de deux espèces d'électron :

$$\hat{H}_C = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \left(a^\dagger_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} + a^\dagger_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} + 2 a^\dagger_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^\dagger_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}} a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \right). \tag{2.45}$$

Les hamiltoniens de Coulomb donnés dans [BP99] et [OAM99] sont écrits en première quantification. Ils permettent d'étudier des propriétés qualitatives des boîtes quantiques relativement à leurs tailles et à leurs formes. Ces hamiltoniens d'interaction entre un électron à la position $\mathbf{r}_e$ et un trou à la position $\mathbf{r}_h$ sont donnés dans les deux articles par

$$\hat{H}_C = -\frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|},$$

où ϵ est la permittivité du milieu.
On retrouve une approche de la matrice densité pour les puits quantiques dans [HP97] avec la prise en compte de l'interaction de Coulomb entre les électrons. L'hamiltonien de Coulomb est donné en seconde quantification avec les opérateurs champs à une seule particule. La densité pour un système à deux et trois particules dépend respectivement de quatre et six opérateurs champs à une seule particule.
Ce modèle est utilisé dans [HRM99] sans aucun détail de dérivation. Il est utilisé pour analyser numériquement les effets optiques lors de l'interaction du milieu avec le champ.

Le modèle de l'interaction de Coulomb développé dans cette thèse part d'un hamiltonien écrit en seconde quantification dans le modèle électron–trou. Ce modèle électron–trou est transformé dans le modèle conduction–valence pour des raisons de symétrie. L'hamiltonien obtenu est inséré dans l'équation de Heisenberg pour obtenir un modèle de Bloch prenant en compte l'interaction de Coulomb dans les boîtes quantiques.

2.5.1 Hamiltonien de Coulomb pour les paires électron–trou

La figure 2.1 est le diagramme de Feymann de l'interaction mutuelle entre deux particules quelconques.

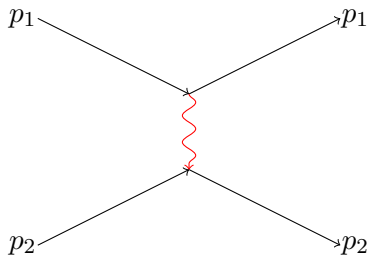


FIGURE 2.1 – Diagramme de Feymann de deux particules en interaction.

Hypothèse 1. *Lors de l'interaction coulombienne, les particules sont annihilées puis crées aux mêmes positions.*

Considérons un système à N excitons (paires électron–trou). Dans ce système, il existe trois types d'hamiltoniens de Coulomb :

- deux hamiltoniens de répulsion (électron–électron et trou–trou),
- un seul hamiltonien d'attraction (électron–trou).

Les écritures de ces hamiltoniens en seconde quantification sont données dans [HK09, HLK90] pour les boîtes quantiques (chapitre 20). Nous avons

$$H^{\mathrm{e-e}} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\int\int \hat{\psi}_{\mathrm{e}}^{\dagger}(r_j,t)\hat{\psi}_{\mathrm{e}}^{\dagger}(r_k,t)V^{\mathrm{e}}(r_{jk})\hat{\psi}_{\mathrm{e}}(r_k,t)\hat{\psi}_{\mathrm{e}}(r_j,t)dr_j dr_k, \tag{2.46a}$$

$$H^{\mathrm{h-h}} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\int\int \hat{\psi}_{\mathrm{h}}^{\dagger}(r_j,t)\hat{\psi}_{\mathrm{h}}^{\dagger}(r_k,t)V^{\mathrm{h}}(r_{jk})\hat{\psi}_{\mathrm{h},t}(r_k,t)\hat{\psi}_{\mathrm{h}}(r_j,t)dr_j dr_k, \tag{2.46b}$$

$$H^{\mathrm{e-h}} = \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\int\int \hat{\psi}_{\mathrm{e}}^{\dagger}(r_j,t)\hat{\psi}_{\mathrm{h}}^{\dagger}(r_k,t)V^{\mathrm{e-h}}(r_{jk})\hat{\psi}_{\mathrm{h}}(r_k,t)\hat{\psi}_{\mathrm{e}}(r_j,t)dr_j dr_k. \tag{2.46c}$$

Les potentiels $V^{\mathrm{e}}(r_{jk})$, $V^{\mathrm{h}}(r_{jk})$ et $V^{\mathrm{e-h}}(r_{jk})$ sont des fonctions réelles, correspondant aux potentiels de Coulomb en première quantification.

$$V^{\mathrm{e}}(r_{jk}) = V^{\mathrm{h}}(r_{jk}) = -V^{\mathrm{e-h}}(r_{jk}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon|r_j - r_k|}.$$

L'hamiltonien de Coulomb total du système est égal à la somme des trois hamiltoniens :

$$H^{\mathrm{C}} = H^{\mathrm{e-e}} + H^{\mathrm{h-h}} + H^{\mathrm{e-h}}.$$

Les opérateurs de champ peuvent se décomposer dans la base des fonctions d'onde (2.4). Cette décomposition nous permet d'obtenir une forme explicite de l'hamiltonien de Coulomb en fonction des opérateurs d'annihilation et de création et nous permet de compléter le modèle de Bloch.
En remplaçant les opérateurs de champ par les expressions (2.15) pour le modèle électron–trou, dans les hamiltoniens (2.46), nous obtenons

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{e-e}} &= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\iint \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} \psi_{\alpha_1}^{\mathrm{e}*}(r_j)c_{\alpha_1}^{\dagger}\psi_{\alpha_2}^{\mathrm{e}*}(r_k)c_{\alpha_2}^{\dagger}V^{\mathrm{e}}(r_{jk})\psi_{\alpha_2'}^{\mathrm{e}}(r_k)c_{\alpha_2'}\psi_{\alpha_1'}^{\mathrm{e}}(r_j)c_{\alpha_1'}dr_j dr_k \\ &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{e}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}c_{\alpha_1}^{\dagger}c_{\alpha_2}^{\dagger}c_{\alpha_2'}c_{\alpha_1'}. \end{aligned} \tag{2.47}$$

De la même manière, on trouve

$$H^{\mathrm{h-h}} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}d_{\alpha_1}^{\dagger}d_{\alpha_2}^{\dagger}d_{\alpha_2'}d_{\alpha_1'}, \tag{2.48a}$$

$$H^{\mathrm{e-h}} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{e-h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}c_{\alpha_1}^{\dagger}d_{\alpha_2}^{\dagger}d_{\alpha_2'}c_{\alpha_1'}. \tag{2.48b}$$

Les termes devant les produits des opérateurs de création et d'annihilation sont appelés paramètres de Coulomb et dépendent des fonctions propres des différents états. Leurs expressions sont

$$R^{\mathrm{k}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} = \frac{N^2}{2}\iint \psi_{\alpha_1}^{\mathrm{k}*}(r)\psi_{\alpha_2}^{\mathrm{k}*}(r')V^{\mathrm{k}}(r,r')\psi_{\alpha_2'}^{\mathrm{k}}(r')\psi_{\alpha_1'}^{\mathrm{k}}(r)drdr', \tag{2.49a}$$

$$R^{\mathrm{k-k'}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} = N^2\iint \psi_{\alpha_1}^{\mathrm{k}*}(r)\psi_{\alpha_2}^{\mathrm{k'}*}(r')V^{\mathrm{k-k'}}(r,r')\psi_{\alpha_2'}^{\mathrm{k'}}(r')\psi_{\alpha_1'}^{\mathrm{k}}(r)drdr', \tag{2.49b}$$

pour $\mathrm{k}, \mathrm{k'} \in \{\mathrm{e}, \mathrm{h}\}$.

Propriété 1. *Puisque $V(r,r')$ dépend uniquement de $|r-r'|$, alors les relations suivantes sont vérifiées :*

$$\begin{aligned} R^{\mathrm{k}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4} &= R^{\mathrm{k}}_{\alpha_2,\alpha_1,\alpha_4,\alpha_3} \quad \forall \mathrm{k} \in \{\mathrm{e},\mathrm{h}\}, \\ R^{\mathrm{e-h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4} &= R^{\mathrm{h-e}}_{\alpha_2,\alpha_1,\alpha_4,\alpha_3}. \end{aligned} \tag{2.50}$$

Comme $V(r,r')$ est une fonction à valeurs réelles, alors :

$$R^{\mathrm{k}*}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4} = R^{\mathrm{k}}_{\alpha_3,\alpha_4,\alpha_1,\alpha_2} \quad \forall \mathrm{k} \in \{\mathrm{e},\mathrm{h},\mathrm{e}-\mathrm{h}\}.$$

En tenant compte des lois de commutation et d'anti-commutation des opérateurs d'annihilation et de création, il est possible d'établir la propriété suivante.

Propriété 2. *Les produits de 4 opérateurs de la forme $d^\dagger_{\alpha_1} d^\dagger_{\alpha_2} d_{\alpha'_2} d_{\alpha'_1}$ sont nuls si $\alpha_1 = \alpha_2$ et/ou $\alpha'_1 = \alpha'_2$.*

Les modèles de type Bloch sont symétriques dans la formulation à deux espèces d'électron conduction–valence. L'écriture du modèle symétrique dans cette formulation est envisagée dans la suite en se basant sur la relation entre les opérateurs des trous et des électrons.

2.5.2 Hamiltonien de Coulomb dans le modèle conduction–valence

Une relation entre les opérateurs d'annihilation des trous et les opérateurs de création des électrons de valence, est naturellement (voir [Bid10])

$$d_\alpha = v^\dagger_\alpha.$$

Cette relation signifie que l'annihilation d'un électron dans un état de valence est équivalente à la création d'un trou. On en déduit que

$$d^\dagger_{\alpha_1} d_{\alpha_2} = v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_2}.$$

On réécrit les hamiltoniens de Coulomb (2.47) et (2.48), avec les nouveaux opérateurs d'annihilation et de création :

$$H^{\mathrm{h-h}} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha'_2} v^\dagger_{\alpha'_1}.$$

L'hamiltonien de Coulomb des électrons de conduction reste inchangé parce qu'il est égal à l'hamiltonien de Coulomb des électrons (2.47) :

$$H^{\mathrm{e-e}} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} c^\dagger_{\alpha_1} c^\dagger_{\alpha_2} c_{\alpha'_2} c_{\alpha'_1}.$$

Le dernier hamiltonien des interactions conduction-valence nous donne

$$H^{\mathrm{e-h}} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{e-h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} c^\dagger_{\alpha_1} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}.$$

Les hamiltoniens $H^{\mathrm{h-h}}$ et $H^{\mathrm{e-h}}$ comportent des produits des opérateurs d'annihilation et de création, qui ne sont pas écrits dans l'ordre normal défini par la convention 2.
Pour mettre les produits d'opérateurs dans l'ordre normal, il faut utiliser les transformations de commutation et anti-commutation données par (2.16) et (2.17).

$$d^\dagger_{\alpha_1} d_{\alpha_2} = \delta_{\alpha_1,\alpha_2} - v^\dagger_{\alpha_2} v_{\alpha_1}.$$

La convention 1 permet de réécrire les opérateurs de l'hamiltonien $H^{\mathrm{h-h}}$:

$$\begin{aligned}
v_{\alpha_1}\underline{v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'}} v^\dagger_{\alpha_1'} &= \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_1'} - \underline{v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_2'}} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_1'} \\
&= \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_1'} + v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1} \underline{v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_1'}} \\
&= \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_1'} + \delta_{\alpha_1',\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1} - v^\dagger_{\alpha_2'} \underline{v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_1'}} v_{\alpha_2} \\
&= \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_1'} + \delta_{\alpha_1',\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1} - \delta_{\alpha_1,\alpha_1'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2} + \underline{v^\dagger_{\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'}} \underline{v_{\alpha_1} v_{\alpha_2}} \\
&= \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} \underline{v_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_1'}} - \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} \underline{v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_1'}} + \delta_{\alpha_1',\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1} - \delta_{\alpha_1,\alpha_1'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2} + v^\dagger_{\alpha_1'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2} v_{\alpha_1} \\
&= \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} \delta_{\alpha_1,\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'} v_{\alpha_1} - \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} \delta_{\alpha_1',\alpha_2} + \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'} v_{\alpha_2} + \delta_{\alpha_1',\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1} \\
&\quad -\delta_{\alpha_1,\alpha_1'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2} + v^\dagger_{\alpha_1'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2} v_{\alpha_1}.
\end{aligned}$$

Certains termes jouent un rôle identique dans la sommation à cause de l'invariance de la transformation $(\alpha_1, \alpha_1') \leftrightarrow (\alpha_2, \alpha_2')$ (2.50) :

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} \delta_{\alpha_2,\alpha_2'} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'} v_{\alpha_1} &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} \delta_{\alpha_1,\alpha_1'} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2}, \\
\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'} v_{\alpha_2} &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} \delta_{\alpha_1',\alpha_2} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1},
\end{aligned}$$

ce qui permet d'écrire

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'} \\
= &\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} \Big(\delta_{\alpha_2,\alpha_2'} \delta_{\alpha_1,\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1,\alpha_2'} \delta_{\alpha_2,\alpha_1'} - 2\delta_{\alpha_2,\alpha_2'} v^\dagger_{\alpha_1'} v_{\alpha_1} + 2\delta_{\alpha_1',\alpha_2} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_1} \\
&\qquad + v^\dagger_{\alpha_1'} v^\dagger_{\alpha_2'} v_{\alpha_2} v_{\alpha_1} \Big).
\end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned}
H^{\mathrm{h-h}} &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} \Big(\delta_{\alpha_2,\alpha'_2}\delta_{\alpha_1,\alpha'_1} - \delta_{\alpha_1,\alpha'_2}\delta_{\alpha_2,\alpha'_1} \\
&\qquad -2\delta_{\alpha_2,\alpha'_2} v^\dagger_{\alpha'_1} v_{\alpha_1} + 2\delta_{\alpha'_1,\alpha_2} v^\dagger_{\alpha'_2} v_{\alpha_1} + v^\dagger_{\alpha'_1} v^\dagger_{\alpha'_2} v_{\alpha_2} v_{\alpha_1}\Big) R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} \\
&= \sum_{\alpha_1,\alpha_2} (R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1,\alpha_2} - R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_2,\alpha_1}) + 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2}\sum_{\alpha} (R^{\mathrm{h}}_{\alpha_2,\alpha,\alpha,\alpha_1} - R^{\mathrm{h}}_{\alpha_2,\alpha,\alpha_1,\alpha}) v^\dagger_{\alpha_1} v_{\alpha_2} \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} v^\dagger_{\alpha'_1} v^\dagger_{\alpha'_2} v_{\alpha_2} v_{\alpha_1}.
\end{aligned}$$

Nous procédons de la même manière pour mettre les opérateurs de l'hamiltonien $H^{\mathrm{e-h}}$ sous la forme normale.

$$c^\dagger_{\alpha_1} \underline{v_{\alpha_2} v^\dagger_{\alpha'_2}} c_{\alpha'_1} = \delta_{\alpha_2,\alpha'_2} c^\dagger_{\alpha_1} c_{\alpha'_1} - c^\dagger_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha'_2} v_{\alpha_2} c_{\alpha'_1},$$

alors

$$H^{\mathrm{e-h}} = \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{e-h}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} (\delta_{\alpha_2,\alpha'_2} c^\dagger_{\alpha_1} c_{\alpha'_1} - c^\dagger_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha'_2} v_{\alpha_2} c_{\alpha'_1}).$$

Nous définissons les paramètres de Coulomb de ce modèle en fonction de ceux du modèle électron–trou.

$$\begin{aligned}
R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} &= R^{\mathrm{e}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2}, \\
R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} &= R^{\mathrm{h}}_{\alpha'_1,\alpha'_2,\alpha_1,\alpha_2}, \\
R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} &= -R^{\mathrm{e-h}}_{\alpha_1,\alpha'_2,\alpha'_1,\alpha_2}.
\end{aligned}$$

Les hamiltoniens de l'interaction de Coulomb pour les boîtes quantiques dans le modèle conduction–valence peuvent être définis en remplaçant les paramètres de Coulomb du modèle électron–trou par les paramètres du modèle conduction–valence et en supprimant les termes constants dans leurs expressions parce qu'ils n'interviennent pas dans les commutateurs.

$$\begin{aligned}
H^{\mathrm{c-c}} &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} c^\dagger_{\alpha_1} c^\dagger_{\alpha_2} c_{\alpha'_2} c_{\alpha'_1}, \\
H^{\mathrm{v-v}} &= \sum_{\alpha_1,\alpha_2} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1,\alpha_2} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_2,\alpha_1,\alpha_1,\alpha_2}) + 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2}\sum_{\alpha} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_2,\alpha}) v^\dagger_{\alpha_1} v_{\alpha_2} \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} v^\dagger_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_2} v_{\alpha'_2} v_{\alpha'_1}, \\
H^{\mathrm{c-v}} &= -\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha'_1,\\ \alpha}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha'_1,\alpha} c^\dagger_{\alpha_1} c_{\alpha'_1} + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha'_1,\alpha'_2}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'_1,\alpha'_2} c^\dagger_{\alpha_1} v^\dagger_{\alpha_2} v_{\alpha'_2} c_{\alpha'_1}.
\end{aligned}$$

2.5.3 Dérivation du modèle de Bloch pour l'interaction de Coulomb

La dérivation du modèle de Bloch se fait à partir de l'équation d'Heisenberg (2.14). La variable de l'équation d'Heisenberg est la matrice densité. L'introduction de l'interaction de Coulomb dans le modèle revient au calcul du commutateur associé à l'hamiltonien de Coulomb et à l'opérateur de l'élément de la matrice densité concerné

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho\Big|_{\mathrm{Coul}} = \langle[\rho, H^{\mathrm{C}}]\rangle. \tag{2.51}$$

Second membre des dynamiques des densités de conduction

Commutateur nuls. Grâce aux relations de commutation des opérateurs d'annihilation et de création associés aux deux espèces d'électron données par (2.17), les commutateurs suivants s'annulent :

$$[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-v}}] = [v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{c-c}}] = 0. \tag{2.52}$$

Calcul du commutateur $[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]$. Le commutateur $[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]$ peut se réécrire plus simplement

$$\begin{aligned}
[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= [c_k^\dagger c_j, \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}] \\
&= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} [c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}],
\end{aligned}$$

où

$$[c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}] = c_k^\dagger c_j c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} c_k^\dagger c_j.$$

Nous allons transformer le premier terme du membre à droite de l'égalité. Cette transformation doit nous permettre d'obtenir une expression dans laquelle apparaît le second terme (voir Convention d'écriture 1).

$$\begin{aligned}
c_k^\dagger \underline{c_j c_{\alpha_1}^\dagger} c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} &= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger \underline{c_j c_{\alpha_2}^\dagger} c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} \\
&= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} + \underline{c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger} \underline{c_j c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}} \\
&= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} + c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \underline{c_k^\dagger c_{\alpha_2'}} c_{\alpha_1'} c_j \\
&= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} + \delta_{\alpha_2',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1'} c_j \\
&\quad - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} \underline{c_k^\dagger c_{\alpha_1'}} c_j \\
&= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} + \delta_{\alpha_2',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1'} c_j \\
&\quad - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_j + c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} c_k^\dagger c_j.
\end{aligned}$$

Le commutateur vaut ainsi

$$\begin{aligned}[c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}] &= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} \\ &+ \delta_{\alpha_2',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1'} c_j - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_j, \end{aligned} \tag{2.53}$$

d'où

$$\begin{aligned}[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} \Big(\delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} \\ &\qquad + \delta_{\alpha_2',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1'} c_j - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_j \Big). \end{aligned}$$

En tenant compte des relations entre les paramètres de Coulomb données dans la propriété 1, nous pouvons réécrire le commutateur.

$$\begin{aligned}[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} \Big(2\delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - 2\delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_j \Big) \\ &= 2 \sum_{\substack{\alpha\\ \alpha_1,\alpha_2}} \Big(R^{\mathrm{c}}_{j,\alpha,\alpha_1,\alpha_2} c_k^\dagger c_\alpha^\dagger c_{\alpha_2} c_{\alpha_1} - R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_\alpha c_j \Big). \end{aligned}$$

Calcul de $[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}]$. Le calcul du commutateur $[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}]$ revient à son tour à la détermination deux commutateurs dépendant des opérateurs de création et d'annihilation.

$$[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}] = -\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_1',\alpha} [c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}] + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} [c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}].$$

Le second commutateur s'exprime en fonction du premier à cause de la relation de commutation entre les opérateurs de conduction et de valence.

$$[c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}] = v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} [c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}].$$

Il nous faut ainsi déterminer $[c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}]$.

$$\begin{aligned} c_k^\dagger \underline{c_j c_{\alpha_1}^\dagger} c_{\alpha_1'} &= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} - \underline{c_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger} \underline{c_j c_{\alpha_1'}} \\ &= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} - c_{\alpha_1}^\dagger \underline{c_k^\dagger c_{\alpha_1'}} c_j \\ &= \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_j + c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'} c_k^\dagger c_j, \end{aligned}$$

d'où

$$[c_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}] = \delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_j. \tag{2.54}$$

On obtient

$$\begin{aligned}
[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= -\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_1',\alpha}(\delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_j) \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'}(\delta_{\alpha_1,j} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger c_j) \\
&= -\sum_{\alpha_1',\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha,\alpha_1',\alpha} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} + \sum_{\alpha_1,\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha} c_{\alpha_1}^\dagger c_j \\
&\quad + \sum_{\alpha_1',\alpha_2,\alpha_2'} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} c_k^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_2'} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha_2'} c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_j.
\end{aligned}$$

Second membre des dynamiques des densités de valence

Calcul de $[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{v-v}}]$. Le commutateur de $[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{v-v}}]$ nous donne

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{v-v}}] &= 2\sum_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_2,\alpha})[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}] \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} v_{\alpha_1'}].
\end{aligned}$$

L'expression de $[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}]$ se déduit du commutateur (2.54) et celle de $[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} v_{\alpha_1'}]$ se déduit de (2.53). Nous obtenons

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{v-v}}] &= 2\Bigg(\sum_{\alpha_2,\alpha}(R^{\mathrm{v}}_{\alpha,j,\alpha_2,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{j,\alpha,\alpha_2,\alpha}) v_k^\dagger v_{\alpha_2} - \sum_{\alpha_1,\alpha}(R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,k,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha}) v_{\alpha_1}^\dagger v_j \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} (R^{\mathrm{v}}_{j,\alpha_3,\alpha_2,\alpha_1} v_k^\dagger v_{\alpha_3}^\dagger v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha_3} v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_3} v_j)\Bigg).
\end{aligned}$$

Calcul de $[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{c-v}}]$. De la même manière, on calcule

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= -\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_1',\alpha}[v_k^\dagger v_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}] + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'}] c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'} \\
&= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_2'}^\dagger v_{\alpha_2}] c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}.
\end{aligned}$$

Le commutateur $[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_2'}^\dagger v_{\alpha_2}]$ se déduit de (2.54) et nous avons

$$[v_k^\dagger v_j, v_{\alpha_2'}^\dagger v_{\alpha_2}] = \delta_{\alpha_2,j} v_k^\dagger v_{\alpha_2'} - \delta_{\alpha_2',k} v_{\alpha_2}^\dagger v_j.$$

On a

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} (\delta_{\alpha_2,j} v_k^\dagger v_{\alpha_2'} - \delta_{\alpha_2',k} v_{\alpha_2}^\dagger v_j) c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'} \\
&= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2',\\ \alpha_1'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,j,\alpha_1',\alpha_2'} c_{\alpha_1}^\dagger v_k^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha_2}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_j c_{\alpha_1'}.
\end{aligned}$$

Second membre des dynamiques des densités inter-bandes

Calcul de $[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]$. Le commutateur $[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]$ nous donne

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= [v_k^\dagger c_j, \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}] \\
&= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v_k^\dagger \left(c_j c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} c_j \right),
\end{aligned}$$

avec

$$c_j c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} c_j = \delta_{\alpha_1,j} c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \delta_{\alpha_2,j} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}.$$

Alors

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= \sum_{\substack{\alpha_2,\alpha_1',\\ \alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{j,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v_k^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha_2'}} R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,j,\alpha_1',\alpha_2'} v_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} \\
&= 2 \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} R^{\mathrm{c}}_{j,\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3} v_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_3} c_{\alpha_2}. \qquad (2.55)
\end{aligned}$$

Calcul de $[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-v}}]$.

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-v}}] &= \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} [v_k^\dagger, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} v_{\alpha_1'}] c_j \\
&\quad + 2 \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_2,\alpha}) [v_k^\dagger, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}] c_j.
\end{aligned}$$

La première somme se déduit de l'expression (2.55)

$$\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} [v_k^\dagger c_j, v_{\alpha_1'}^\dagger v_{\alpha_2'}^\dagger v_{\alpha_2} v_{\alpha_1}] = 2 \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,k} v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_3} c_j.$$

En plus $[v_k^\dagger, v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}] = -\delta_{\alpha_2,k} v_{\alpha_1}^\dagger$, alors

$$[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-v}}] = 2\Bigg(\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,k} v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_3} c_j - \sum_{\alpha,\alpha_1} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,k,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha}) v_{\alpha_1}^\dagger c_j \Bigg).$$

Calcul de $[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}]$. En se basant sur les calculs précédents, nous avons

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= -\sum_{\alpha_1,\alpha_1'} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,\alpha_1',\alpha}[v_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_1'}] + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_1',\alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}[v_k^\dagger c_j, c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}] \\
&= -\sum_{\alpha_1',\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha,\alpha_1',\alpha} v_k^\dagger c_{\alpha_1'} \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_2,\alpha_1',\\ \alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v_k^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha_2}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1'} c_j.
\end{aligned}$$

Récapitulation. Les expressions des commutateurs non-nuls du modèle de Bloch sont

$$\begin{aligned}
[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= 2\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha}} (R^{\mathrm{c}}_{j,\alpha,\alpha_1,\alpha_2} c_k^\dagger c_\alpha^\dagger c_{\alpha_2} c_{\alpha_1} - R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha} c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_\alpha c_j), \\
[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= -\sum_{\alpha_1',\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha,\alpha_1',\alpha} c_k^\dagger c_{\alpha_1'} + \sum_{\alpha_1,\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha} c_{\alpha_1}^\dagger c_j \\
&\quad + \sum_{\alpha_1',\alpha_2,\alpha_2'} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} c_k^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_2'} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha_2'} c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_j, \\
[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{v-v}}] &= 2\Bigg(\sum_{\alpha_2,\alpha} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,j,\alpha_2,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{j,\alpha,\alpha_2,\alpha}) v_k^\dagger v_{\alpha_2} - \sum_{\alpha_1,\alpha} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,k,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha}) v_{\alpha_1}^\dagger v_j \\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} (R^{\mathrm{v}}_{j,\alpha_3,\alpha_2,\alpha_1} v_k^\dagger v_{\alpha_3}^\dagger v_{\alpha_1} v_{\alpha_2} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha_3} v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_3} v_j)\Bigg),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2',\\ \alpha_1'}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,j,\alpha_1',\alpha_2'} c_{\alpha_1}^\dagger v_k^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} - \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha_2}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_j c_{\alpha_1'}, \\
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}] &= 2\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} R^{\mathrm{c}}_{j,\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3} v_k^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_3} c_{\alpha_2}, \\
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-v}}] &= 2\Bigg(\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_3}} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,k} v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_3} c_j - \sum_{\alpha,\alpha_1} (R^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha_1,k,\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha}) v_{\alpha_1}^\dagger c_j\Bigg), \\
[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}] &= -\sum_{\alpha_1',\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha,\alpha_1',\alpha} v_k^\dagger c_{\alpha_1'} + \sum_{\substack{\alpha_2,\alpha_1',\\ \alpha_2'}} R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} v_k^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'} \\
&\quad - \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_1',\\ \alpha_2}} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',k} c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1'} c_j.
\end{aligned}$$

Les opérateurs de création et d'annihilation dans ces différentes formules apparaissent dans certains cas en produit de 4 opérateurs. L'observable associé aux produits de 4 opérateurs peut être approché en fonction de la densité ρ.

Évolution des densités de conduction

Les évolutions des densités, données par l'équation d'Heisenberg, dépendent de l'observable des commutateurs calculés dans la section précédente. Les observables des produits de 4 opérateurs de création et d'annihilation ne correspondent pas aux densités prédéfinies. Nous allons appliquer le théorème de Wick pour décomposer les observables à 4 opérateurs en produit et somme des observables à 2 opérateurs.
Commençons par l'observable du premier commutateur $[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]$:

$$\langle [c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]\rangle = 2\sum_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2}\Big(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha\alpha_1\alpha_2}\langle c_k^\dagger c_\alpha^\dagger c_{\alpha_2}c_{\alpha_1}\rangle - R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1\alpha_2k\alpha}\langle c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_\alpha c_j\rangle\Big).$$

Appliquons le théorème de Wick aux deux observables de droite :

$$\langle c_k^\dagger c_\alpha^\dagger c_{\alpha_2}c_{\alpha_1}\rangle \overset{\mathrm{TW}}{=} \rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_1k}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha} - \rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2k}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_1\alpha},$$

$$\langle c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_\alpha c_j\rangle \overset{\mathrm{TW}}{=} \rho^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha_2} - \rho^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha_1}\rho^{\mathrm{c}}_{j\alpha_2},$$

alors

$$\begin{aligned}
\langle [c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]\rangle &\overset{\mathrm{TW}}{=} 2\sum_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2}\Big(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha\alpha_1\alpha_2}(\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_1k}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha} - \rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2k}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_1\alpha}).\\
&\qquad -R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1\alpha_2k\alpha}(\rho^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha_2} - \rho^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha_1}\rho^{\mathrm{c}}_{j\alpha_2})\Big)\\
&\overset{\mathrm{TW}}{=} \sum_l\Big(2\sum_{\alpha_1,\alpha_2}(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1l\alpha_2} - R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1\alpha_2l})\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1}\Big)\rho^{\mathrm{c}}_{lk}\\
&\quad -\sum_l\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\Big(2\sum_{\alpha_1,\alpha_2}(R^{\mathrm{c}}_{l\alpha_1k\alpha_2} - R^{\mathrm{c}}_{\alpha_1lk\alpha_2})\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1}\Big)\\
&\overset{\mathrm{TW}}{=} [\Lambda^{\mathrm{c}}(\rho),\rho^{\mathrm{c}}]_{jk},
\end{aligned}$$

avec

$$\boxed{\Lambda^{\mathrm{c}}_{jk}(\rho) = 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2}(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1k\alpha_2} - R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1\alpha_2k})\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1}.} \tag{2.56}$$

L'observable du second commutateur $[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}]$ s'écrit

$$\begin{aligned}
\langle [c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}]\rangle &= -\sum_{\alpha_1',\alpha}R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha,\alpha_1',\alpha}\langle c_k^\dagger c_{\alpha_1'}\rangle + \sum_{\alpha_1,\alpha}R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha,k,\alpha}\langle c_{\alpha_1}^\dagger c_j\rangle\\
&\quad + \sum_{\substack{\alpha_1',\alpha_2,\\ \alpha_2'}}R^{\mathrm{c-v}}_{j,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'}\langle c_k^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'}c_{\alpha_1'}\rangle - \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2,\\ \alpha_2'}}R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1,\alpha_2,k,\alpha_2'}\langle c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha_2'}c_j\rangle\\
&\overset{\mathrm{TW}}{=} \sum_l(\sum_{\alpha_1,\alpha_2}R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha_1l\alpha_2}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{c}}_{lk} - \sum_l(\sum_{\alpha_1,\alpha_2}R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha_1\alpha_2l}\rho^{\mathrm{cv}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{vc}}_{lk}\\
&\quad -\sum_l(\sum_{\alpha_1,\alpha_2}R^{\mathrm{c-v}}_{l\alpha_1k\alpha_2}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{c}}_{jl} + \sum_l(\sum_{\alpha_1,\alpha_2}R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1lk\alpha_2}\rho^{\mathrm{vc}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{cv}}_{jl}\\
&\quad -\sum_l(\sum_{\alpha}R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha l\alpha})\rho^{\mathrm{c}}_{lk} + \sum_l(\sum_{\alpha}R^{\mathrm{c-v}}_{l\alpha k\alpha})\rho^{\mathrm{c}}_{jl}.
\end{aligned}$$

Posons

$$\boxed{\gamma_{jk}^{\mathrm{c-v}}(\rho) = -\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R_{j\alpha_1\alpha_2 k}^{\mathrm{c-v}} \rho_{\alpha_2\alpha_1}^{\mathrm{cv}},} \tag{2.57a}$$

$$\boxed{\gamma_{jk}^{\mathrm{v-c}}(\rho) = -\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R_{\alpha_1 jk\alpha_2}^{\mathrm{c-v}} \rho_{\alpha_2\alpha_1}^{\mathrm{vc}},} \tag{2.57b}$$

$$\boxed{\zeta_{jk}^{\mathrm{v}}(\rho) = \sum_{\alpha_1,\alpha_2} R_{j\alpha_1 k\alpha_2}^{\mathrm{c-v}} \rho_{\alpha_2\alpha_1}^{\mathrm{v}},} \tag{2.57c}$$

et

$$\boxed{\eta_{jk}^{\mathrm{c-v}} = -\sum_{\alpha} R_{j\alpha k\alpha}^{\mathrm{c-v}}.} \tag{2.57d}$$

Nous avons ainsi

$$\langle [c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}] \rangle \overset{\mathrm{TW}}{=} [\zeta^{\mathrm{v}}(\rho) - \eta^{\mathrm{c-v}}, \rho^{\mathrm{c}}]_{jk} - \sum_l \gamma_{jl}^{\mathrm{c-v}}(\rho)\rho_{lk}^{\mathrm{vc}} + \sum_l \rho_{jl}^{\mathrm{cv}} \gamma_{lk}^{\mathrm{v-c}}(\rho).$$

En rassemblant les deux résultats obtenus, on a

$$\begin{aligned} \langle [c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{C}}] \rangle \overset{\mathrm{TW}}{=} & [\Lambda^{\mathrm{c}}(\rho), \rho^{\mathrm{c}}]_{jk} + [\zeta^{\mathrm{v}}(\rho) - \eta^{\mathrm{c-v}}, \rho^{\mathrm{c}}]_{jk} \\ & - \sum_l \gamma_{jl}^{\mathrm{c-v}}(\rho)\rho_{lk}^{\mathrm{vc}} + \sum_l \rho_{jl}^{\mathrm{cv}} \gamma_{lk}^{\mathrm{v-c}}(\rho). \end{aligned} \tag{2.58}$$

Finalement l'évolution des densités de conduction liée à l'interaction de Coulomb est donnée par

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{c}}\Big|_{\mathrm{Coul}} = [\Lambda^{\mathrm{c}}(\rho), \rho^{\mathrm{c}}]_{jk} + [\zeta^{\mathrm{v}}(\rho) - \eta^{\mathrm{c-v}}, \rho^{\mathrm{c}}]_{jk} - \sum_l \gamma_{jl}^{\mathrm{c-v}}(\rho)\rho_{lk}^{\mathrm{vc}} + \sum_l \rho_{jl}^{\mathrm{cv}} \gamma_{lk}^{\mathrm{v-c}}(\rho).$$

Évolution des densités de valence

Premièrement

$$\begin{aligned} \langle [v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{v-v}}] \rangle &= 2\sum_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2} \Big(R_{j\alpha\alpha_1\alpha_2}^{\mathrm{v}} \langle v_k^\dagger v_\alpha^\dagger v_{\alpha_2} v_{\alpha_1} \rangle - R_{\alpha_1\alpha_2 k\alpha}^{\mathrm{v}} \langle v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_\alpha v_j \rangle \Big) \\ &\quad + 2\sum_{\alpha,\beta} (R_{\beta j\alpha\beta}^{\mathrm{v}} - R_{\beta j\beta\alpha}^{\mathrm{v}}) \langle v_k^\dagger v_\alpha \rangle - 2\sum_{\alpha,\beta} (R_{\beta\alpha k\beta}^{\mathrm{v}} - R_{\beta\alpha\beta k}^{\mathrm{v}}) \langle v_\alpha^\dagger v_j \rangle \\ &\overset{\mathrm{TW}}{=} 2\sum_{\alpha,\alpha_1,\alpha_2} \big(R_{j\alpha\alpha_1\alpha_2}^{\mathrm{v}} (\rho_{\alpha_1 k}^{\mathrm{v}} \rho_{\alpha_2\alpha}^{\mathrm{v}} - \rho_{\alpha_2 k}^{\mathrm{v}} \rho_{\alpha_1\alpha}^{\mathrm{v}}) - R_{\alpha_1\alpha_2 k\alpha}^{\mathrm{v}} (\rho_{j\alpha_1}^{\mathrm{v}} \rho_{\alpha\alpha_2}^{\mathrm{v}} - \rho_{\alpha\alpha_1}^{\mathrm{v}} \rho_{j\alpha_2}^{\mathrm{v}}) \big) \\ &\quad + 2\sum_{\alpha,\beta} (R_{\beta j\alpha\beta}^{\mathrm{v}} - R_{\beta j\beta\alpha}^{\mathrm{v}}) \rho_{\alpha k}^{\mathrm{v}} - 2\sum_{\alpha,\beta} (R_{\beta\alpha k\beta}^{\mathrm{v}} - R_{\beta\alpha\beta k}^{\mathrm{v}}) \rho_{j\alpha}^{\mathrm{v}} \\ &= [\Lambda^{\mathrm{v}}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}}, \rho^{\mathrm{v}}]_{jk}, \end{aligned}$$

avec

$$\boxed{\Lambda_{jk}^{\mathrm{v}}(\rho) = 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2} (R_{j\alpha_1 k\alpha_2}^{\mathrm{v}} - R_{j\alpha_1\alpha_2 k}^{\mathrm{v}}) \rho_{\alpha_2\alpha_1}^{\mathrm{v}}} \tag{2.59a}$$

et

$$\boxed{\kappa^{\mathrm{v}}_{jk} = 2\sum_{\beta}(R^{\mathrm{v}}_{\beta jk\beta} - R^{\mathrm{v}}_{\beta j\beta k}).} \tag{2.59b}$$

Ensuite

$$\begin{aligned}
\langle[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{c-v}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\alpha_1',\alpha_2'} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha j\alpha_1'\alpha_2'}\langle c_\alpha^\dagger v_k^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}\rangle - \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1\alpha_2\alpha' k}\langle c_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_j c_{\alpha'}\rangle \\
&\overset{\mathrm{TW}}{=} \sum_l(\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1 j\alpha_2 l}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{v}}_{lk} - \sum_l(\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1 jl\alpha_2}\rho^{\mathrm{vc}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{cv}}_{lk} \\
&- \sum_l \rho^{\mathrm{v}}_{jl}(\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1 l\alpha_2 k}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1}) + \sum_l \rho^{\mathrm{vc}}_{jl}(\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c-v}}_{l\alpha_1\alpha_2 k}\rho^{\mathrm{cv}}_{\alpha_2\alpha_1}) \\
&= [\zeta^{\mathrm{c}}(\rho), \rho^{\mathrm{v}}]_{jk} - \sum_l \gamma^{\mathrm{v-c}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{lk} + \sum_l \rho^{\mathrm{vc}}_{jl}\gamma^{\mathrm{c-v}}_{lk}(\rho),
\end{aligned}$$

avec

$$\boxed{\zeta^{\mathrm{c}}(\rho)_{jk} = \sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1 j\alpha_2 k}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1}.} \tag{2.60}$$

Rassemblons ces deux résultats :

$$\begin{aligned}
\langle[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{C}}]\rangle &\overset{\mathrm{TW}}{=} [\Lambda^{\mathrm{v}}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}}, \rho^{\mathrm{v}}]_{jk} + [\zeta^{\mathrm{c}}(\rho), \rho^{\mathrm{v}}]_{jk} \\
&\quad - \sum_l \gamma^{\mathrm{v-c}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{lk} + \sum_k \rho^{\mathrm{vc}}_{jl}\gamma^{\mathrm{c-v}}_{lk}(\rho).
\end{aligned} \tag{2.61}$$

On déduit alors l'évolution des densités de valence :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{v}}_{jk}\Big|_{\mathrm{Coul}} = [\Lambda^{\mathrm{v}}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}}, \rho^{\mathrm{v}}]_{jk} + [\zeta^{\mathrm{c}}(\rho), \rho^{\mathrm{v}}]_{jk} - \sum_l \gamma^{\mathrm{v-c}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{lk} + \sum_k \rho^{\mathrm{vc}}_{jl}\gamma^{\mathrm{c-v}}_{lk}(\rho).$$

Évolution des cohérences inter-bandes

L'approximation des autres observables avec le théorème de Wick nous donne

$$\begin{aligned}
\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-c}}]\rangle &= 2\sum_{\alpha,\alpha_1',\alpha_2'} R^{\mathrm{c}}_{j\alpha\alpha_1'\alpha_2'}\langle v_k^\dagger c_\alpha^\dagger c_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}\rangle \\
&\overset{\mathrm{TW}}{=} \sum_l(2\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1 l\alpha_2}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1} - 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2} R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1\alpha_2 l}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1})\rho^{\mathrm{cv}}_{lk} \\
&= \sum_l \Lambda^{\mathrm{c}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{lk},
\end{aligned}$$

puis

$$\begin{aligned}
\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-v}}]\rangle &= 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1\alpha_2\alpha' k}\langle v_{\alpha_1}^\dagger v_{\alpha_2}^\dagger v_{\alpha'} c_j\rangle - 2\sum_{\alpha,\beta}(R^{\mathrm{v}}_{\beta\alpha k\beta} - R^{\mathrm{v}}_{\beta\alpha\beta k})\langle v_\alpha^\dagger c_j\rangle \\
&\overset{\mathrm{TW}}{=} 2\sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha'} R^{\mathrm{v}}_{\alpha_1\alpha_2\alpha' k}(\rho^{\mathrm{cv}}_{j,\alpha_1}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha_2} - \rho^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha_1}\rho^{\mathrm{cv}}_{j,\alpha_2}) - 2\sum_{\alpha,\beta}(R^{\mathrm{v}}_{\beta\alpha k\beta} - R^{\mathrm{v}}_{\beta\alpha\beta k})\langle v_\alpha^\dagger c_j\rangle \\
&= -\sum_l \rho^{\mathrm{cv}}_{jl}\Lambda^{\mathrm{v}}_{lk}(\rho) - \sum_l \rho^{\mathrm{cv}}_{jl}\kappa^{\mathrm{v}}_{lk},
\end{aligned}$$

et enfin

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-v}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\alpha_1',\alpha_2'} R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha\alpha_1'\alpha_2'}\langle v_k^\dagger v_\alpha^\dagger v_{\alpha_2'} c_{\alpha_1'}\rangle - \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{\alpha_1\alpha_2\alpha' k}\langle v_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha'} c_j\rangle \\ &\quad - \sum_{\alpha,\beta} R^{\mathrm{c-v}}_{j\beta\alpha\beta}\langle v_k^\dagger c_\alpha\rangle \\ &\overset{\mathrm{TW}}{=} \sum_l \zeta^{\mathrm{v}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{lk} - \sum_l \gamma^{\mathrm{c-v}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{v}}_{lk} - \sum_l \rho^{\mathrm{cv}}_{jl}\zeta^{\mathrm{c}}_{lk}(\rho) + \sum_l \rho^{\mathrm{c}}_{jl}\gamma^{\mathrm{c-v}}_{lk}(\rho) \\ &\quad - \sum_l \eta^{\mathrm{c-v}}_{jl}\rho^{\mathrm{cv}}_{lk}.\end{aligned}$$

En rassemblant tous ces résultats, on a :

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{C}}]\rangle &\overset{\mathrm{TW}}{=} \sum_k \Lambda^{\mathrm{c}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{kk} - \sum_k \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\Lambda^{\mathrm{v}}_{kk}(\rho) - \sum_k \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\kappa^{\mathrm{v}}_{kk} + \sum_k \zeta^{\mathrm{v}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{kk} \\ &\quad - \sum_k \gamma^{\mathrm{c-v}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{v}}_{kk} - \sum_k \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\zeta^{\mathrm{c}}_{kk}(\rho) + \sum_k \rho^{\mathrm{c}}_{jk}\gamma^{\mathrm{c-v}}_{kk}(\rho) - \sum_k \eta^{\mathrm{c-v}}_{jk}\rho^{\mathrm{cv}}_{kk}.\end{aligned} \tag{2.62}$$

L'évolution des densités cohérences inter–bandes est donnée par

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\Big|_{\mathrm{Coul}} &= \sum_k \Lambda^{\mathrm{c}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{kk} - \sum_k \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\Lambda^{\mathrm{v}}_{kk}(\rho) - \sum_k \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\kappa^{\mathrm{v}}_{kk} + \sum_k \zeta^{\mathrm{v}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{cv}}_{kk} \\ &\quad - \sum_k \gamma^{\mathrm{c-v}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{v}}_{kk} - \sum_k \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\zeta^{\mathrm{c}}_{kk}(\rho) + \sum_k \rho^{\mathrm{c}}_{jk}\gamma^{\mathrm{c-v}}_{kk}(\rho) - \sum_k \eta^{\mathrm{c-v}}_{jk}\rho^{\mathrm{cv}}_{kk}.\end{aligned}$$

2.5.4 Écriture matricielle

En se basant sur la disposition matricielle de la matrice densité (conduction-valence) donnée par (2.18), nous voulons déterminer les éléments d'une matrice

$$V^{\mathrm{C}} = \begin{pmatrix} V^{\mathrm{c}} & V^{\mathrm{c-v}} \\ V^{\mathrm{v-c}} & V^{\mathrm{v}} \end{pmatrix}$$

telle que

$$\left\langle \left[\begin{pmatrix} c_k^\dagger c_j & v_k^\dagger c_j \\ c_k^\dagger v_j & v_k^\dagger v_j \end{pmatrix}, H^{\mathrm{C}} \right] \right\rangle = [V^{\mathrm{C}}, \rho].$$

Développons le commutateur $[V^{\mathrm{C}}, \rho]$ pour chaque bloc :

$$\langle[c_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{C}}]\rangle = V^{\mathrm{c}}\rho^{\mathrm{c}} + V^{\mathrm{c-v}}\rho^{\mathrm{vc}} - \rho^{\mathrm{c}}V^{\mathrm{c}} - \rho^{\mathrm{cv}}V^{\mathrm{v-c}}, \tag{2.63}$$

$$\langle[v_k^\dagger v_j, H^{\mathrm{C}}]\rangle = V^{\mathrm{v-c}}\rho^{\mathrm{cv}} + V^{\mathrm{v}}\rho^{\mathrm{v}} - \rho^{\mathrm{vc}}V^{\mathrm{c-v}} - \rho^{\mathrm{v}}V^{\mathrm{v}}, \tag{2.64}$$

$$\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{C}}]\rangle = V^{\mathrm{c}}\rho^{\mathrm{cv}} + V^{\mathrm{c-v}}\rho^{\mathrm{v}} - \rho^{\mathrm{c}}V^{\mathrm{c-v}} - \rho^{\mathrm{cv}}V^{\mathrm{v}}. \tag{2.65}$$

On identifie ensuite les éléments de la matrice V^{C} avec les résultats obtenus dans la section 2.4.3 :

– Identification de l'équation (2.63) avec (2.58) :

$$\begin{aligned} V^{\mathrm{c}} &= \Lambda^{\mathrm{c}}(\rho) + \zeta^{\mathrm{v}}(\rho) + \eta^{\mathrm{c-v}}, \\ V^{\mathrm{c-v}} &= \gamma^{\mathrm{c-v}}(\rho), \\ V^{\mathrm{v-c}} &= \gamma^{\mathrm{v-c}}(\rho). \end{aligned}$$

– Identification de l'équation (2.64) avec (2.61) :

$$\begin{aligned} V^{\mathrm{v}} &= \Lambda^{\mathrm{v}}(\rho) + \zeta^{\mathrm{c}}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}}, \\ V^{\mathrm{c-v}} &= \gamma^{\mathrm{c-v}}(\rho), \\ V^{\mathrm{v-c}} &= \gamma^{\mathrm{v-c}}(\rho). \end{aligned}$$

– Identification de l'équation (2.65) avec (2.62) :

$$\begin{aligned} V^{\mathrm{c}} &= \Lambda^{\mathrm{c}}(\rho) + \zeta^{\mathrm{v}}(\rho) + \eta^{\mathrm{c-v}}, \\ V^{\mathrm{v}} &= \Lambda^{\mathrm{v}}(\rho) + \zeta^{\mathrm{c}}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}}, \\ V^{\mathrm{c-v}} &= \gamma^{\mathrm{c-v}}(\rho). \end{aligned}$$

Les résultats sont bien cohérents avec la forme recherchée et on a

$$V^{\mathrm{C}}(\rho) = \begin{pmatrix} \Lambda^{\mathrm{c}}(\rho) + \zeta^{\mathrm{v}}(\rho) + \eta^{\mathrm{c-v}} & \gamma^{\mathrm{c-v}}(\rho) \\ \gamma^{\mathrm{v-c}}(\rho) & \Lambda^{\mathrm{v}}(\rho) + \zeta^{\mathrm{c}}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}} \end{pmatrix}. \tag{2.66}$$

Le modèle de Bloch pour l'interaction de Coulomb dans les boîtes quantiques peut se présenter sous cette forme

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho\Big|_{\mathrm{Coul}} = [V^{\mathrm{C}}(\rho), \rho]. \tag{2.67}$$

2.5.5 Corrections apportées par l'interaction de Coulomb aux énergies et fréquences du système

Compte tenu des évolutions des densités données par l'équation (2.67), on peut calculer les corrections apportées aux états propres du système par l'interaction de Coulomb.
Les modèles libres des trois types de cohérences sont donnés pour tout $j \neq k$ et $\delta, \delta' \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$ par

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho_{jk}^{\delta\delta'} = (\mathcal{E}_j^{\delta} - \mathcal{E}_k^{\delta'})\rho_{jk}^{\delta\delta'}$$

À partir de cette équation, on voit que les corrections énergétiques apportées par l'interaction de Coulomb sont égales aux facteurs des cohérences $\rho_{jk}^{\delta\delta'}$ dans leurs dynamiques pour la partie coulombienne.

Commençons par les cohérences intra-bandes de conduction, on a

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{c}}_{jk} &= \Big(\Lambda^{\mathrm{c}}_{jj}(\rho)+\zeta^{\mathrm{v}}_{jj}(\rho)+\eta^{\mathrm{c-v}}_{jj}-\Lambda^{\mathrm{c}}_{kk}(\rho)-\zeta^{\mathrm{v}}_{kk}(\rho)-\eta^{\mathrm{c-v}}_{kk}\Big)\rho^{\mathrm{c}}_{jk}\\
&\quad+\sum_{l\neq j}\Big(\Lambda^{\mathrm{c}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{c}}_{lk}+\zeta^{\mathrm{v}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{c}}_{lk}+\eta^{\mathrm{c-v}}_{jl}\rho^{\mathrm{c}}_{lk}\Big)-\sum_{l\neq k}\Big(\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\Lambda^{\mathrm{c}}_{lk}(\rho)+\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\zeta^{\mathrm{v}}_{lk}(\rho)+\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\eta^{\mathrm{c-v}}_{lk}\Big)\\
&\quad+\Big(\gamma^{\mathrm{c-v}}(\rho)\rho^{\mathrm{vc}}-\rho^{\mathrm{cv}}\gamma^{\mathrm{v-c}}(\rho)\Big)_{jk}.
\end{aligned}$$

Calculons explicitement $\Lambda^{\mathrm{c}}_{jl}(\rho)$ et $\Lambda^{\mathrm{c}}_{lk}(\rho)$:

$$\begin{aligned}
\Lambda^{\mathrm{c}}_{jl}(\rho) &= 2\big(R^{\mathrm{c}}_{jklj}-R^{\mathrm{c}}_{jkjl}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{jk}+2\sum_{(\alpha_1,\alpha_2)\neq(k,j)}\big(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1l\alpha_2}-R^{\mathrm{c}}_{j\alpha_1\alpha_2l}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha_2\alpha_1}\\
&= 2\big(R^{\mathrm{c}}_{jklj}-R^{\mathrm{c}}_{jkjl}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{jk}+\Gamma_{jkjl}(\rho),
\end{aligned}$$

$$\Lambda^{\mathrm{c}}_{lk}(\rho)=2\big(R^{\mathrm{c}}_{lkkj}-R^{\mathrm{c}}_{lkjk}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{jk}+\Gamma_{jklk}(\rho)$$

Posons

$$\delta\mathcal{E}^{\mathrm{c}}_{jk}(\rho)=\delta\mathcal{E}^{\mathrm{c}}_{j}-\delta\mathcal{E}^{\mathrm{c}}_{k}+2\sum_{l\neq j}\big(R^{\mathrm{c}}_{jklj}-R^{\mathrm{c}}_{jkjl}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{lk}-2\sum_{l\neq k}\big(R^{\mathrm{c}}_{lkkj}-R^{\mathrm{c}}_{lkjk}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{jl}$$

avec

$$\delta\mathcal{E}^{\mathrm{c}}_{j}(\rho)=\Lambda^{\mathrm{c}}_{jj}(\rho)+\zeta^{\mathrm{v}}_{jj}(\rho)+\eta^{\mathrm{c-v}}_{jj}.$$

Dans ce cas, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{c}}_{jk} &= \delta\mathcal{E}^{\mathrm{c}}_{jk}(\rho)\rho^{\mathrm{c}}_{jk}+\Big(\gamma^{\mathrm{c-v}}(\rho)\rho^{\mathrm{vc}}-\rho^{\mathrm{cv}}\gamma^{\mathrm{v-c}}(\rho)\Big)_{jk}\\
&\quad+\sum_{l\neq\{j,k\}}\Big(\Gamma^{\mathrm{c}}_{jkl}(\rho)\rho^{\mathrm{c}}_{lk}+\zeta^{\mathrm{v}}_{jl}(\rho)\rho^{\mathrm{c}}_{lk}+\eta^{\mathrm{c-v}}_{jl}\rho^{\mathrm{c}}_{lk}-\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\Lambda^{\mathrm{c}}_{lk}(\rho)-\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\zeta^{\mathrm{v}}_{lk}(\rho)-\rho^{\mathrm{c}}_{jl}\eta^{\mathrm{c-v}}_{lk}\Big).
\end{aligned}$$

La correction apportée par l'interaction de Coulomb pour les transitions dans la bande de conduction est $\delta\mathcal{E}^{\mathrm{c}}_{jk}$.

On déduit la correction des transitions de la bande de valence à partir de celle de la bande de conduction. Elle est donnée par

$$\delta\mathcal{E}^{\mathrm{v}}_{jk}(\rho)=\delta\mathcal{E}^{\mathrm{v}}_{j}(\rho)-\delta\mathcal{E}^{\mathrm{v}}_{k}(\rho)+2\sum_{l\neq j}\big(R^{\mathrm{v}}_{jklj}-R^{\mathrm{v}}_{jkjl}\big)\rho^{\mathrm{v}}_{lk}-2\sum_{l\neq k}\big(R^{\mathrm{v}}_{lkkj}-R^{\mathrm{v}}_{lkjk}\big)\rho^{\mathrm{c}}_{jl}$$

avec

$$\delta\mathcal{E}^{\mathrm{v}}_{j}(\rho)=\Lambda^{\mathrm{v}}_{jj}(\rho)+\zeta^{\mathrm{v}}_{jj}(\rho)+\kappa^{\mathrm{v}}_{jj}.$$

Les corrections des fréquences des niveaux sont données par

$$\delta\omega_{jk}(\rho)=\frac{1}{\hbar}\delta\mathcal{E}_{jk}(\rho).$$

Cette formulation est donnée dans [GH02] dans le cadre de la normalisation des énergies des niveaux quantiques. Nous ne retrouvons pas cette formulation à cause de la non-linéarité du modèle continu. Par contre les corrections peuvent se formuler ainsi dans le cas des modèles de Bloch numériques et explicites.

2.6 Interaction électron–phonon

Les phonons sont des quasi-particules qui apparaissent dans les structures cristallines, et même dans les structures conçues à partir d'assemblages de boîtes quantiques. Deux types de phonons sont envisageables et se différencient par leurs fréquences propres. Les phonons de fréquences faibles proviennent en général de la vibration à l'intérieur de la structure. On les appelle les phonons acoustiques alors que ceux de grandes fréquences sont appelés phonons optiques.
L'interaction électron–phonon induit une modification énergétique non négligeable de l'hamiltonien de départ. Il se traduit par l'émission ou l'absorption de phonons par les électrons. L'énergie du phonon dégagée et absorbée, correspond à la différence de l'énergie de l'électron avant et après l'émission et l'absorption. L'énergie de couplage électron–phonon est généralement interprétée comme facteur de couplage entre les deux types de particules.
L'hamiltonien correspondant à l'interaction électron–phonon est donné en seconde quantification dans [Kit87, HK09] :

$$H^{\mathrm{e-ph}} = \int \psi_{\mathrm{e}}^{\dagger}(r) V^{\mathrm{e-ph}}(r,t) \psi_{\mathrm{e}}(r) dr,$$

où $V^{\mathrm{e-ph}}(r,t)$ est le potentiel de l'interaction électron–phonon en première quantification. L'expression du potentiel d'interaction $V^{\mathrm{e-ph}}(r,t)$ dépend de la nature du phonon.

2.6.1 Potentiel d'interaction électron–phonon en première quantification

Le potentiel d'interaction entre les électrons et les phonons dépend des caratéristiques du champ de déplacement (2.7) dans le cas des phonons acoustiques et celles du champ de polarisation (2.2.2) Les expressions sont explicitement données dans [LA97, Kit87] pour les deux types de phonons.

Phonons acoustiques

Le potentiel d'interaction électron–phonon acoustique est le produit de l'opérateur de dilatation (2.2.2) et le coefficient de couplage électron–phonon $C_{\mathrm{e,ph}}$ (voir page 23 de [Kit87] et l'équation (A.41) de [HK09]).

$$V_A^{\mathrm{e-ph}}(r,t) = C_{\mathrm{e,ph}} D(r,t). \tag{2.68}$$

Le coefficient de couplage $C_{\mathrm{e,ph}}$ est calculé à partir des déformations du réseau. Ces déformations apparaissent dans le matériau lors des vibrations ou le passage des ondes élastiques qui sont capables de déformer le réseau suivant leur plan de propagation.

On sait que l'hamiltonien total du système est égal à la somme de l'hamiltonien du système avant le couplage électron–phonon et de l'hamiltonien du couplage (voir [Bou08]) qui est égale au potentiel $V_A^{\mathrm{e-ph}}(r,t)$ en première quantification.

$$H^{\mathrm{e-ph}} = \frac{\partial H_{total}}{\partial D(r,t)} D(r,t),$$

avec

$$C_{\mathrm{e,ph}} = \frac{\partial H}{\partial D(r,t)}$$

et $D(r,t)$ dépend des paramètres du phonon et de la densité de l'onde élastique associée aux phonons.

Phonons optiques

Les phonons optiques interviennent en général lors de l'interaction entre l'électron et l'onde de polarisation du champ électrique. Le potentiel d'interaction entre les électrons et les phonons optiques est le produit de la charge de l'électron et le potentiel associé au champ de polarisation (voir page 138 de [Kit87]).

$$V_O^{\mathrm{e-ph}}(r,t) = e\phi(r,t).$$

Ce potentiel est appelé le potentiel électrostatique. Le potentiel $\phi(r,t)$ est déterminé à partir de la loi électrique :

$$-\nabla\phi(r,t) + 4\pi\mathbf{Q}(r,t) = 0,$$

où $\mathbf{Q}(r,t)$ est donné par (2.2.2).
Nous obtenons

$$\phi(r,t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\mathcal{E}_{\mathbf{q}} \exp(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}} + \mathcal{E}_{\mathbf{q}}^* \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot r) b_{\mathbf{q}}^\dagger \right),$$

avec $\mathcal{E}_{\mathbf{q}} = -4\mathrm{i}\pi\frac{F}{|\mathbf{q}|}$.
En faisant le lien avec les potentiels acoustiques (2.68) et optiques (2.6.1), on trouve

$$C_{\mathrm{e,ph}} = e.$$

Le terme $C_{\mathrm{e,ph}}\mathcal{E}_{\mathbf{q}}$ est appelé coefficient de Fröhlich, est déterminé dans [Fro54] et donné dans [Kit87, SKM94, SZC00].

2.6.2 Développement de l'hamiltonien électron–phonon

Statistique de Boltzmann

La statistique de Boltzmann est utilisée en physique statistique et en mécanique quantique. Elle permet de déterminer la distribution statistique des particules suivant les états énergétiques d'un système quantique.

Cette distribution donne le nombre de particules, se trouvant dans le système et elle dépend d'une constante κ (constante de Boltzmann) et de la température T du milieu.
Le nombre de phonons d'énergie $E_{\mathbf{q}} = \hbar\omega_{\mathbf{q}}$ donné par la statistique de Boltzmann :

$$n_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\exp(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\kappa T}) - 1}.$$

Cas d'une espèce d'électron

Remplaçons les opérateurs de champ $\psi_{\mathrm{e}}(r)$ et $\psi_{\mathrm{e}}^{\dagger}(r)$ par leurs expressions données par (2.15) et $V^{\mathrm{e-ph}}(r,t)$ par son expression :

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{e-ph}} &= \sum_{\alpha,\mathbf{q},\alpha'} \Bigg(C_{\mathrm{e,ph}}\mathcal{E}_{\mathbf{q}} \int \psi_{\alpha}^{*}(r)\exp(i\mathbf{q}.r)\psi_{\alpha'}(r)dr \;\; c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'} \\ &\qquad + C_{\mathrm{e,ph}}\mathcal{E}_{\mathbf{q}}^{*} \int \psi_{\alpha}^{*}(r)\exp(-i\mathbf{q}.r)\psi_{\alpha'}(r)dr \;\; c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\alpha'} \Bigg). \end{aligned}$$

Hypothèse 2. *La constante $C_{\mathrm{e,ph}}$ est réelle.*

Avec l'hypothèse 2, nous avons

$$G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} = C_{\mathrm{e,ph}}\mathcal{E}_{\mathbf{q}} \int \psi_{\alpha}^{*}(r)\exp(i\mathbf{q}.r)\psi_{\alpha'}(r)dr, \tag{2.69}$$

et son adjoint

$$G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}^{*} = C_{\mathrm{e,ph}}\mathcal{E}_{\mathbf{q}}^{*} \int \psi_{\alpha'}^{*}(r)\exp(-i\mathbf{q}.r)\psi_{\alpha}(r)dr.$$

Donc l'hamiltonien de l'interaction électron–phonon dans le cas d'une espèce d'électron donne

$$H^{\mathrm{e-ph}} = \sum_{\alpha,\mathbf{q},\alpha'} \left(G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'} + G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}^{*} c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\alpha'} \right). \tag{2.70}$$

Le produit d'opérateurs $c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}$ peut être interprété comme l'absorption par l'électron à l'état α' d'un phonon de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ pour se retrouver au niveau α. Par contre $c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\alpha'}$ s'interprète comme l'émission par l'électron à l'état α' d'un phonon de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ pour se retrouver au niveau α.

Cas à deux espèces d'électron

Dans un système à deux espèces d'électron, nous devons introduire un hamiltonien pour chaque espèce. En effet, nous supposons que l'énergie provenant d'un phonon ne peut jamais permettre à un électron de franchir le gap. Les expressions des deux d'hamiltonien se déduisent de (2.70) :

$$H^{\mathrm{c-ph}} = \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}} \left(G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}^{\mathrm{c}} c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'} + G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}^{\mathrm{c}*} c_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\alpha'} \right), \tag{2.71}$$

$$H^{\mathrm{v-ph}} = \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}} \left(G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}^{\mathrm{v}} v_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} v_{\alpha'} + G_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}^{\mathrm{v}*} v_{\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} v_{\alpha'} \right). \tag{2.72}$$

L'hamiltonien total électron–phonon du système à deux espèces d'électron est la somme des hamiltoniens de l'interaction conduction–phonon (2.71) et de l'interaction valence–phonon (2.72) :

$$H^{\mathrm{e-ph}} = H^{\mathrm{c-ph}} + H^{\mathrm{v-ph}}. \tag{2.73}$$

2.6.3 Détermination du modèle de Bloch pour l'interaction électron–phonon

Nous procédons comme les sections précédentes en déterminant le modèle de Bloch avec l'équation de Heisenberg. L'hamiltonien du modèle utilisé est celui donné par l'équation (2.73).

Évolution des densités de conduction

L'évolution de la densité ρ^{c}_{jk} dépend de la moyenne $\langle[c^\dagger_k c_j, H^{\mathrm{e-ph}}]\rangle$.
La quantité $\langle[c^\dagger_k c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle$ est nulle grâce aux relations de commutation (2.17). Il reste à calculer

$$\langle[c^\dagger_k c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}} \left(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} \langle[c^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}]\rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} \langle[c^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha b^\dagger_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}]\rangle \right). \tag{2.74}$$

Les deux moyennes à droite de l'égalité peuvent être simplifiées avec la relation d'anti-commutation :

$$\langle[c^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}]\rangle = \delta_{\alpha,j}\langle c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}\rangle - \delta_{\alpha',k}\langle c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} c_j\rangle,$$
$$\langle[c^\dagger_k c_j, c^\dagger_\alpha b^\dagger_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}]\rangle = \delta_{\alpha,j}\langle c^\dagger_k b^\dagger_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}\rangle - \delta_{\alpha',k}\langle c^\dagger_\alpha b^\dagger_{\mathbf{q}} c_j\rangle.$$

Remplaçons les deux observables par leurs expressions simplifiées dans l'équation (2.74) :

$$\begin{aligned}\langle[c^\dagger_k c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle \;=\; \sum_{\alpha,\mathbf{q}} \Big(& G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle - G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},\alpha,k}\langle c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} c_j\rangle \\ & + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle c^\dagger_k b^\dagger_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle - G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,k}\langle c^\dagger_\alpha b^\dagger_{\mathbf{q}} c_j\rangle \Big).\end{aligned} \tag{2.76}$$

Évolution des densités de valence

Les calculs pour ces densités se font de la même manière que précédemment.

$$[v^\dagger_k v_j, H^{\mathrm{c-ph}}] = 0$$

et

$$\begin{aligned}\langle[v^\dagger_k v_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle \;=\; \sum_{\alpha,\mathbf{q}} \Big(& G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle v^\dagger_k b_{\mathbf{q}} v_\alpha\rangle - G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,k}\langle v^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} v_j\rangle \\ & + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle v^\dagger_k b^\dagger_{\mathbf{q}} v_\alpha\rangle - G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k}\langle v^\dagger_\alpha b^\dagger_{\mathbf{q}} v_j\rangle \Big).\end{aligned} \tag{2.77}$$

Évolution des densités inter-bandes

Les deux moyennes $\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle$ et $\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle$ sont a priori non nulles :

$$\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}} \Big(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} \langle[v_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}]\rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} \langle[v_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\alpha'}]\rangle \Big),$$

$$\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}} \Big(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} \langle[v_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} v_{\alpha'}]\rangle + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha',\alpha} \langle[v_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger v_{\alpha'}]\rangle \Big).$$

Les lois de commutation donnent

$$\langle[v_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}]\rangle = \delta_{\alpha,j} \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_{\alpha'}\rangle, \qquad \langle[v_k^\dagger c_j, c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\alpha'}]\rangle = \delta_{\alpha,j} \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\alpha'}\rangle,$$
$$\langle[v_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} v_{\alpha'}]\rangle = -\delta_{\alpha',k} \langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle, \qquad \langle[v_k^\dagger c_j, v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger v_{\alpha'}]\rangle = -\delta_{\alpha',k} \langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_j\rangle.$$

Ainsi

$$\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,q} \Big(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,\alpha} \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_\alpha\rangle \Big)$$

et

$$\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle = -\sum_{\alpha,\mathbf{q}} \Big(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,k} \langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_j\rangle \Big).$$

Finalement nous avons :

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger c_j, H^{\mathrm{e-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,q} \Big(& G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,\alpha} \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_\alpha\rangle \\ & - G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,k} \langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle - G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_j\rangle \Big).\end{aligned} \tag{2.78}$$

Densités assistées par les phonons

Dans les expressions calculées plus haut, il apparaît des observables à trois opérateurs de création et d'annihilation pour les électrons et les phonons. Ces observables sont les densités à trois opérateurs pour deux espèces de particules. Elles sont appelées densités assistées par les phonons (ce nom est donné dans [HK09]). Les densités assistées par les phonons sont données par :

$$S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,k} = \langle c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle, \quad S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},j,k} = \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} v_j\rangle, \quad S^{\mathrm{cv}}_{\mathbf{q},j,k} = \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle.$$

Les adjoints des trois densités donnent respectivement :

$$S^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,k} = \langle c_k^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_j\rangle, \quad S^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,k} = \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger v_j\rangle, \quad S^{\mathrm{cv}*}_{\mathbf{q},j,k} = \langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger c_j\rangle.$$

Ces calculs sont bien détaillés dans [HK09] dans le cas des puits quantiques. En remplaçant les densités assistées par les phonons dans les équations (2.76), (2.77) et (2.78), nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{\mathrm{c}}_{jk}\Big|_{\mathrm{e-ph}} &= \sum_{\mathbf{q},\alpha} \left(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,\alpha} S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},\alpha,k} - S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,\alpha} G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},\alpha,k} + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} S^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} - S^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{q}} \left([G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}}, S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}}]_{j,k} + [G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}, S^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}]_{j,k} \right), \qquad (2.79\mathrm{a})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{\mathrm{v}}_{jk}\Big|_{\mathrm{e-ph}} &= \sum_{\mathbf{q},\alpha} \left(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},j,\alpha} S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,k} - S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},j,\alpha} G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,k} + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} S^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} - S^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{q}} \left([G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}}, S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}}]_{j,k} + [G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}, S^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}]_{j,k} \right), \qquad (2.79\mathrm{b})
\end{aligned}$$

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\Big|_{\mathrm{e-ph}} = \sum_{\mathbf{q},\alpha} \left(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,\alpha} S^{\mathrm{cv}}_{\mathbf{q},\alpha,k} + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha} S^{\mathrm{cv}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} - S^{\mathrm{cv}}_{\mathbf{q},j,\alpha} G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},\alpha,k} - S^{\mathrm{cv}}_{\mathbf{q},j,\alpha} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \right). \qquad (2.79\mathrm{c})$$

À partir des équations (2.79), on construit la dynamique de la matrice densité :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho\Big|_{\mathrm{e-ph}} = \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}]^* \right) \qquad (2.80)$$

où

$$G_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}} & 0 \\ 0 & G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}} & 0 \\ 0 & S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}.$$

Les densités assistées par les phonons sont inconnues dans l'équation (2.80). Leurs dynamiques peuvent être dérivées à partir de l'équation de Heisenberg (2.14) de la même manière que pour la matrice densité.

D'abord, commençons par les calculs du second membre de la dynamique de $S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,k}$:

$$\langle [c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{c-ph}}] \rangle = \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}'} \left(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',\alpha,\alpha'} \langle [c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} c_j, c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}'} c_{\alpha'}] \rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',\alpha,\alpha'} \langle [c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} c_j, c^\dagger_\alpha b^\dagger_{\mathbf{q}'} c_{\alpha'}] \rangle \right).$$

Grâce aux relations de commutations et d'anti-commutation des opérateurs, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\langle [c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{c-ph}}] \rangle = \sum_{\alpha,\mathbf{q}'} \Big(& G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',j,\alpha} \langle c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_\alpha \rangle - G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',\alpha,k} \langle c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_j \rangle \\
& + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',j,\alpha} \langle c^\dagger_k b_{\mathbf{q}} b^\dagger_{\mathbf{q}'} c_\alpha \rangle - G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',\alpha,k} \langle c^\dagger_\alpha b_{\mathbf{q}} b^\dagger_{\mathbf{q}'} c_j \rangle \Big) \\
& + \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'} \langle c^\dagger_\alpha c_{\alpha'} c^\dagger_k c_j \rangle. \qquad (2.81)
\end{aligned}$$

De la même manière, on a

$$\begin{aligned}\langle[c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\alpha',\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',\alpha,\alpha'}\langle[c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'} v_{\alpha'}]\rangle + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',\alpha,\alpha'}\langle[c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger v_{\alpha'}]\rangle\Big)\\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle v_\alpha^\dagger v_{\alpha'} c_k^\dagger c_j\rangle. \end{aligned} \tag{2.82}$$

On peut déduire les seconds membres de l'évolution de $S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},j,k}$ à partir des expressions (2.81) et (2.82).

$$\langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} v_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} v_k^\dagger v_j\rangle, \tag{2.83}$$

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} v_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} v_\alpha\rangle - G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} v_j\rangle\\ &\qquad + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^\dagger v_\alpha\rangle - G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^\dagger v_j\rangle\Big)\\ &\quad + \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle v_\alpha^\dagger v_{\alpha'} v_k^\dagger v_j\rangle. \end{aligned} \tag{2.84}$$

Il nous reste les calculs des seconds membres pour les densités inter-bandes $S^{\mathrm{cv}}_{\mathbf{q},j,k}$ pour lesquelles nous procédons de la même manière que précédemment

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_\alpha\rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^\dagger c_\alpha\rangle\Big)\\ &\quad + \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} v_k^\dagger c_j\rangle. \end{aligned} \tag{2.85}$$

De la même manière, on obtient

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle &= -\sum_{\alpha,\mathbf{q}'}(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_j\rangle + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^\dagger c_j\rangle)\\ &\quad + \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle v_\alpha^\dagger v_{\alpha'} v_k^\dagger c_j\rangle. \end{aligned} \tag{2.86}$$

Écriture des résultats dans l'ordre normal

L'ordre normal défini par la convention 2 est nécessaire avant d'appliquer le théorème de Wick. Écrivons dans l'ordre normal les observables de (2.81) :

$$\langle c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^\dagger c_\alpha\rangle = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\langle c_k^\dagger c_\alpha\rangle + \langle c_k^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle,$$

$$\langle c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^\dagger c_j\rangle = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\langle c_\alpha^\dagger c_j\rangle + \langle c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle,$$

$$\langle c_\alpha^\dagger c_{\alpha'} c_k^\dagger c_j\rangle = \delta_{\alpha',k}\langle c_\alpha^\dagger c_j\rangle - \langle c_\alpha^\dagger c_k^\dagger c_{\alpha'} c_j\rangle,$$

d'où

$$\begin{aligned}\langle[c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_\alpha\rangle - G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_j\rangle \\ &\qquad + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle c_k^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle - G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle\Big) \\ &\quad + \sum_\alpha G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle c_k^\dagger c_\alpha\rangle - \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle c_\alpha^\dagger c_k^\dagger c_{\alpha'} c_j\rangle.\end{aligned}$$

Pour le terme (2.82), l'ordre normal est très facile à déterminer car les opérateurs de valence et de conduction commutent :

$$\langle[c_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle = \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle v_\alpha^\dagger c_k^\dagger v_{\alpha'} c_j\rangle.$$

Pour les autres termes (2.83),(2.84), (2.85), (2.86), on procède de la même manière que précédemment :

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} v_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle c_\alpha^\dagger v_k^\dagger c_{\alpha'} v_j\rangle, \\ \langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} v_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} v_\alpha\rangle - G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} v_j\rangle \\ &\qquad + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} v_\alpha\rangle - G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} v_j\rangle\Big) \\ &\quad + \sum_\alpha G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle v_k^\dagger v_\alpha\rangle - \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle v_\alpha^\dagger v_k^\dagger v_{\alpha'} v_j\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{c-ph}}]\rangle &= \sum_{\alpha,\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_\alpha\rangle + G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}',j,\alpha}\langle v_k^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} c_\alpha\rangle\Big) \\ &\quad + \sum_\alpha G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\langle v_k^\dagger c_\alpha\rangle - \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle c_\alpha^\dagger v_k^\dagger c_{\alpha'} c_j\rangle, \\ \langle[v_k^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j, H^{\mathrm{v-ph}}]\rangle &= -\sum_{\alpha,\mathbf{q}'}\Big(G^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} c_j\rangle + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}',\alpha,k}\langle v_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'}^\dagger b_{\mathbf{q}} c_j\rangle\Big) \\ &\quad - \sum_{\alpha,\alpha'} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,\alpha'}\langle v_\alpha^\dagger v_k^\dagger v_{\alpha'} c_j\rangle.\end{aligned}$$

Les moyennes à quatre opérateurs de création et d'annihilation peuvent se reécrire comme somme des produits des éléments matrice densité ρ via le théorème de Wick.

Théorème de Wick

Le théorème de Wick est explicité dans la section 2.1.6 et aussi dans la section 2.4.3. Dans notre modèle, nous retrouvons les moyennes de types $\langle c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}'}\rangle$ et $\langle b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\alpha'}\rangle$ qui sont nulles avec le théorème de Wick. On a ainsi

$$\langle c_\alpha^\dagger b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}'} c_{\alpha'}\rangle = \langle c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\rangle\langle b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}'}\rangle = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} n_{\mathbf{q}}\langle c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}\rangle.$$

Les approximations par le théorème de Wick des dynamiques des densités assistées par les phonons nous donnent

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\partial_t S^{\mathrm{c}}_{\mathbf{q},j,k} &\overset{\mathrm{TW}}{=} n_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha} \left(G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha k} - \rho^{\mathrm{c}}_{j\alpha} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \right) + \sum_{\alpha} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha k} \\
&\quad + \left(\rho^{\mathrm{cv}} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{vc}} - \rho^{\mathrm{c}} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{c}} \right)_{jk} + \rho^{\mathrm{c}}_{jk} \mathrm{Tr}(G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{c}} - G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{v}}), \\
\mathrm{i}\hbar\partial_t S^{\mathrm{v}}_{\mathbf{q},j,k} &\overset{\mathrm{TW}}{=} n_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha} \left(G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha k} - \rho^{\mathrm{v}}_{j\alpha} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \right) + \sum_{\alpha} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha k} \\
&\quad + \left(\rho^{\mathrm{vc}} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{cv}} - \rho^{\mathrm{v}} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{v}} \right)_{jk} + \rho^{\mathrm{v}}_{jk} \mathrm{Tr}(G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{v}} - G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{c}}), \\
\mathrm{i}\hbar\partial_t S^{\mathrm{cv}}_{\mathbf{q},j,k} &\overset{\mathrm{TW}}{=} n_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha} \left(G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\rho^{\mathrm{cv}}_{\alpha k} - \rho^{\mathrm{cv}}_{j\alpha} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q},\alpha,k} \right) + \sum_{\alpha} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q},j,\alpha}\rho^{\mathrm{cv}}_{\alpha k} \\
&\quad - \left(\rho^{\mathrm{c}} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{cv}} - \rho^{\mathrm{cv}} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{v}} \right)_{jk} + \rho^{\mathrm{cv}}_{jk} \mathrm{Tr}(G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{c}} + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{v}}).
\end{aligned}$$

Écriture matricielle du modèle

Soit la matrice

$$A(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) = \begin{pmatrix} A^{\mathrm{c}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) & A^{\mathrm{cv}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) \\ A^{\mathrm{vc}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) & A^{\mathrm{v}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) \end{pmatrix},$$

avec

$$\begin{aligned}
A^{\mathrm{c}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) &= \rho^{\mathrm{cv}} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{vc}} - \rho^{\mathrm{c}} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{c}} + \rho^{\mathrm{c}} \mathrm{Tr}(G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{c}} - G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{v}}), \\
A^{\mathrm{v}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) &= \rho^{\mathrm{vc}} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{cv}} - \rho^{\mathrm{v}} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{v}} + \rho^{\mathrm{v}} \mathrm{Tr}(G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{v}} - G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{c}}), \\
A^{\mathrm{cv}}(\rho, G^*_{\mathbf{q}}) &= \rho^{\mathrm{cv}} G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{v}} - \rho^{\mathrm{c}} G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}} \rho^{\mathrm{cv}} + \rho^{\mathrm{cv}} \mathrm{Tr}(G^{\mathrm{c}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{c}} + G^{\mathrm{v}*}_{\mathbf{q}}\rho^{\mathrm{v}}).
\end{aligned}$$

L'évolution temporelle des densités assistées par les phonons est

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}\Big|_{\mathrm{e-ph}} = n_{\mathbf{q}}[G^*_{\mathbf{q}}, \rho] + G^*_{\mathbf{q}}\rho + A(\rho, G^*_{\mathbf{q}}).$$

Contribution de l'hamiltonien libre des phonons

Les phonons modifient la dynamique des densités assistées par les phonons. L'hamiltonien associé aux phonons libres est égal à la somme des hamiltoniens des différents modes de phonons libres :

$$H^{\mathrm{ph}} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} b^{\dagger}_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}.$$

Cet hamiltonien ne contribue pas dans la dynamique des densités électroniques (modèle de Bloch). Pour déterminer l'expression de sa contribution dans les dynamiques des densités assistées par les phonons, on procède comme précédemment :

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t S_{\mathbf{q},i,j} &= \langle [c^{\dagger}_j b_{\mathbf{q}} c_i, H^{\mathrm{ph}}] \rangle = \sum_{\mathbf{q}'} \hbar\omega_{\mathbf{q}'} \langle [c^{\dagger}_j b_{\mathbf{q}} c_i, b^{\dagger}_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}] \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \langle c^{\dagger}_j b_{\mathbf{q}} c_i \rangle = \hbar\omega_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q},i,j}.
\end{aligned}$$

Le modèle de l'interaction électron-phonon dans les boîtes quantiques devient

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho\Big|_{\mathrm{e-ph}} &= \sum_{\mathbf{q}}([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}]^*), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}\Big|_{\mathrm{e-ph+ph}} &= \hbar\omega_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{q}}[G^*_{\mathbf{q}}, \rho] + G^*_{\mathbf{q}}\rho + A(\rho, G^*_{\mathbf{q}}). \end{cases}$$

Modèle complet pour les nouvelles densités

Le modèle des densités assistées par les phonons, défini précédemment, ne prend pas en compte les autres interactions du modèle de Bloch général. Pour avoir un modèle complet, il faut ajouter les autres phénomènes au modèle des densités assistées par les phonons. Les hamiltoniens à considérer sont

- l'hamiltonien libre des électrons de la boîte H_0,
- l'hamiltonien de l'interaction laser–boîte H^L,
- l'hamiltonien de Coulomb H^{C}.

Pour chacun de ces effets, nous allons calculer les seconds membres de l'équation d'évolution des densités assistées par les phonons.

Hamiltonien libre. En se basant sur la première partie de la construction du modèle de Bloch, nous retrouvons le développement d'un hamitonien pour les électrons du système à l'état libre dont l'expression est donnée dans la section 2.3.
Référons nous aux calculs faits dans cette section et déduisons que

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}\Big|_{\mathrm{Libre}} = [E_0, S_{\mathbf{q}}],$$

Hamiltonien d'interaction du système avec le champ électrique. L'hamiltonien de l'interaction d'une boîte quantique avec le champ électrique est la somme de trois hamiltoniens. Les expressions de ces trois hamiltoniens sont données dans la section 2.4.Compte tenu des calculs de cette section, nous obtenons

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}\Big|_{\mathrm{Champ}} = \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot [\mathbf{M}, S_{\mathbf{q}}],$$

Hamiltonien de Coulomb. À nouveau les calculs effectués dans le cas du modèle de Bloch pour l'interaction de Coulomb peuvent se généraliser à ces densités et nous avons

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}\Big|_{\mathrm{Coul}} = [V^C(\rho), S_{\mathbf{q}}],$$

où les expressions des éléments de $V^C(\rho)$ sont données dans la partie sur l'interaction de Coulomb (section 2.5).

Modèle de l'interaction électron–phonon

Le modèle de Bloch pour l'interaction électron–phonon regroupe tous les phénomènes considérés dans cette thèse, à savoir les équations (2.30), (2.41), (2.80) et la dynamique complète des densités assistées par les phonons $S_{\mathbf{q}}$. Le modèle est donné par

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho & = & \big[V(t,\rho(t)),\rho(t)\big] + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}] - [G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}]^*\right), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}} & = & \hbar\omega_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} + [V(t,\rho(t)),S_{\mathbf{q}}] + n_{\mathbf{q}}[G^*_{\mathbf{q}},\rho] + G^*_{\mathbf{q}}\rho + A(\rho,G^*_{\mathbf{q}}), \end{array} \right. \tag{2.87}$$

avec $V(t,\rho(t)) = E_0 + \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho(t))$.

2.7 Couplage du modèle de Bloch avec les équations de Maxwell

L'interaction entre le laser et les boîtes quantiques est mise en œuvre dans cette thèse avec un modèle semi-classique, composé d'un modèle classique pour le champ électromagnétique et un modèle quantique pour la description à l'échelle fine des boîtes quantiques.
Le modèle classique utilisé pour déterminer l'évolution du champ électromagnétique est celui de Maxwell. Les équations de Maxwell sont les équations qui couplent le champ électrique $\mathbf{E}(r,t)$ et le champ magnétique $\mathbf{B}(r,t)$.
La première équation est celle de Faraday qui donne l'évolution temporelle du champ magnétique en fonction du rotationnel du champ électrique :

$$\partial_t \mathbf{B}(r,t) = -\nabla \times \mathbf{E}(r,t).$$

C'est une équation linéaire qui dans notre contexte (où on ne prend pas en compte d'effets magnétiques) ne dépend pas des caractéristiques physiques du milieu traversé par le champ.
La seconde équation du modèle de Maxwell est l'équation d'Ampère. Elle donne la dérivée temporelle du champ électrique en fonction du rotationnel du champ magnétique et de la polarisation $\mathbf{P}$ du milieu (boîtes quantiques).

$$\frac{1}{v^2}\partial_t \mathbf{E}(r,t) = \nabla \times \mathbf{B}(r,t) - \mu \partial_t \mathbf{P},$$

où v est la vitesse de la lumière dans le milieu sous-jacent et μ sa perméabilité. On a $v^2\epsilon\mu = 1$ avec ϵ est la permittivité du milieu sous-jacent
La variable $\mathbf{P}$ est la polarisation liée à la présence des boîtes quantiques et dépend de la matrice densité :

$$\mathbf{P} = N_b \mathrm{Tr}(\rho \mathbf{M}),$$

où N_b est la densité volumique de boîtes.
Les deux dernières équations du modèle de Bloch sont les équations de conservation du courant et de charge (équations de Gauss et d'Ampère). Ces deux équations doivent être satisfaites pour tout temps.

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \text{et} \quad \nabla.(\epsilon \mathbf{E} + \mathbf{P}) = 0, \tag{2.88}$$

La matrice densité définie par (2.7) est solution du modèle de Bloch dérivé dans les sections précédentes. Ce modèle prend en compte les énergies libres des électrons des boîtes, l'interaction entre le laser et les boîtes, l'interaction de Coulomb et l'interaction entre les électrons et les phonons. Le modèle de Bloch complet est donné par l'équation (2.87).
Le modèle de Maxwell-Bloch complet de l'interaction laser–boîtes quantiques est donné

par

$$\left\{\begin{array}{rcl}
\partial_t \mathbf{B}(r,t) & = & -\nabla \times \mathbf{E}(r,t), \\
\partial_t \mathbf{E}(r,t) & = & v^2 \nabla \times \mathbf{B}(r,t) - v^2 \mu \partial_t \mathbf{P}, \\
\nabla \cdot \mathbf{B} & = & 0, \\
\nabla.(\epsilon \mathbf{E} + \mathbf{P}) & = & 0, \\
\mathrm{i}\hbar \partial_t \rho(t) & = & [V(t,\rho(t)), \rho(t)] + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right), \\
\mathrm{i}\hbar \partial_t S_{\mathbf{q}}(t) & = & [V(t,\rho(t)), S_{\mathbf{q}}(t)] + \hbar\omega_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}} \left[G^*_{\mathbf{q}}, \rho(t)\right] + G^*_{\mathbf{q}} \rho(t) + A(\rho(t), G^*_{\mathbf{q}}), \\
\mathbf{P} & = & N_b \mathrm{Tr}(\rho \mathbf{M}).
\end{array}\right. \tag{2.89}$$

Chapitre 3

Analyse mathématique

Sommaire

3.1 Introduction **63**

3.1.1 Semi-groupe d'évolution 63

3.1.2 Théorème de Trotter–Kato 64

3.2 Propriétés qualitatives **66**

3.2.1 Conservation de la trace 66

3.2.2 Hermicité de la matrice densité 67

3.2.3 Positivité de la matrice densité 68

3.3 Problème de Cauchy local **72**

3.3.1 Problème de Cauchy du modèle avec l'interaction de Coulomb . 72

3.3.2 Problème de Cauchy du modèle avec l'interaction électron–phonon 77

3.4 Problème de Cauchy global **79**

3.4.1 Formulation du problème 79

3.4.2 Énoncé du théorème 81

3.5 Adimensionnement du modèle Maxwell-Bloch **83**

3.5.1 Adimensionnement du modèle de Bloch 83

3.5.2 Adimensionnement des équations de Maxwell 84

3.6 Analyse asymptotique **86**

3.6.1 Mise à l'échelle 86

3.6.2 Dérivation d'un modèle asymptotique 92

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions les propriétés mathématiques du modèle de Maxwell–Bloch obtenu dans le chapitre précédent. Ce modèle est non linéaire et les parties non linéaires proviennent des phénomènes tels que l'interaction de Coulomb et l'interaction électron–phonon. La spécificité du modèle se trouve au niveau du second membre du modèle de Bloch car ce dernier s'écrit sous forme d'un commutateur (voir le système (2.89)). Certaines études mathématiques de cette partie ont été effectuées sur des modèles dans lesquels on considère les termes non linéaires séparément. Tout simplement, on forme deux problèmes différents en considérant les phénomènes de l'interaction de Coulomb et l'interaction électron–phonon séparément. Les deux problèmes se constituent avec les hamiltoniens suivants :

- hamiltonien libre des électrons + hamiltonien de l'interaction laser–boîte + hamiltonien de Coulomb,
- hamiltonien libre des électrons + hamiltonien de l'interaction laser–boîte + hamiltonien de l'interaction électron-phonon.

L'étude théorique des modèles nécessite la connaissance des notions ou outils mathématiques fondamentaux pour l'étude des équations aux dérivées partielles. Parmi ces outils, nous pouvons citer la théorie des semi-groupes d'évolution et le théorème de Trotter–Kato.

Le chapitre s'organise ainsi : tout d'abord nous définissons dans la section 3.1.1 la notion de semi-groupe d'évolution et nous énonçons dans la section 3.1.2 le théorème de Trotter–Kato sans présenter la démonstration. Dans la section 3.2, nous commençons l'étude mathématique en dégageant les propriétés qualitatives de la solution du modèle de Bloch, susceptibles d'être conservées au cours du temps. Ces propriétés sont très importantes pour la suite de l'analyse. En plus de ces propriétés qualitatives, nous étudions aussi le problème de Cauchy associé au modèle couplé Maxwell–Bloch. Cette étude nous assure l'existence d'une unique solution pour les deux problèmes non linéaires énoncés plus haut (sections 3.3 et 3.4). Enfin, nous terminons dans la section 3.6 avec la dérivation d'un modèle asymptotique du modèle de Bloch pour les grandes échelles de temps.

3.1.1 Semi-groupe d'évolution

Les semi-groupes d'évolution sont les outils efficaces utilisés pour déterminer les flots associés aux équations différentielles ordinaires en dimension finie.

Soit X un espace de Banach, on définit un semi-groupe comme une famille d'opérateurs notée $\big(\mathcal{S}(t)\big)_{t\geq 0}$, définie sur X et respectant les propriétés suivantes :

- $\forall t \geq 0$, $\mathcal{S}(t)$ est linéaire sur l'espace X ($\mathcal{S}(t) \in \mathcal{L}(X)$),
- $\mathcal{S}(0) = I$ (I est la matrice identité),
- $\forall t, s \geq 0$, $\mathcal{S}(t+s) = \mathcal{S}(t)\mathcal{S}(s)$.

La première propriété veut simplement dire que l'action d'un semi-groupe sur les éléments de X est linéaire. La seconde quant à elle veut dire que l'évolution d'un semi-groupe pendant un temps nul donne la donnée initiale et la dernière propriété signifie que l'action d'un semi-groupe pendant un temps $t+s$ revient à son évolution pendant t puis pendant s.
Pour plus de détails sur les semi-groupes d'évolution, on peut consulter le livre de Pazy [Paz83].

3.1.2 Théorème de Trotter–Kato

Le théorème de Trotter–Kato, appelé aussi Formule de Trotter, est une généralisation des résultats obtenus par Sophus Lie [RS72]. Le résultat obtenu par Sophus Lie porte sur les équations différentielles linéaires de la forme

$$\partial_t Z(t) = AZ(t) + BZ(t), \tag{3.1}$$

où A et B sont des matrices de dimension $d \in \mathbb{N}$.
Il a montré que les deux matrices du problème (3.1) respectent la propriété suivante

$$\left\| \left(\exp(\frac{1}{n}A)\exp(\frac{1}{n}B) \right)^n - \exp(A+B) \right\| \leq O(\frac{1}{n}).$$

La solution du problème (3.1) dépend des solutions des sous-problèmes obtenus indépendamment avec les opérateurs A et B. Cela donne simplement

$$Z(t) = \lim_{n\to\infty} \left(\exp(\frac{1}{n}At)\exp(\frac{1}{n}Bt) \right)^n Z(0).$$

Ce résultat est valable même dans le cas des matrices de dimension infinie et bornées. Il a été prouvé par Trotter ([Tro59]) dans le cas des semi-groupes contractants, dans la topologie forte et par Kato (Kat78) dans les cas où les seconds membres appartiennent à un espace de Hilbert.
L'un des avantages de l'utilisation du théorème de Trotter–Kato est qu'il permet à la solution du problème général de préserver les bonnes propriétés préservées par les solutions des sous-problèmes (voir [Cac01]).
Dans le cas à plusieurs seconds membres, considérons le problème

$$\partial_t Z = \sum_j A_j(Z), \tag{3.2}$$

où pour tout j, A_j est un opérateur dépendant de la variable $Z \in \mathbb{C}^n$ ($n \in \mathbb{N}$).
Nous définissons à partir du problème (3.2) des sous-équations pour tout j :

$$\begin{cases} \partial_t Z_j &= A_j(Z), \\ Z_j(t_0) &= Z_j^0. \end{cases}$$

Les solutions des sous-équations sont obtenues avec les semi-groupes d'évolution $\{\mathcal{A}_j(t;s)\}_{t\geq 0, s\geq 0}$.

$$Z_j(t) = \mathcal{A}_j(t;t_0)Z_j^0.$$

Dans ce contexte, le théorème se présente de la manière suivante :

Théorème 2. *Si $Z(t)$ est solution de l'équation* (3.2) *alors*

$$Z(t) = \lim_{n\to\infty}\left(\prod_j \mathcal{A}_j(t;\frac{(n-1)t}{n})\cdots\prod_j \mathcal{A}_j(\frac{t}{n};t_0)\right)Z(0).$$

Remarque 1. *Si les semi-groupes $\{\mathcal{A}_j(t;s)\}_{t\geq 0, s\geq 0}$ préservent la propriété de positivité alors pour tout vecteur X, on a $X^*Z(t)X \geq 0$.*

Dans les études mathématiques élaborées dans la suite du document, le théorème de Trotter–Kato est aussi appliqué sur les modèles non-linéaires.

3.2 Propriétés qualitatives

Le modèle de Bloch que nous avons dérivé dans le chapitre 2 nous donne les configurations énergétiques des électrons lors de l'interaction entre les boîtes quantiques et le laser. La solution de ce modèle doit conserver au cours du temps certaines propriétés qui sont nécessaires pour sa validation mathématique et physique. En particulier, on retrouve dans le modèle les phénomènes comme l'interaction de Coulomb des électrons et l'interaction électron–phonon qui le rendent non-linéaire et compliquent sa structure algébrique. Le modèle étudié ici est

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho(t) &= \big[V(t,\rho(t)),\rho(t)\big] + \sum_{\mathbf{q}}\big(\big[G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)\big] - \big[G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)\big]^*\big), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}(t) &= \big[V(t,\rho(t)),S_{\mathbf{q}}(t)\big] + \hbar\omega_{\mathbf{q}}S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}}\big[G^*_{\mathbf{q}},\rho(t)\big] + G^*_{\mathbf{q}}\rho(t) + A(\rho(t),G^*_{\mathbf{q}}). \end{cases} \tag{3.3}$$

Pour montrer que ce modèle de Bloch est un bon candidat pour la modélisation quantique des boîtes quantiques, nous allons montrer que les propriétés telles que la conservation de la trace, l'hermicité et la positivité de sa solution sont conservées au cours du temps. La vérification de ces propriétés qualitatives fait partie des outils de validation des nouveaux modèles de Bloch dérivés.
Ce modèle de Bloch est une équation différentielle dont le second membre est localement lipschitzien. Le théorème de Cauchy–Lipschitz garantit l'existence d'une unique solution qui est continue par rapport à sa donnée initiale.

3.2.1 Conservation de la trace

La trace de la matrice densité est la somme de ses éléments diagonaux ou encore la somme des probabilités d'occupation des états propres du système. À l'instant initial, la somme des éléments diagonaux de la matrice densité est égale au nombre d'électrons de la boîte quantique intervenant dans les processus considérés. La conservation de la trace est donc équivalente à la conservation du nombre d'électrons dans la boîte.
Pour une densité initiale ρ_0, nous obtenons la théorème suivant.
Théorème 3. *Pour tout $t \geq 0$,*

$$\mathrm{Tr}(\rho(t)) = \mathrm{Tr}(\rho_0).$$

Démonstration. On calcule $\partial_t\mathrm{Tr}(\rho(t))$ en considérant la première équation du système (3.3).

$$\begin{aligned} \partial_t\mathrm{Tr}(\rho(t)) &= \mathrm{Tr}(\partial_t\rho(t)) \\ &= \mathrm{Tr}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[V(t,\rho(t)),\rho(t)\right] - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}}\left(\left[G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)\right] - \left[G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)\right]^*\right)\right) \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{Tr}([V(t,\rho(t)),\rho(t)]) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}}\mathrm{Tr}([G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)]^*) \\ &= 0, \end{aligned}$$

car la trace du commutateur de deux opérateurs est nulle. Donc

$$\forall t \geq 0, \quad \partial_t \mathrm{Tr}(\rho(t)) = 0 \Rightarrow \mathrm{Tr}(\rho(t)) = \mathrm{Tr}(\rho_0).$$

□

3.2.2 Hermicité de la matrice densité

L'hermicité est une propriété très importante de la matrice densité car elle permet notamment d'affirmer que les éléments ρ^δ_{jk} et ρ^δ_{kj} pour tout $j \neq k$ ont les mêmes modules. Ces modules sont interprétés comme les probabilités de transition entre les états.
Considérons une matrice densité hermitienne à l'instant initial ($\rho^*_0 = \rho_0$), on obtient alors le résultat suivant avec le modèle (3.3).

Théorème 4. *Si $\rho^*_0 = \rho_0$, alors pour tout temps $t > 0$ on a*

$$\rho^*(t) = \rho(t).$$

Démonstration. On commence par calculer les adjoints des membres à gauche et à droite de l'égalité dans la première équation du système (3.3).

$$(\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho(t))^* = ([V(t,\rho(t)),\rho(t)])^* + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^* - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]\right).$$

On sait que $(\partial_t\rho(t))^* = \partial_t\rho^*(t)$ et pour tous opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$, on a

$$\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)^* = \left[\hat{B}^*,\hat{A}^*\right] = -\left[\hat{A}^*,\hat{B}^*\right].$$

Alors on obtient

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^*(t) = [V^*(t,\rho(t)),\rho^*(t)] + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right).$$

Calculons l'adjoint de la matrice $V(t,\rho(t))$:

$$V^*(t,\rho) = E^*_0 + \mathbf{E}^*(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M}^* + V^{\mathrm{C}*}(\rho),$$

on a $E^*_0 = E_0$ (E_0 est une matrice diagonale à valeurs réelles) et aussi $\mathbf{M}^* = \mathbf{M}$ car $\forall\alpha,\alpha'$ et $\forall\delta \in \{\mathrm{c},\mathrm{v},\mathrm{cv}\}$, $\overline{\mathbf{M}^\delta}_{\alpha,\alpha'} = \mathbf{M}^\delta_{\alpha',\alpha}$ et $\mathbf{M}^\delta_{\alpha,\alpha} = 0$. Pour la dernière matrice, on a

$$V^{\mathrm{C}*}(\rho) = \begin{pmatrix} \Lambda^{\mathrm{c}*}(\rho) + \zeta^{\mathrm{v}*}(\rho) + \eta^{\mathrm{c-v}*} & \gamma^{\mathrm{c-v}*}(\rho) \\ \gamma^{\mathrm{v-c}*}(\rho) & \Lambda^{\mathrm{v}*}(\rho) + \zeta^{\mathrm{c}*}(\rho) + \kappa^{\mathrm{v}*} \end{pmatrix},$$

où les éléments des adjoints des matrices élémentaires nous donnent

$$\overline{\Lambda^\delta_{jk}}(\rho) = \Lambda^\delta_{kj}(\rho^*), \quad \overline{\zeta^\delta_{jk}}(\rho) = \zeta^\delta_{kj}(\rho^*), \quad \delta \in \{\mathrm{c},\mathrm{v}\},$$

$$\overline{\eta^{\mathrm{c-v}}_{jk}} = \eta^{\mathrm{c-v}}_{kj}, \quad \overline{\kappa^{\mathrm{v}}_{jk}} = \kappa^{\mathrm{v}}_{kj}, \quad \text{et} \quad \overline{\gamma^{\mathrm{c-v}}_{jk}}(\rho) = \gamma^{\mathrm{c-v}}_{kj}(\rho^*).$$

On voit bien que $V^{\mathrm{C}*}(\rho) = V^{\mathrm{C}}(\rho*)$, alors pour toute fonction $\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \in \mathbb{R}^3$ (champ électrique) , on a

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^*(t) = [V(t, \rho^*(t)), \rho^*(t)] + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right)$$

et aussi

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho(t) = [V(t, \rho(t)), \rho(t)] + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right).$$

Pour tout temps t, $\rho(t)$ et $\rho^*(t)$ sont solution d'une même équation, alors grâce au théorème de Cauchy–Lipschitz, nous avons $\rho^*(t) = \rho(t)$. □

3.2.3 Positivité de la matrice densité

La matrice densité $\rho(t)$ est dite positive si pour tout vecteur $X \in \mathbb{C}^{N_{\mathrm{c}}+N_{\mathrm{v}}}$, on a

$$X^*\rho(t)X \geq 0.$$

La propriété de positivité de la solution du modèle (3.3) n'est pas du tout évidente. Pour montrer que cette solution ρ reste positive au cours du temps, nous procédons en trois étapes.

- Diviser le modèle de Bloch en plusieurs sous-équations.
- Étudier individuellement la positivité des sous-équations.
- Utiliser le théorème de Trotter–Kato énoncé dans la section 3.1.2 pour montrer la positivité du problème général.

Première étape. Divisons le modèle (3.3) en plusieurs sous-équations. Ces sous-équations sont les suivantes :

- le modèle de Bloch de l'hamiltonien libre des électrons :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho_1 = [E_0, \rho_1], \tag{3.4}$$

- les trois modèles à une dimension de l'interaction laser–boîte :

$$\forall\mu \in \{x, y, z\}, \quad \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho_{2,\mu} = \mathbf{E}_\mu(\mathbf{R}, t)\,[\mathbf{M}_\mu, \rho_{2,\mu}]. \tag{3.5}$$

  Nous avons trois équations parce que nous sommes en dimension 3 et que l'équation avec le produit scalaire ne donne pas une solution ayant la forme des solutions des problèmes de Liouville linéaire.
- le modèle de l'interaction de Coulomb est donné par

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho_3 = \left[V^{\mathrm{C}}(\rho_3), \rho_3\right]. \tag{3.6}$$

– le modèle de l'interaction électron–phonon :

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho_4 &= \sum_{\mathbf{q}}\left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}} &= [V(t,\rho_4), S_{\mathbf{q}}(t)] + \hbar\omega_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}}\left[G^*_{\mathbf{q}}, \rho_4\right] + G^*_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}(t) + A(\rho_4(t), G^*_{\mathbf{q}}). \end{cases} \tag{3.7}$$

On peut décomposer également le modèle de l'interaction de Coulomb (3.6) en une famille de sous-problèmes.
Pour toute matrice $U \in \mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})$, l'image de U par le terme se trouvant à gauche du commutateur du second membre du modèle (3.6) donne

$$\begin{aligned} -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V^{\mathrm{C}}(U) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\begin{pmatrix} \Lambda^{\mathrm{c}}(U) & 0 \\ 0 & \zeta^{\mathrm{c}}(U) \end{pmatrix} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & \gamma^{\mathrm{c-v}}(U) \\ \gamma^{\mathrm{v-c}}(U) & 0 \end{pmatrix} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\begin{pmatrix} \zeta^{\mathrm{v}}(U) & 0 \\ 0 & \Lambda^{\mathrm{v}}(U) \end{pmatrix} \\ &\quad -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\begin{pmatrix} \eta^{\mathrm{c-v}} & 0 \\ 0 & \kappa^{\mathrm{v}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{3.8}$$

où les expressions des matrices blocs sont données par

$$\Lambda^\delta_{jk}(U) = 2\sum_{\alpha,\alpha'}\left(R^\delta_{j\alpha k\alpha'} - R^\delta_{j\alpha\alpha' k}\right)U^\delta_{\alpha'\alpha}, \quad \zeta^\delta_{j,k}(U) = \sum_{\alpha,\alpha'} R^{\delta'-\delta}_{j\alpha k\alpha'} U^\delta_{\alpha'\alpha},$$

$$\gamma^{\mathrm{c-v}}_{jk}(U) = -\sum_{\alpha,\alpha'} R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha\alpha' k} U^{\mathrm{cv}}_{\alpha'\alpha}, \quad \gamma^{\mathrm{v-c}}_{jk}(U) = -\sum_{\alpha,\alpha'} R^{\mathrm{v-c}}_{j\alpha\alpha' k} U^{\mathrm{vc}}_{\alpha'\alpha}$$

$$\eta^{\mathrm{c-v}}_{jk} = -\sum_{\alpha} R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha k\alpha} \quad \text{et} \quad \kappa^{\mathrm{v}}_{jk} = 2\sum_{\alpha}\left(R^{\mathrm{v}}_{\alpha jk\alpha} - R^{\mathrm{v}}_{\alpha j\alpha k}\right)$$

avec $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$. Posons

$$G = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\begin{pmatrix} \eta^{\mathrm{c-v}} & 0 \\ 0 & \kappa^{\mathrm{v}} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\Lambda}^\delta_{jk\alpha\alpha'} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(R^\delta_{j\alpha k\alpha'} - R^\delta_{j\alpha\alpha' k}\right), \quad \tilde{\zeta}^\delta_{jk\alpha\alpha'} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}R^{\delta'-\delta}_{j\alpha\alpha' k}$$

et

$$\tilde{\gamma}^{\delta-\delta'}_{jk\alpha\alpha'}(U) = R^{\delta-\delta'}_{j\alpha\alpha' k}.$$

Nous pouvons réécrire l'expression de la matrice (3.8) sous la forme suivante

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V^{\mathrm{C}}(U) = \sum_{\alpha,\alpha'} U^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha'} B^{\mathrm{c}}_{\alpha',\alpha} + \sum_{\alpha,\alpha'} U^{\mathrm{v}}_{\alpha\alpha'} B^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha} + \sum_{\alpha,\alpha'} U^{\mathrm{cv}}_{\alpha\alpha'} B^{\mathrm{cv}}_{\alpha',\alpha} + G,$$

avec

$$U = \begin{pmatrix} U^{\mathrm{c}} & U^{\mathrm{cv}} \\ U^{\mathrm{vc}} & U^{\mathrm{v}} \end{pmatrix},$$

$$B^{\mathrm{c}}_{\alpha,\alpha'} = \begin{pmatrix} \tilde{\Lambda}^{\mathrm{c}}_{11\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\Lambda}^{\mathrm{c}}_{1N_\mathrm{c}\alpha\alpha'} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{\Lambda}^{\mathrm{c}}_{N_\mathrm{c}1\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\Lambda}^{\mathrm{c}}_{N_\mathrm{c}N_\mathrm{c}\alpha\alpha'} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{\zeta}^{\mathrm{c}}_{11\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\zeta}^{\mathrm{c}}_{1N_\mathrm{v}\alpha\alpha'} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{\zeta}^{\mathrm{c}}_{N_\mathrm{v}1\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\zeta}^{\mathrm{c}}_{N_\mathrm{v}N_\mathrm{v}\alpha\alpha'} \end{pmatrix},$$

$$B^{\mathrm{v}}_{\alpha,\alpha'} = \begin{pmatrix} \tilde{\zeta}^{\mathrm{v}}_{11\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\zeta}^{\mathrm{v}}_{1N_{\mathrm{c}}\alpha\alpha'} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{\zeta}^{\mathrm{v}}_{N_{\mathrm{c}}1\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\zeta}^{\mathrm{v}}_{N_{\mathrm{c}}N_{\mathrm{c}}\alpha\alpha'} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{\Lambda}^{\mathrm{v}}_{11\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\Lambda}^{\mathrm{v}}_{1N_{\mathrm{v}}\alpha\alpha'} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{\Lambda}^{\mathrm{v}}_{N_{\mathrm{v}}1\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\Lambda}^{\mathrm{v}}_{N_{\mathrm{v}}N_{\mathrm{v}}\alpha\alpha'} \end{pmatrix},$$

$$B^{\mathrm{cv}}_{\alpha,\alpha'} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & \tilde{\gamma}^{\mathrm{c-v}}_{11\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\gamma}^{\mathrm{c-v}}_{1N_{\mathrm{v}}\alpha\alpha'} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{\gamma}^{\mathrm{c-v}}_{N_{\mathrm{c}}1\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\gamma}^{\mathrm{c-v}}_{N_{\mathrm{c}}N_{\mathrm{v}}\alpha\alpha'} \\ \tilde{\gamma}^{\mathrm{v-c}}_{11\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\gamma}^{\mathrm{v-c}}_{1N_{\mathrm{c}}\alpha\alpha'} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{\gamma}^{\mathrm{v-c}}_{N_{\mathrm{v}}1\alpha\alpha'} & \cdots & \tilde{\gamma}^{\mathrm{v-c}}_{N_{\mathrm{v}}N_{\mathrm{c}}\alpha\alpha'} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

À partir du modèle (3.6), nous formons les sous-équations suivantes pour tout α, α' :

$$\partial_t U_1^j = U^{\mathrm{c}}_{1,\alpha\alpha'}\big[B^{\mathrm{c}}_{\alpha',\alpha}, U_1^j\big], \quad \forall j = (\alpha,\alpha') \in \{1,\cdots,N_{\mathrm{c}}\} \times \{1,\cdots,N_{\mathrm{c}}\}, \tag{3.9a}$$

$$\partial_t U_2^j = U^{\mathrm{v}}_{2,\alpha\alpha'}\big[B^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha}, U_2^j\big], \quad \forall j = (\alpha,\alpha') \in \{1,\cdots,N_{\mathrm{v}}\} \times \{1,\cdots,N_{\mathrm{v}}\}, \tag{3.9b}$$

$$\partial_t U_3^j = U^{\mathrm{cv}}_{3,\alpha\alpha'}\big[B^{\mathrm{cv}}_{\alpha',\alpha}, U_3^j\big], \quad \forall j = (\alpha,\alpha') \in \{1,\cdots,N_{\mathrm{c}}\} \times \{1,\cdots,N_{\mathrm{v}}\} \tag{3.9c}$$

et

$$\partial_t U_4 = \big[G, U_4\big]. \tag{3.10}$$

Nous avons au total $N_{\mathrm{c}}^2 + N_{\mathrm{v}}^2 + N_{\mathrm{c}}N_{\mathrm{v}} + 1$ sous-équations dont les variables U_1^j, U_2^j, U_3^j et U_4 appartiennent à $\mathcal{M}_{N_{\mathrm{c}}+N_{\mathrm{v}}}(\mathbb{C})$ et les sous-équations sont déduites du modèle (3.6) qui peut se réécrire sous la forme suivante

$$\partial_t \rho_3 = \sum_{\alpha,\alpha'} \rho^{\mathrm{c}}_{3,\alpha\alpha'}\big[B^{\mathrm{c}}_{\alpha',\alpha}, \rho_3\big] + \sum_{\alpha,\alpha'} \rho^{\mathrm{v}}_{3,\alpha\alpha'}\big[B^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha}, \rho_3\big] + \sum_{\alpha,\alpha'} \rho^{\mathrm{cv}}_{3,\alpha\alpha'}\big[B^{\mathrm{cv}}_{\alpha',\alpha}, \rho_3\big] + \big[G, \rho_3\big]. \tag{3.11}$$

Seconde étape. Étude des positivités des solutions des sous-équations de l'étape précédente.

Pour le modèle (3.4), la solution est donnée par

$$\rho_1(t) = \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t)\rho_1(0)\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t).$$

Pour tout $t > 0$, cette solution $\rho_1(t)$ est positive si $\rho_1(0)$ l'est car $\forall X \in \mathbb{C}^{N_{\mathrm{c}}+N_{\mathrm{v}}}$,

$$X^*\rho_1(t)X = X^*\exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t)\rho_1(0)\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t)X = Y^*\rho_1(0)Y \geq 0,$$

avec $Y = \exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t)X$.

Pour les trois équations de (3.5), les solutions sont données par

$$\forall \mu \in \{x, y, z\}, \quad \rho_{2,\mu}(t) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{M}_\mu \int_0^t \mathbf{E}_\mu(\mathbf{R}, s)ds\right)\rho_{2,\mu}(0)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{M}_\mu \int_0^t \mathbf{E}_\mu(\mathbf{R}, s)ds\right).$$

On voit que ces trois solutions conservent la propriété de positivité au cours du temps en posant

$$Y = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{M}_\mu \int_0^t \mathbf{E}_\mu(\mathbf{R}, s)ds\right)X.$$

Les solutions des 4 équations (3.9) et (3.10) sont respectivement données par

$$U_1^j(t) = \exp\left(B^{\mathrm{c}}_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^{\mathrm{c}}_{1,\alpha\alpha'}(s)ds\right)U_1^j(0)\exp\left(-B^{\mathrm{c}}_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^{\mathrm{c}}_{1,\alpha\alpha'}(s)ds\right),$$

$$U_2^j(t) = \exp\left(B^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^{\mathrm{v}}_{2,\alpha\alpha'}(s)ds\right)U_2^j(0)\exp\left(-B^{\mathrm{v}}_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^{\mathrm{v}}_{2,\alpha\alpha'}(s)ds\right),$$

$$U_3^j(t) = \exp\left(B^{\mathrm{cv}}_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^{\mathrm{cv}}_{3,\alpha\alpha'}(s)ds\right)U_3^j(0)\exp\left(-B^{\mathrm{cv}}_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^{\mathrm{cv}}_{3,\alpha\alpha'}(s)ds\right)$$

et

$$U_4(t) = \exp\big(Gt\big)U_4(0)\exp\big(-Gt\big).$$

Pour tout $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}, \mathrm{cv}\}$, les matrices $B^\delta_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^\delta_{\alpha\alpha'}(s)ds$ sont opposées à leurs adjoints.

$$\left(B^\delta_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^\delta_{\alpha\alpha'}(s)ds\right)^* = -B^\delta_{\alpha',\alpha}\int_0^t U^\delta_{\alpha\alpha'}(s)ds.$$

Pour tout j et pour tout $l \in \{1, 2, 3\}$, si la matrice $U_l^j(0)$ est positive alors $U_l^j(t)$ l'est aussi pour tout temps t. Bref toutes les solutions des sous-équations déduites du modèle (3.6) restent positives au cours du temps. Le théorème de Trotter–Kato nous garantit alors la positivité de la solution $\rho_3(t)$ du modèle (3.6) en tenant compte de son écriture (3.11).

Troisième étape. Les solutions des trois premiers modèles (3.4), (3.5) et (3.6) restent positives au cours du temps. Le modèle de Bloch constitué des modèles (3.4), (3.5) et (3.6) conserve la positivité grâce au théorème Trotter–Kato.

3.3 Problème de Cauchy local

L'existence de solutions aux systèmes de Maxwell–Bloch, dans les cas simplifiés ou seulement avec les énergies libres des électrons et l'interaction laser–matière, est prouvée localement en temps dans [Bid06] et globalement dans [Dum05]. L'existence globale de solution pour les modèles de Maxwell–Bloch avec les termes de relaxation est prouvée dans [DR96, DS12]. On retrouve des études asymptotiques du modèle Maxwell–Bloch dans [CD12].
Les équations de Maxwell–Bloch étudiées dans cette thèse sont presque similaires à celles utilisées dans [Bid03, Bid06, Dum05, DS12, Sau04, BBFB$^+$04]. L'étude du problème de Cauchy local en temps a été effectuée pour les modèles de Bloch pour les milieux différents des boîtes quantiques. Dans le livre [Bid06], on retrouve une étude de l'existence de la solution d'un modèle de Bloch considérant les termes de relaxations et cette étude est similaire à celle du modèle sans relaxation car les termes de relaxation sont linéaires. Les modèles de Maxwell–Bloch y sont linéaires en la variable ρ.
Dans notre cas, les modèles de Bloch associés à l'interaction de Coulomb et à l'interaction de Coulomb sont non-linéaires. Nous étudions ici deux problèmes de Cauchy en considérant l'interaction de Coulomb et l'interaction électron–phonon séparement. Les deux systèmes de Maxwell–Bloch avec l'interaction de Coulomb et l'interaction électron–phonon sont respectivement donnés par

$$\left\{\begin{array}{rcl} \partial_t \mathbf{B}(r,t) & = & -\nabla\times\mathbf{E}(r,t), \\ \partial_t \mathbf{E}(r,t) & = & v^2\nabla\times\mathbf{B}(r,t) - v^2\mu(r)\partial_t\mathbf{P}, \\ \mathbf{P} & = & N_b \mathrm{Tr}(\rho\mathbf{M}), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho(t) & = & [V(t,\rho(t)),\rho(t)]\,, \end{array}\right. \tag{3.12}$$

et

$$\left\{\begin{array}{rcl} \partial_t \mathbf{B}(r,t) & = & -\nabla\times\mathbf{E}(r,t), \\ \partial_t \mathbf{E}(r,t) & = & v^2\nabla\times\mathbf{B}(r,t) - v^2\mu(r)\partial_t\mathbf{P}, \\ \mathbf{P} & = & N_b \mathrm{Tr}(\rho\mathbf{M}), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t\rho(t) & = & [V_0(t),\rho(t)] + \sum_{\mathbf{q}}\left([G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right), \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t S_{\mathbf{q}}(t) & = & [V_0(t),S_{\mathbf{q}}(t)] + \hbar\omega_{\mathbf{q}}S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}}\left[G^*_{\mathbf{q}},\rho(t)\right] + G^*_{\mathbf{q}}\rho(t) + A(\rho(t),G^*_{\mathbf{q}}), \end{array}\right. \tag{3.13}$$

avec $V_0(t) = E_0 + \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M}$ et $V(t,\rho(t)) = V_0(t) + V^{\mathrm{C}}(\rho(t))$.
Les solutions de ces deux systèmes doivent vérifier les équations de conservation de Gauss et de Poisson (2.88) car elles les vérifient au temps $t = 0$.

3.3.1 Problème de Cauchy du modèle avec l'interaction de Coulomb

Considérons une variable qui regroupe toutes les variables du système (3.12) :

$$U = (\mathbf{E}, v\mathbf{B}, D, R, I)^t\,, \tag{3.14}$$

avec

$$D = (\rho^{\mathrm{c}}_{11}, \cdots, \rho^{\mathrm{c}}_{N_{\mathrm{c}}N_{\mathrm{c}}}, \rho^{\mathrm{v}}_{11}, \cdots, \rho^{\mathrm{v}}_{N_{\mathrm{v}}N_{\mathrm{v}}}),$$

$$R = (R^{\mathrm{c}}, R^{\mathrm{cv}}, R^{\mathrm{v}}), \quad I = (I^{\mathrm{c}}, I^{\mathrm{cv}}, I^{\mathrm{v}}) \quad \text{et pour} \quad \delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$$

$$R^{\delta}(N_{\delta}(k-1) - k(k-1)/2 + (j-k)) = \Re\rho^{\delta}_{jk}, \quad I^{\delta}(N_{\delta}(k-1) - k(k-1)/2 + (j-k)) = \Im\rho^{\delta}_{jk},$$

$$k \in \{1, ..., N_{\delta}\}, \quad k < j \leq N_{\delta}.$$

$$R^{\mathrm{cv}}(N_{\mathrm{v}}(j-1)+k) = \Re\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}, \quad I^{\mathrm{cv}}(N_{\mathrm{v}}(j-1)+k) = \Im\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}, \quad j \in \{1, ..., N_{\mathrm{c}}\}, \quad k \in \{1, ..., N_{\mathrm{v}}\}.$$

Les deux variables du champ $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ appartiennent à $\mathbb{R}^3$.
Pour tout j, l et $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$, nous avons

$$R^{\delta} \in \mathbb{R}^{\frac{1}{2}N_{\delta}(N_{\delta}-1)}, \quad I^{\delta} \in \mathbb{R}^{\frac{1}{2}N_{\delta}(N_{\delta}-1)}.$$

Alors la variable U appartient à $\mathbb{R}^{N_u}$, avec

$$N_u = 6 + (N_{\mathrm{c}} + N_{\mathrm{v}})^2.$$

Le système (3.12) peut se réécrire :

$$\partial_t U = \sum_{\mu \in \{x,y,z\}} A_{\mu} \partial_{\mu} U + F(U), \tag{3.15}$$

avec A_x, A_y et A_z des matrices $\mathcal{M}_{N_u}(\mathbb{R})$,

$$A_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -v & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}, A_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -v & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -v & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$A_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -v & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

et

$$F(U) = \Big(F_1(U), 0, 0, 0, F_2(U)\Big)^t$$

avec

$$F_1(U) = \left(\frac{\mathrm{i}v^2\mu N_b \mathrm{Tr}\big(\mathbf{M}_x\big[V,\rho\big]\big)}{\hbar}, \frac{\mathrm{i}v^2\mu N_b \mathrm{Tr}\big(\mathbf{M}_y\big[V,\rho\big]\big)}{\hbar}, \frac{\mathrm{i}v^2\mu N_b \mathrm{Tr}\big(\mathbf{M}_z\big[V,\rho\big]\big)}{\hbar}\right)$$

et

$$F_2(U) = \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[V,\rho\big]^{\mathrm{c}}_{11}, \cdots, -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[V,\rho\big]^{\mathrm{v}}_{N_\mathrm{v}N_\mathrm{v}}, -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Re\big[V,\rho\big]^{\mathrm{c}}_{21}, \cdots, -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Im\big[V,\rho\big]^{\mathrm{c}}_{21}, \cdots\right).$$

Les matrices A_x, A_y et A_z sont symétriques et $F(U)$ est un polynôme avec $F(0) = 0$.

Théorème 5. *Soit un réel $\beta > 3/2$ et $U_0 \in (H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$, alors il existe $T > 0$ tel que l'équation (3.15) avec donnée de Cauchy U_0 admette une unique solution $U \in \mathcal{C}([0,T[;(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u})$. De plus, cette solution est continue par rapport à la donnée initiale U_0.*

Démonstration. <u>*Étape 1 : semi-groupe d'évolution pour l'équation linéaire*</u>
La partie linéaire de l'équation (3.15) est donnée par :

$$\partial_t \tilde{U} = \sum_{\mu\in\{x,y,z\}} A_\mu \partial_\mu \tilde{U} = \mathcal{A}\tilde{U},$$

avec l'opérateur linéaire $\mathcal{A} = \sum_{\mu\in\{x,y,z\}} A_\mu \partial_\mu$.
La solution de la partie linéaire peut s'exprimer sous la forme d'un semi-groupe d'évolution $\mathcal{G}(t)$ (voir [CH90, Bid06]). La solution est donnée par

$$\tilde{U}(t,.) = \mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.). \tag{3.16}$$

Lemme 1. *Le semi-groupe d'évolution $\mathcal{G}(t)$ est unitaire dans $(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}$ et aussi dans $(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$.*

Démonstration. Calculons la dérivée de la norme de $\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)$ par rapport au temps dans $(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}$, pour $\beta \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\|\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)\|^2_{(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}} &= \frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}^{N_u}} |\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)|^2 \\
&= \int_{\mathbb{R}^{N_U}} 2\partial_t\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)\cdot\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.) \\
&= 2\int_{\mathbb{R}^{N_U}} \partial_t\tilde{U}(t)\cdot\tilde{U}(t) \\
&= 2\int_{\mathbb{R}^{N_U}} \mathcal{A}\tilde{U}(t)\cdot\tilde{U}(t).
\end{aligned}$$

L'opérateur linéaire $\mathcal{A}$ est anti-adjoint, en particulier

$$\forall\psi \in D(\mathcal{A}), \quad \mathcal{A}\psi\cdot\psi = 0,$$

ainsi

$$\frac{d}{dt}\|\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)\|_{(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}} = 0.$$

Dans ce cas, on a $\|\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)\|_{(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}} = \|\tilde{U}(0,.)\|_{(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}}$, d'où $\mathcal{G}(t)$ est unitaire dans $(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}$.
De la même manière, on montre que

$$\frac{d}{dt}\|-\Delta^{\beta/2}\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)\|_{(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}} = 0.$$

La norme $(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$ du flot $\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)$ est indépendant du temps alors le flot est nécessairement unitaire dans $(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$.

$$\|\mathcal{G}(t)\tilde{U}(0,.)\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} = \|\tilde{U}(0,.)\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}},$$

alors $\mathcal{G}(t)$ est unitaire dans $(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$. □

La solution (3.16) de la partie linéaire permet d'écrire la forme intégrale de (3.15) en utilisant la formulation de Duhamel. La forme intégrale est donnée par

$$\mathcal{G}(t)U(0,.) + \int_0^t \mathcal{G}(t-s)F(U(s,.))ds. \tag{3.17}$$

Étape 2 : existence de la solution
Pour montrer l'existence d'une unique solution (3.17), nous allons utiliser la méthode du point fixe de Schauder. Définissons l'application $\mathcal{T}$ par

$$\mathcal{T}(U)(t) = \mathcal{G}(t)U(0,.) + \int_0^t \mathcal{G}(t-s)F(U(s,.))ds$$

Lemme 2. *L'application $\mathcal{T}$ renvoie $L^\infty\big(0,T;(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}\big)$ dans lui-même.*

Démonstration. Soit $U(t) \in L^\infty\big(0,T;(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}\big)$, la norme $(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$ de l'image $T(U)(t)$ pour tout $t \in [0,T]$ donne

$$\begin{aligned}
\|T(U)(t)\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} &= \Big\|\mathcal{G}(t)U(0,.) + \int_0^t \mathcal{G}(t-s)F(U(s,.))ds\Big\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} \\
&\leq \big\|\mathcal{G}(t)U(0,.)\big\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} + \int_0^t \big\|\mathcal{G}(t-s)F(U(s,.))\big\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} ds \\
&= \big\|U(0,.)\big\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} + \int_0^t \big\|F(U(s,.))\big\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} ds.
\end{aligned}$$

Puisque $F(U)$ est quadratique en U et $(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$ est une algèbre alors on peut trouver une constante $C \in \mathbb{R}$ telle que

$$\big\|F(U(s,.))\big\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} \leq C.$$

Dans ce cas, on a $T(U) \in (H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}$ (cela n'est pas possible dans $(L^2(\mathbb{R}^3))^{N_u}$ et pour $\beta < \frac{3}{2}$). □

Lemme 3. *Soit $\|U(0,.)\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} = R$, il existe un temps T_R tel que pour tout $t < T_R$, l'application $\mathcal{T}$ envoie la boule de $L^\infty\big(0,T;(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}\big)$ de rayon $2R$ dans elle-même.*

Démonstration. Supposons pour tout t que $U(t,.)$ appartient à une boule de centre 0 et de rayon $2R$. Puisque le semi-groupe d'évolution est unitaire alors on a

$$\|\mathcal{T}(U(t,.))\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} \leq \|U(0,.)\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} + \int_0^t \|F(U(s,.))\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} ds. \tag{3.18}$$

$F(U)$ est un polynôme de second degré en U avec $F(0) = 0$, donc il est lipschitzien sur tout domaine borné. Plus précisément, $F(U)$ est lipschitzien de rapport K_{2R} sur la boule de rayon $2R$. Pour tout U appartenant à la boule de rayon $2R$,

$$\|F(U)\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} \leq K_{2R}\|U\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}}.$$

L'inégalité (3.18) devient

$$\|\mathcal{T}(U(t,.))\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} \leq 2R\left(\frac{1}{2} + K_{2R}t\right).$$

Pour $T_R = \frac{1}{2K_{2R}}$ et pour tout $t \in [0,T_R]$, $\mathcal{T}(U(t,.))$ appartient à la boule de centre 0 et de rayon $2R$. □

Lemme 4. *L'application $\mathcal{T}$ est une contraction de la boule de rayon $2R$ de $L^\infty\big(0,T_R;H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}\big)$.*

Démonstration. Supposons que $U_1(t,.)$ et $U_2(t,.)$ sont deux solutions distinctes de (3.15) avec la même valeur initiale.

$$\begin{aligned}\|\mathcal{T}\big(U_1(t)\big) - \mathcal{T}\big(U_2(t)\big)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u}} &= \left\|\int_0^t \mathcal{G}\big(t-s\big)\Big(F(U_1(s))ds - F(U_2(s))\Big)ds\right\|_{(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_u}} \\ &\leq \int_0^t K_{2R}\|U_1(s) - U_2(s)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_U}} ds.\end{aligned}$$

Les supremums en temps des deux membres donnent

$$\|\mathcal{T}(U_1) - \mathcal{T}(U_2)\|_{L^\infty(0,t;H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u})} \leq K_{2R}t\|U_1 - U_2\|_{L^\infty(0,t;H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u})}.$$

$\mathcal{T}$ est une contraction de la boule de rayon $2R$ de $L^\infty(0,t;H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u})$ si $t < \min(T_R, \frac{1}{K_{2R}})$. Le lemme de Schauder garantit l'existence d'une unique solution U. □

Étape 3 : Continuité de la solution par rapport à la donnée initiale

Soient $U_1(0,.)$ et $U_2(0,.)$ deux données initiales différentes appartenant à la boule de rayon R, les solutions associées aux deux valeurs initiales sont

$$U_1(t,.) = \mathcal{G}(t)U_1(0,.) + \int_0^t \mathcal{G}(t-s)F(U_1(s,.))ds,$$

$$U_2(t,.) = \mathcal{G}(t)U_2(0,.) + \int_0^t \mathcal{G}(t-s)F(U_2(s,.))ds.$$

Sachant que le semi-groupe $\mathcal{G}(t)$ est unitaire et $F(U)$ est lipschitzien de rapport K_{2R}, la norme de la différence des deux solutions donnent

$$\begin{aligned}\|U_1(t,.) - U_2(t,.)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u}} &\leq \|U_1(0,.) - U_2(0,.)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u}} \\ &\quad + K_{2R}\int_0^t \|U_1(s,.) - U_2(s,.)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u}}.\end{aligned}$$

Pour tout $t \in [0,T]$, la norme de la différence des solutions $U_1(t,.) - U_2(t,.)$ est continue, le lemme de Gronwall donne

$$\|U_1(t,.) - U_2(t,.)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u}} \leq \|U_1(0,.) - U_2(0,.)\|_{H^\beta(\mathbb{R}^3)^{N_u}} \exp(K_{2R}t).$$

□

3.3.2 Problème de Cauchy du modèle avec l'interaction électron–phonon

Le modèle avec l'interaction électron–phonon concerne le système (3.13) dans lequel nous retrouvons une variable supplémentaire qu'est la densité assistée par les phonons. Considérons une autre variable V qui contient les éléments du vecteur U et les éléments de la densité assistée par les phonons $S_{\mathbf{q}}$.

$$V = \Big(U_1, ..., U_{N_u}, \tilde{D}, \tilde{R}, \tilde{I}\Big)^t \in \mathbb{R}^{N_u + (N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v})^2}, \tag{3.19}$$

avec

$$\tilde{D} = (S^\mathrm{c}_{\mathbf{q},1,1}, \cdots, S^\mathrm{c}_{\mathbf{q},N_\mathrm{c},N_\mathrm{c}}, S^\mathrm{v}_{\mathbf{q},1,1}, \cdots, S^\mathrm{v}_{\mathbf{q},N_\mathrm{v},N_\mathrm{v}}),$$

$$\tilde{R} = (\tilde{R}^\mathrm{c}, \tilde{R}^\mathrm{cv}, \tilde{R}^\mathrm{v}), \quad \tilde{I} = (\tilde{I}^\mathrm{c}, \tilde{I}^\mathrm{cv}, \tilde{I}^\mathrm{v}) \quad \text{et pour} \quad \delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\},$$

$$\tilde{R}^\delta(N_\delta(k-1) - k(k-1)/2 + (j-k)) = \Re S^\delta_{\mathbf{q},j,k}, \quad \tilde{I}^\delta(N_\delta(k-1) - k(k-1)/2 + (j-k)) = \Im S^\delta_{\mathbf{q},j,k},$$

$$k \in \{1, ..., N_\delta\}, \quad k < j \leq N_\delta.$$

$$\tilde{R}^\mathrm{cv}(N_\mathrm{v}(j-1)+k) = \Re S^\mathrm{cv}_{\mathbf{q},j,k}, \quad \tilde{I}^\mathrm{cv}(N_\mathrm{v}(j-1)+k) = \Im S^\mathrm{cv}_{\mathbf{q},j,k}, \quad j \in \{1, ..., N_\mathrm{c}\}, \quad k \in \{1, ..., N_\mathrm{v}\}.$$

Le système (3.13) peut se réécrire

$$\partial_t V = \sum_{\mu \in \{x,y,z\}} A_\mu \partial_\mu V + G(V), \tag{3.20}$$

avec

$$G(V) = \left(F_1(U), \tilde{F}_2(U), -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[V_0(t), S_{\mathbf{q}}(t)\right]^\mathrm{c}_{11} - \mathrm{i}\omega_{\mathbf{q}} S^\mathrm{c}_{\mathbf{q},1,1}(t) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big(G^*_{\mathbf{q}}\rho\big)^\mathrm{c}_{11} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}A^\mathrm{c}_{11}, \cdots\right).$$

et

$$\tilde{F}_2(U) = \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big[V_0, \rho\big]^\mathrm{c}_{11} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{\mathbf{q}}\left(\left[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)\right]^\mathrm{c}_{11} - \left[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)\right]^{\mathrm{c}*}_{11}\right), \cdots\right).$$

Théorème 6. *Soit un réel* $\beta > 3/2$ *et* $V_0 \in (H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_v}$*, alors il existe* $T > 0$ *tel que l'équation* (3.20) *avec donnée de Cauchy* V_0 *admette une unique solution* $V \in \mathcal{C}([0,T[;(H^\beta(\mathbb{R}^3))^{N_v})$*. De plus cette solution est continue par rapport à la donnée initiale* V_0*.*

Démonstration. Nous retrouvons la même démonstration que le théorème 5 avec le même semi-groupe pour les parties linéaires. Dans les estimations des normes des parties quadratiques, les constantes peuvent être différentes mais les étapes de la démonstration sont identiques à celles du théorème précédent. □

3.4 Problème de Cauchy global

L'étude du problème de Cauchy global en temps que nous mettons en œuvre dans cette partie concerne seulement le modèle de Maxwell–Bloch avec interaction de Coulomb (équation (3.12)). Cette étude est une adaptation de celle faite dans [DS12] (modèle de Maxwell–Bloch semi linéaire). Dans la formulation $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$, le modèle de Maxwell–Bloch (3.12) devient

$$\begin{cases} \mu(r)\partial_t \mathbf{H}(r,t) &= -\nabla \times \mathbf{E}(r,t), \\ \epsilon(r)\partial_t \mathbf{E}(r,t) &= \nabla \times \mathbf{H}(r,t) - \partial_t \mathbf{P}, \\ \mathrm{i}\hbar\partial_t \rho(t) &= [V(t,\rho(t)), \rho(t)]\,. \end{cases} \tag{3.21}$$

3.4.1 Formulation du problème

Nous rappelons dans cette partie la formulation du problème de Maxwell-Bloch donné dans [DS12]. Les variables du problème dépendent du temps t et de la variable d'espace r. Nous considérons un domaine de calcul $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Les paramètres physiques $\mu(r)$ et $\epsilon(r)$ appartiennent à $L^\infty(\mathbb{R}^3)$ et sont uniformement positifs.

$$\exists C > 0 \quad \text{tel que} \quad \forall r \in \Omega, \quad \mu(r) \geq C \quad \text{et} \quad \epsilon(r) \geq C. \tag{3.22}$$

Réécriture du système

On peut réécrire le système (3.21) sous forme d'un problème hyperbolique. Pour cela nous posons $\mathrm{U} = (u, v)$ avec $u = (u_1, u_2)$, $u_1 = \mathbf{H}$, $u_2 = \mathbf{E}$ et $v = \rho$. La densité ρ est une matrice appartenant à $\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})$. Définissons le produit scalaire de deux matrices A_1 et A_2 par :

$$A_1 \cdot A_2 = \mathrm{Tr}(A_1^* A_2) = \sum_{j,k} \bar{A}_{1,jk} A_{2,jk}.$$

La norme associée au produit scalaire est la norme L^2 pour les matrices.
Définissons l'opérateur linéaire B à partir des deux premières équations du système (3.21) :

$$B(u_1, u_2) = B(\mathbf{H}, \mathbf{E}) = \left(\frac{1}{\mu(r)} \nabla \times \mathbf{E}, -\frac{1}{\epsilon(r)} \nabla \times \mathbf{H} \right).$$

Le domaine de l'opérateur B est

$$D(B) = H_{curl} \times H_{curl},$$

où

$$H_{curl} = \{ f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3); \quad \nabla \times f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \}.$$

On munit l'espace $D(B)$ du produit scalaire

$$(u_1, u_2) \cdot (u_1', u_2') = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\mu(r) u_1 \cdot u_1' + \epsilon(r) u_2 \cdot u_2' \right) dr.$$

Définissons l'opérateur l à deux composantes dont sa première composante est nulle et il dépend de la matrice des moments dipolaires $\mathbf{M}$.

$$l(v) = l(\rho) = (0, -N_b \mathrm{Tr}(\mathbf{M}\partial_t \rho)).$$

Considérons une fonction F définie sur $\mathcal{M}_{N_c+N_v}(\mathbb{C}) \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ à valeurs dans $\mathcal{M}_{N_c+N_v}(\mathbb{C})$.

$$\begin{aligned} F(\rho, \mathbf{H}, \mathbf{E}) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[V(t,\rho(t)), \rho(t)] \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left([E_0, \rho(t)] + \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot [\mathbf{M}, \rho(t)] + \left[V^{\mathrm{C}}(\rho(t)), \rho(t)\right]\right) \\ &= F_0(\rho) + \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot F_1(\rho), \end{aligned}$$

avec

$$F_0(\rho) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left([E_0, \rho(t)] + \left[V^{\mathrm{C}}(\rho(t)), \rho(t)\right]\right) \quad \text{et} \quad F_1(\rho) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathbf{M}, \rho(t)].$$

Le système (3.21) devient :

$$\begin{cases} (\partial_t + B)\, u = \frac{1}{\epsilon(r)} l(v) \\ \partial_t v = F(v, u). \end{cases} \tag{3.23}$$

Les équations de conservation de Gauss et de Poisson deviennent

$$(I - P)\left(u - \frac{l(\bar{v})}{\epsilon(r)}\right) = 0, \tag{3.24}$$

où P est la projection orthogonale sur l'espace $(\mathrm{Ker}B)^{\perp}$ et $\bar{v}$ est le prolongement de v sur $\mathbb{R}^3$ par zéro sur $\mathbb{R}^3 \backslash \Omega$. Notons B_R la boule de centre 0 et de rayon R.

Propriété 3. *Pour tout $j \in \{0, 1\}$,*
(i) $F_j(0) = 0$,
(ii) soit $R > 0$, pour tout $v \in B_R$, on a $|F_j(v)| + |\partial_v F_j(v)| \leq C(R)$.
(iii) Pour tout $v \in \mathbb{R}^3$, $F(v, u) \cdot v = 0$.

Démonstration. Soit $j \in \{0, 1\}$,
(i) Les fonctions F_j sont respectivement quadratique et linéaire en v, alors il est évident que $F_j(0) = 0$.
(ii) Soit $v \in B_R$, $\partial_v F_j(v) = 0$ grâce au commutateur,
alors

$$|F_j(v)| + |\partial_v F_j(v)| = |F_j(v)|.$$

F_j est lipschitzienne sur B_R, il existe une constante C telle que

$$|F_j(v)| \leq C|v| \leq CR.$$

(iii) Soit $v \in \mathbb{R}^3$,

$$F(v, u) \cdot v = F_0(v) \cdot v + \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot F_1(v) \cdot v.$$

On a

$$\begin{aligned} F_0(v)\cdot v &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left([E_0,v]\cdot v+\left[V^{\mathrm{C}}(v),v\right]\cdot v\right)\\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathrm{Tr}(v^*\,[E_0,v])+\mathrm{Tr}(v^*\left[V^{\mathrm{C}}(v),v\right])\right)\\ &= 0. \end{aligned}$$

De la même manière, on trouve $F_1(v)\cdot v=0$. Donc $F(v,u)\cdot v=0$.

□

3.4.2 Énoncé du théorème

Définition 4. *On appelle* $\mathrm{U}=(u,v)\in\mathcal{C}([0,\infty[,L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^6)\times L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})))$ *solution globale d'énergie finie des équations* (3.23)–(3.24) *si* $v\in L^\infty([0,\infty[,L^\infty(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}))$ *et* U *est solution de* (3.23)–(3.24) *au sens des distributions.*

Nous définissons

$$L_{div}=\{\mathrm{U}=(u,v)\in L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^6)\times(L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C}))\cap L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C}))),\mathrm{U}\ \text{respecte l'équation}\ (3.24)\}$$

Théorème 7 (Théorème 3 de [DS12])**.** *Supposons* (3.22)*. Pour* $\mathrm{U}_0\in L_{div}$*, il existe une solution globale d'énergie finie* $\mathrm{U}\in\mathcal{C}([0,\infty[,L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^6)\times L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})))$ *des équations* (3.23) *et* (3.24) *avec* U_0 *comme donnée initiale.*
En plus, il existe une constante $C=C(T,F,l,\|v_0\|_{L^\infty(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})})$ *telle que*
(i) pour tout $t\geq 0$, $|v(t)|\leq|v_0|$,
(ii) pour tout $t\in[0,T]$, $\|(u,v)\|_{L^2\times L^2}\leq C\|(u_0,v_0)\|_{L^2\times L^2}$,
(iii) $v\in W^{1,\infty}_{loc}([0,\infty[,L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})))$ *et pour presque tout* $t\in[0,T]$, $\|\partial_t v(t)\|_{L^2}\leq C\|\mathrm{U}_0\|_{L^2\times L^2}$.

Démonstration. La démonstration de ce théorème suit la même stratégie donnée dans [DS12] et dans Jochmann [Joc02]. Cette stratégie est une amélioration de celle donnée [JMR00] et elle se fait en deux étapes :

- construction de solutions régularisées $\mathrm{U}^n=(u^n,v^n)$ grâce à des suites régularisantes,
- passage à la limite des solutions régularisées quand $n\to\infty$.

Première étape. Nous définissons un opérateur de troncature symétrique R^n à partir d'une suite régularisante $(\chi^n)_{n\in\mathbb{N}}$:

$$\begin{array}{rccc} R^n & : & L^2(\mathbb{R}^3) & \to & L^2(\mathbb{R}^3)\\ & & f & \mapsto & (R^nf)(r)=\int_{\mathbb{R}^3}f(r')\chi^n(r-r')dr' \end{array}$$

où la suite régularisante $(\chi^n)_{n\in\mathbb{N}}$ de $\mathbb{R}^3$ est définie pour tout n

- $\chi^n\in\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3)$,
- $\mathrm{Supp}\,\chi^n\subset B_{\frac{1}{1+n}}$,

– $\int_{\mathbb{R}^3} \chi^n(r)dr = 1$.

Cet opérateur de troncature permet de construire le système régularisé du système (3.23).

$$\begin{cases} (\partial_t + B)\, u^n = \frac{1}{\epsilon(r)} l(v^n), \\ \partial_t v^n = F^n(v^n, u^n), \end{cases}$$

avec $F^n(v^n, u^n) = F(\bar{v^n}, R^n u^n)$.

Ce système régularisé admet une solution $\mathrm{U}^n \in \mathcal{C}([0,\infty[, L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^6) \times L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C}))$ avec $v^n \in \mathcal{C}([0,\infty[, L^\infty(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C})) \cap \mathcal{C}^1([0,\infty[, L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C}))$.

Seconde étape. En utilisant les inégalités de la propriété 3 et l'estimation de la troncature donnée par

$$\forall n \in \mathbb{N}, \exists C_n > 0, \text{tel que} \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^3), \|R^n f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \geq C_n \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)},$$

on peut montrer que $\forall T > 0$, la suite des solutions $(\mathrm{U}^n)_{n\in\mathbb{N}}$ converge fortement dans $\mathcal{C}\big([0,T], L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^6) \times L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C}))\big)$ vers $\mathrm{U} = (u, v) \in \mathcal{C}\big([0,\infty[, L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^6) \times L^2(\mathcal{M}_{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}(\mathbb{C}))\big)$ solution globale d'énergie finie du problème avec U_0 comme donnée initiale et cette solution respecte les propriétés (i), (ii) et (iii) du théorème 7. □

3.5 Adimensionnement du modèle Maxwell-Bloch

Le principe d'adimensionnement consiste à écrire un modèle mathématique sans unités physiques en transformant les variables et les paramètres du problème. Ces transformations se font par rapport à certains paramètres du problème après avoir exprimé les variables et les paramètres dans les unités de base.
Notre problème à écrire sans dimension est le modèle couplé de Maxwell–Bloch dont les variables à écrire sans dimension sont le temps t, la variable d'espace r, le champ électrique $\mathbf{E}$, le champ magnétique $\mathbf{B}$. Les paramètres qui peuvent être utilisés pour écrire le problème Maxwell-Bloch sans dimension sont les fréquences de transition, la fréquence de Rabi, les amplitudes maximales du champ électrique et du champ magnétique. Dans notre cas, nous utilisons particulièrement une fréquence de transition des boîtes quantiques pour rendre le problème couplé sans dimension.
Le système de Maxwell–Bloch à rendre sans dimension est donné par

$$\left\{\begin{array}{rcl} \partial_t \mathbf{B}(r,t) & = & -\nabla \times \mathbf{E}(r,t), \\ \partial_t \mathbf{E}(r,t) & = & v^2 \nabla \times \mathbf{B}(r,t) - v^2 \mu \partial_t \mathbf{P}, \\ \mathrm{i}\hbar \partial_t \rho(t) & = & [V(t,\rho(t)), \rho(t)] + \sum_{\mathbf{q}} \left([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)]^*\right), \\ \mathrm{i}\hbar \partial_t S_{\mathbf{q}}(t) & = & [V(t,\rho(t)), S_{\mathbf{q}}(t)] + \hbar\omega_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}} \left[G^*_{\mathbf{q}}, \rho(t)\right] + G^*_{\mathbf{q}} \rho(t) + A(\rho(t), G^*_{\mathbf{q}}). \end{array}\right. \tag{3.25}$$

Nous débutons les transformations avec l'adimensionnement du modèle de Bloch et les variables caractéristiques de ce modèle sont utilisées pour rendre sans dimension le modèle de Maxwell.

3.5.1 Adimensionnement du modèle de Bloch

Commençons l'adimensionnement du modèle de Bloch (3.3), donné par les deux dernières équations du système (3.25). Dans ce modèle, nous avons la matrice $V(t,\rho(t))$ qui est égal à la somme de trois matrices telles que

$$V(t,\rho(t)) = E_0 + \mathbf{E}(r,t) \cdot \mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho(t)).$$

Nous normalisons les temps par rapport à la valeur caractéristique, donnée par l'une des fréquences de transition du système quantique. Nous choisissons une fréquence de transition inter-bande caractéristique notée ω_c et donnée par

$$\exists j, k \in \mathbb{N}, \quad \text{tels que} \quad \omega_c = \omega_j^{\mathrm{c}} - \omega_k^{\mathrm{v}} = \frac{1}{\hbar}(\mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} - \mathcal{E}_k^{\mathrm{v}}) \neq 0.$$

Compte tenu de cette valeur caractéristique, nous posons

$$t = \frac{\tilde{t}}{\omega_c}, \quad E_0 = \hbar\omega_c \tilde{E}_0.$$

Nous définissons un autre adimensionnement pour les variables du champ électromagnétique par rapport à la valeur maximale du champ $E_{\max}$ et à la norme de la matrice du

moment dipolaire.

$$\mathbf{E}(r,t) = E_{\max}\tilde{\mathbf{E}}(r,\tilde{t}) \quad \text{et} \quad \mathbf{M} = \|\mathbf{M}\|_\infty \tilde{\mathbf{M}}.$$

Compte tenu de toutes ces modifications, la matrice $V(t,\rho(t))$ devient

$$V(t,\rho(t)) = \hbar\omega_c \tilde{E}_0 + E_{\max}\|\mathbf{M}\|_\infty \tilde{\mathbf{E}}\cdot\tilde{\mathbf{M}} + V^{\mathrm{C}}(\rho).$$

L'adimensionnement du modèle revient à diviser les deux équations du système (3.3) par la constante $\hbar\omega_c$ qui est le facteur de la matrice libre $\tilde{E}_0$ et nous obtenons

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathrm{i}\partial_{\tilde{t}}\rho(\tilde{t}) & = & \big[\tilde{V}(\tilde{t},\rho(\tilde{t})),\rho(\tilde{t})\big] + \sum_{\mathbf{q}}\big(\big[\tilde{G}_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(\tilde{t})\big] - \big[\tilde{G}_{\mathbf{q}},S_{\mathbf{q}}(\tilde{t})\big]^*\big), \\ \mathrm{i}\partial_{\tilde{t}}S_{\mathbf{q}}(\tilde{t}) & = & \big[\tilde{V}(\tilde{t},\rho(\tilde{t})),S_{\mathbf{q}}(\tilde{t})\big] + \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c}S_{\mathbf{q}}(\tilde{t}) + n_{\mathbf{q}}\big[\tilde{G}^*_{\mathbf{q}},\rho(\tilde{t})\big] + \tilde{G}^*_{\mathbf{q}}\rho(\tilde{t}) + A\big(\rho(\tilde{t}),\tilde{G}^*_{\mathbf{q}}\big), \end{array}\right. \tag{3.26}$$

avec

$$\tilde{V}(\tilde{t},\rho(\tilde{t})) = \tilde{E}_0 + \frac{\omega_R}{\omega_c}\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R},\tilde{t})\cdot\tilde{\mathbf{M}} + \frac{1}{\hbar\omega_c}V^{\mathrm{C}}(\rho(\tilde{t})) \quad \text{et} \quad \tilde{G}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\hbar\omega_c}G_{\mathbf{q}}.$$

La constante ω_R est la fréquence de Rabi et son expression est donnée par

$$\omega_R = \frac{E_{\max}\|\mathbf{M}\|_\infty}{\hbar}.$$

Aucune modification n'est faite sur les densités ρ et $S_{\mathbf{q}}$ parce qu'elles sont sans dimension.

3.5.2 Adimensionnement des équations de Maxwell

Pour les équations de Maxwell, nous procédons aux transformations des autres variables telles que la variable d'espace et le champ magnétique. Les fonctions de transformations sont construites conformément à celles du modèle de Bloch.

$$r = \tilde{r}\frac{v}{\omega_c} \quad \text{et} \quad \mathbf{B}(r,t) = \frac{E_{\max}}{v}\tilde{\mathbf{B}}(\tilde{r},\tilde{t}).$$

Équation de Faraday. La dérivée temporelle du champ magnétique et le rotationnel du champ deviennent après les transformations :

$$\partial_t\mathbf{B}(r,t) = \frac{\omega_c E_{\max}}{v}\partial_{\tilde{t}}\tilde{\mathbf{B}}(\tilde{r},\tilde{t}) \quad \text{et} \quad \nabla\times\mathbf{E}(r,t) = \frac{\omega_c E_{\max}}{v}\nabla\times\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{r},\tilde{t}).$$

L'équation de Faraday sans dimension est donnée par

$$\partial_{\tilde{t}}\tilde{\mathbf{B}}(\tilde{r},\tilde{t}) = -\nabla\times\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{r},\tilde{t}). \tag{3.27}$$

Équation d'Ampère. Avec l'application des transformations, les éléments de l'équation d'Ampère donnent

$$\frac{1}{v^2}\partial_t\mathbf{E}(r,t) = \frac{\omega_c E_{\max}}{v^2}\partial_{\tilde{t}}\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{r},\tilde{t}), \quad \nabla\times\mathbf{B}(r,t) = \frac{\omega_c E_{\max}}{v^2}\nabla\times\tilde{\mathbf{B}}(\tilde{r},\tilde{t})$$

et

$$\mu\partial_t\mathbf{P} = \mu\omega_c N_b\|\mathbf{M}\|_\infty\partial_{\tilde{t}}\tilde{\mathbf{P}}.$$

L'équation d'Ampère sans dimension est

$$\partial_{\tilde{t}}\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{r},\tilde{t}) = \nabla \times \tilde{\mathbf{B}}(\tilde{r},\tilde{t}) - \frac{\mu v^2 N_b \|\mathbf{M}\|_\infty}{E_{\max}} \partial_{\tilde{t}}\tilde{\mathbf{P}}. \tag{3.28}$$

En omettant les tildes sur les variables, le modèle de Maxwell–Bloch sans dimension est le système formé à partir des équations (3.26), (3.27) et (3.28).

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{B}(r,t) &= -\nabla \times \mathbf{E}(r,t), \\ \partial_t \mathbf{E}(r,t) &= \nabla \times \mathbf{B}(r,t) - \frac{\mu v^2 N_b \|\mathbf{M}\|_\infty}{E_{\max}} \partial_t \mathbf{P}, \\ \mathrm{i}\partial_t \rho(t) &= \big[V(t,\rho(t)), \rho(t)\big] + \sum_{\mathbf{q}} \big(\big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)\big] - \big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)\big]^*\big), \\ \mathrm{i}\partial_t S_{\mathbf{q}}(t) &= \big[V(t,\rho(t)), S_{\mathbf{q}}(t)\big] + \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}}\big[G^*_{\mathbf{q}}, \rho(t)\big] + G^*_{\mathbf{q}}\rho(t) + A\big(\rho(t), G^*_{\mathbf{q}}\big), \end{cases} \tag{3.29}$$

où

$$V(t,\rho(t)) = E_0 + \frac{\omega_R}{\omega_c}\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + \frac{1}{\hbar\omega_c}V^{\mathrm{C}}(\rho(t)).$$

3.6 Analyse asymptotique

3.6.1 Mise à l'échelle

Champ de faible intensité. On retrouve l'hypothèse sur les champs de faible intensité dans les articles comme [Lou00, Cas99, Cas01, Cas02, BCD04, Bid06, BCDG04] pour différents types de matériaux. Cette hypothèse se traduit simplement par une influence faible du champ lors du contact avec les boîtes quantiques.
Revenons au second membre du modèle de Bloch sans dimension donné dans la section précédente dont les deux dernières équations du système (3.29). Supposons que la fréquence de Rabi ω_R est inférieure à la fréquence caractéristique ω_c utilisée pour rendre sans dimension le système et posons

$$\epsilon = \frac{\omega_R}{\omega_c},$$

où ϵ est un petit paramètre qui voisine autour de 0.
En remplaçant le petit paramètre ϵ dans le modèle de Bloch simplifié, dépendant que de l'hamiltonien libre et de l'hamiltonien de l'interaction laser–boîte, nous obtenons

$$\mathrm{i}\partial_t \rho = \big[E_0, \rho\big] + \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot \big[\mathbf{M}, \rho\big]. \tag{3.30}$$

Cette écriture du modèle correspond à celles données dans les articles qui traitent le couplage radiation–matière avec un champ de faible intensité.

Deux échelles de temps. Dans les cas tests réalisés avec le modèle de Maxwell–Bloch pour simuler l'interaction entre l'onde électromagnétique et la matière dans [ZAG95, Bid06], on remarque que les évolutions du champ et des densités suivent des échelles de temps différentes. Le champ évolue sur des échelles de temps très petites alors les évolutions des densités se font sur des temps longs.
Puisque le modèle de Bloch dépend du champ électromagnétique et de la densité, nous pouvons dire que son évolution dépend de deux échelles de temps. Pour cela nous allons écrire le modèle en fonction de ces deux temps (rapide et lent) et après dériver le comportement du modèle suivant les échelles de temps lents.
Considérons deux échelles de temps t (temps microscopique) et τ (temps macroscopique) et supposons que le rapport entre les deux temps est donné par

$$\epsilon^2 = (\frac{\omega_R}{\omega_c})^2.$$

Le passage du temps lent τ et le temps rapide t est donné par

$$t = \epsilon^2 \tau.$$

La matrice densité dépend des deux temps et elle s'écrit

$$\rho(t, \tau).$$

La dérivée de la matrice densité par rapport aux deux temps t et τ nous donne

$$\dot{\rho} = \partial_t \rho + \epsilon^2 \partial_\tau \rho.$$

L'équation (3.30) devient

$$\mathrm{i}\partial_t \rho + \mathrm{i}\epsilon^2 \partial_\tau \rho = \big[E_0, \rho\big] + \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot \big[\mathbf{M}, \rho\big].$$

Ordres de grandeurs des termes de Coulomb. Nous allons calculer les termes diagonaux et non-diagonaux du second membre du modèle de Bloch pour l'interaction de Coulomb donné par l'équation (2.67) :

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho = [V^{\mathrm{C}}(\rho), \rho], \tag{3.31}$$

la matrice $V^{\mathrm{C}}(\rho)$ est donnée par la formule (2.66) et dépend des matrices élémentaires données par les formules (2.56), (2.57), (2.59) et (2.60).
Dans l'équation (3.31), on veut distinguer deux ordres de grandeur et décomposer l'équation sous la forme

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho = [V_g^{\mathrm{C}}(\rho) + V_p^{\mathrm{C}}(\rho), \rho],$$

où les termes importants sont regroupés dans $V_g^{\mathrm{C}}(\rho)$. Les termes les plus importants sont ceux faisant intervenir des paramètres de Coulomb $R^{\mathrm{k}}_{\alpha_1\alpha_2\alpha_1'\alpha_2'}$ pour $\mathrm{k} \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}, \mathrm{c}-\mathrm{v}\}$ avec $\alpha_1 = \alpha_1'$ et $\alpha_2 = \alpha_2'$ que nous appelons les termes de grandes valeurs. Tous les autres termes qui ne présentent pas ainsi sont appelés les termes de petites valeurs.

Analyse des petites et grandes valeurs des paramètres de Coulomb. Les expressions des paramètres de Coulomb sont données par les formules (2.49). Ils peuvent se réécrire

$$R^{\delta}_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} = \frac{N_\delta e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} \iint \frac{\psi^*_{\alpha_1}(r)\psi^*_{\alpha_2}(r')\psi_{\alpha_3}(r')\psi_{\alpha_4}(r)}{|r-r'|} dr dr' = \frac{N_\delta e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} I,$$

avec $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}, \mathrm{c}-\mathrm{v}\}$ et ϵ_r la permittivité relative de la boîte quantique.
Les grandes valeurs de l'intégrale sont obtenues quand $\alpha_1 = \alpha_1^{'}$ et $\alpha_2 = \alpha_2^{'}$ et se présentent ainsi

$$I = \iint \frac{|\psi_\alpha(r)|^2 |\psi_\beta(r')|^2}{|r-r'|} dr dr'.$$

Pour les fonctions propres à carré intégrable, l'intégrale I converge bien en dimension 2 et en dimension 3. Le rapport entre la constante $\frac{N_\delta e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} L$ et les éléments de E_0 est sans dimension et proche de 1.
On peut montrer numériquement avec les boîtes de forme cubique que les grandes valeurs des paramètres de Coulomb sont de l'ordre de ϵ par rapport aux éléments de la matrice

E_0 et les petites valeurs sont de l'ordre de ϵ^2.
Commençons à calculer les grands termes dans les matrices élémentaires :

$$\begin{aligned}
\Lambda^{\delta}_{gjk}(\rho) &= 2\sum_{\alpha,\alpha'}\left(\delta_{jk}\delta_{\alpha\alpha'}R^{\mathrm{c}}_{j\alpha k\alpha'} - \delta_{j\alpha'}\delta_{k\alpha}R^{\mathrm{c}}_{j\alpha\alpha' k}\right)\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha'\alpha} \\
&= 2\sum_{\alpha}\delta_{jk}R^{\mathrm{c}}_{j\alpha j\alpha}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha} - 2R^{\mathrm{c}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{c}}_{jk}, \\
\zeta^{\delta}_{gjk}(\rho) &= \sum_{\alpha,\alpha'}\delta_{jk}\delta_{\alpha\alpha'}R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha k\alpha'}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha'\alpha} = \sum_{\alpha}\delta_{jk}R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha j\alpha}\rho^{\mathrm{v}}_{\alpha\alpha}, \\
\gamma^{\mathrm{c-v}}_{gjk}(\rho) &= -\sum_{\alpha,\alpha'}\delta_{j\alpha'}\delta_{k\alpha}R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha\alpha' k}\rho^{\mathrm{cv}}_{\alpha'\alpha} = -R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}, \\
\eta^{\mathrm{c-v}}_{gjk} &= -\sum_{\beta}\delta_{jk}R^{\mathrm{c-v}}_{j\beta k\beta} = -\sum_{\beta}\delta_{jk}R^{\mathrm{c-v}}_{j\beta j\beta}, \\
\kappa^{\mathrm{v}}_{gjk} &= 2\sum_{\beta}(\delta_{j\beta}\delta_{\beta k}R^{\mathrm{v}}_{\beta jk\beta} - \delta_{jk}R^{\mathrm{v}}_{\beta j\beta k}) \\
&= 2\delta_{jk}R^{\mathrm{v}}_{jjjj} - 2\sum_{\beta\in I^{\mathrm{v}}}\delta_{jk}R^{\mathrm{v}}_{\beta j\beta j}.
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Évolution des éléments diagonaux. Quand on calcule $\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\delta}_{jj}$ avec $\delta\in\{\mathrm{c},\mathrm{v}\}$, on s'intéresse à

$$\sum_{k\in I^{\mathrm{c}}\cup I^{\mathrm{v}}}\left(V^{\mathrm{C}}_{gjk}\rho_{kj} - \rho_{jk}V^{\mathrm{C}}_{gjk}\right)^{\delta} = \sum_{k\neq j}\left(V^{\mathrm{C}}_{gjk}\rho_{kj} - \rho_{jk}V^{\mathrm{C}}_{gkj}\right)^{\delta}$$

car bien sûr le terme pour $k=j$ donne lieu à une contribution nulle. Que reste-t-il des matrices élémentaires si on suppose que $k\neq j$?
Pour $k\neq j$, on a

$$\begin{aligned}
\Lambda^{\mathrm{c}}_{gjk}(\rho) &= -2R^{\mathrm{c}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{c}}_{jk}, \\
\zeta^{\mathrm{v}}_{gjk}(\rho) &= 0, \\
\gamma^{\mathrm{c-v}}_{gjk}(\rho) &= -R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}, \\
\eta^{\mathrm{c-v}}_{gjk} &= 0, \\
\Lambda^{\mathrm{v}}_{gjk}(\rho) &= -2R^{\mathrm{v}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{v}}_{jk}, \\
\zeta^{\mathrm{c}}_{gjk}(\rho) &= 0, \\
\kappa^{\mathrm{v}}_{gjk} &= 0.
\end{aligned}$$

Il suffit de considérer

$$\begin{aligned}
V^{\mathrm{c}}_{g}(\rho) &= \Lambda^{\mathrm{c}}_{g}(\rho), \\
V^{\mathrm{c-v}}_{g}(\rho) &= \gamma^{\mathrm{c-v}}_{g}(\rho), \\
V^{\mathrm{v-c}}_{g}(\rho) &= \gamma^{\mathrm{c-v}*}_{g}(\rho) = V^{\mathrm{c-v}*}_{g}(\rho), \\
V^{\mathrm{v}}_{g}(\rho) &= \Lambda^{\mathrm{v}}_{g}(\rho).
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Pour le calcul de $\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{c}}_{jj}$, on a

$$\begin{aligned}
&\sum_{k\in I^{\mathrm{c}}\neq j}\left(V^{\mathrm{c}}_{gjk}\rho^{\mathrm{c}}_{kj}-\rho^{\mathrm{c}}_{jk}V^{\mathrm{c}}_{gkj}\right)+\sum_{k\in I^{\mathrm{v}}}\left(V^{\mathrm{c-v}}_{gjk}\rho^{\mathrm{vc}}_{kj}-\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}V^{\mathrm{v-c}}_{gkj}\right)\\
&\quad=-2\sum_{k\in I^{\mathrm{c}}\neq j}\left(R^{\mathrm{c}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{c}}_{jk}\rho^{\mathrm{c}}_{kj}-\rho^{\mathrm{c}}_{jk}R^{\mathrm{c}}_{kjkj}\rho^{\mathrm{c}}_{kj}\right)\\
&\qquad-\sum_{k\in I^{\mathrm{v}}}\left(R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk}\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}\rho^{\mathrm{vc}}_{kj}-\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}(R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk})^*(\rho^{\mathrm{cv}}_{jk})^*\right)\\
&\quad=-2\sum_{k\in I^{\mathrm{c}}\neq j}\left(R^{\mathrm{c}}_{jkjk}-R^{\mathrm{c}}_{kjkj}\right)|\rho^{\mathrm{c}}_{jk}|^2-\sum_{k\in I^{\mathrm{v}}}\left(R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk}-(R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk})^*\right)|\rho^{\mathrm{cv}}_{jk}|^2.
\end{aligned}$$

En appliquant la propriété 1, on a donc en particulier

$$R^{\mathrm{c}}_{jkjk}\;=\;R^{\mathrm{c}}_{kjkj}\quad\text{et}\quad R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk}=(R^{\mathrm{c-v}}_{jkjk})^*.$$

Tous les termes s'annulent donc, et

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{c}}_{jj}=[V^{\mathrm{C}}_p(\rho),\rho]^{\mathrm{c}}_{jj}.$$

De la même manière, on aura

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\mathrm{v}}_{jj}=[V^{\mathrm{C}}_p(\rho),\rho]^{\mathrm{v}}_{jj}.$$

Évolution des cohérences intra-bandes. Pour calculer $\mathrm{i}\hbar\partial_t\rho^{\delta}_{jk}$ avec $\delta\in\{\mathrm{c},\mathrm{v}\}$ et $j\neq k$, on doit déterminer la contribution des grands termes

$$\left[V^{\mathrm{C}}_g(\rho),\rho\right]^{\delta}_{jk}\;=\;\sum_{l\neq\{j,k\}}\left(V^{\mathrm{C}}_{gjl}\rho_{lk}-\rho_{jl}V^{\mathrm{C}}_{glk}\right)^{\delta}+V^{\delta}_{gjk}(\rho^{\delta}_{kk}-\rho^{\delta}_{jj})+\rho^{\delta}_{jk}(V^{\delta}_{gjj}-V^{\delta}_{gkk}).$$

Commençons par le calcul du terme $V^{\delta}_{gjk}(\rho^{\delta}_{kk}-\rho^{\delta}_{jj})$. Les expressions des éléments de V^{δ}_{gjk} pour $j\neq k$ sont données par (3.33) car $j\neq k$.

$$V^{\delta}_{gjk}(\rho^{\delta}_{kk}-\rho^{\delta}_{jj})=\Lambda^{\delta}_{gjk}(\rho^{\delta}_{kk}-\rho^{\delta}_{jj})=-2R^{\delta}_{jkjk}\rho^{\delta}_{jk}(\rho^{\delta}_{kk}-\rho^{\delta}_{jj}).\tag{3.34}$$

Les éléments diagonaux des matrices (3.32) permettent d'écrire les éléments de $V^{\delta}_{gjj}-V^{\delta}_{gkk}$.

$$\begin{aligned}
\Lambda^{\delta}_{gjj}(\rho)-\Lambda^{\delta}_{gkk}(\rho)&=2\sum_{\alpha}\left(R^{\delta}_{j\alpha j\alpha}-R^{\delta}_{k\alpha k\alpha}\right)\rho^{\delta}_{\alpha\alpha},\\
\zeta^{\delta}_{gjj}(\rho)-\zeta^{\delta}_{gkk}(\rho)&=2\sum_{\alpha}\left(R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha j\alpha}-R^{\mathrm{c-v}}_{k\alpha k\alpha}\right)\rho^{\delta}_{\alpha\alpha},\\
\eta^{\mathrm{c-v}}_{gjj}-\eta^{\mathrm{c-v}}_{gkk}&=-\sum_{\beta}\left(R^{\mathrm{c-v}}_{j\beta j\beta}-R^{\mathrm{c-v}}_{k\beta k\beta}\right),\\
\kappa^{\mathrm{v}}_{gjj}-\kappa^{\mathrm{v}}_{gkk}&=-2\sum_{\beta}\left(R^{\mathrm{v}}_{\beta j\beta j}-R^{\mathrm{v}}_{\beta k\beta k}\right).
\end{aligned}$$

En faisant la somme du terme (3.34) avec $\rho^{\delta}_{jk}(V^{\delta}_{gjj} - V^{\delta}_{gkk})$, on obtient pour $\delta = \mathrm{c}$

$$\begin{aligned} V^{\mathrm{c}}_{gjk}(\rho^{\mathrm{c}}_{kk} - \rho^{\mathrm{c}}_{jj}) + \rho^{\mathrm{c}}_{jk}(V^{\mathrm{c}}_{gjj} - V^{\mathrm{c}}_{gkk}) =& 2 \sum_{\alpha \neq \{j,k\}} \left(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha j\alpha} - R^{\mathrm{c}}_{k\alpha k\alpha}\right) \rho^{\mathrm{c}}_{\alpha\alpha}\rho^{\mathrm{c}}_{jk} \\ &+ \left(\zeta^{\mathrm{v}}_{gjj}(\rho) + \eta^{\mathrm{c-v}}_{gjj} - \zeta^{\mathrm{v}}_{gkk}(\rho) - \eta^{\mathrm{c-v}}_{gkk}\right) \rho^{\mathrm{c}}_{jk}. \end{aligned} \tag{3.35}$$

Pour $\delta = \mathrm{c}$, il nous reste

$$\begin{aligned} \sum_{l \neq \{j,k\}} \left(V^{\mathrm{C}}_{gjl}\rho_{lk} - \rho_{jl}V^{\mathrm{C}}_{glk}\right) =& -2 \sum_{\alpha \neq \{j,k\}} \left(R^{\mathrm{c}}_{j\alpha j\alpha} - R^{\mathrm{c}}_{\alpha k\alpha k}\right) \rho^{\mathrm{c}}_{j\alpha}\rho^{\mathrm{c}}_{\alpha k} \\ &- \sum_{\alpha \neq \{j,k\}} \left(R^{\mathrm{c-v}}_{j\alpha j\alpha} - R^{\mathrm{c-v}}_{k\alpha k\alpha}\right) \rho^{\mathrm{cv}}_{j\alpha}\rho^{\mathrm{vc}}_{\alpha k}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Pour $j \neq k$, on voit que la contribution $\left[V^{\mathrm{C}}_{g}(\rho), \rho\right]_{jk}$ qui est la somme de (3.35) et (3.36) est non-nulle. Donc dans ce cas, on a

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{\delta}_{jk} = \left[V^{\mathrm{C}}_{g}(\rho), \rho\right]^{\delta}_{jk} + \left[V^{\mathrm{C}}_{p}(\rho), \rho\right]^{\delta}_{jk},$$

avec $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$.

Évolution des cohérences inter-bandes. On peut déduire des calculs précédents que $\left[V^{\mathrm{C}}_{g}(\rho), \rho\right]_{jk} \neq 0$ dans le cas des inter-bandes, donc l'évolution des cohérences inter-bandes donne

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t \rho^{\mathrm{cv}}_{jk} = \left[V^{\mathrm{C}}_{g}(\rho), \rho\right]^{\mathrm{cv}}_{jk} + \left[V^{\mathrm{C}}_{p}(\rho), \rho\right]^{\mathrm{cv}}_{jk}.$$

Termes de relaxation. Les livres [NM92, SSL94, Boy92, Lou00] expliquent qu'il apparaît physiquement un décalage d'ordre de grandeur entre les dynamiques des populations et celles des cohérences. Ce décalage provient des processus de relaxation existant au sein du système. Dans les boîtes quantiques, il existe plusieurs processus de relaxation dont celle donnée dans [CVC+05] qui est obtenue lors de l'émission des phonons optiques sur les échelles de temps ultra-courtes. On traite aussi dans [Per01, Via04, Gra08] d'autres processus de relaxation. Ces processus de relaxation amortissent le système et modifient les dynamiques des densités avec les décalages dans les ordres de grandeur. Ce décalage se traduit mathématiquement par l'ajout des termes d'ordre $\epsilon^{\alpha}(\alpha \geq 0)$ à l'équation des populations et des termes d'ordre ϵ^2 aux équations des cohérences.
Dans notre cas, nous considérons que les contributions des processus de relaxation pour les dynamiques des populations sont nulles et les contributions sont de l'ordre 1 pour les dynamiques les cohérences (voir [Lou00, BCD04]).
Les expressions des relaxations non diagonales se résument à

$$-\lambda_{jk}\rho_{jk} \quad \text{avec} \quad \lambda_{jk} = \lambda > 0,$$

pour tout j, k.

Mise en échelle du modèle de Bloch. Après l'écriture de tous les termes du modèle de Bloch dans les différentes échelles du petit paramètre ϵ selon les critères physiques et mathématiques, nous obtenons les modèles suivants.

Populations.

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jj}^{\delta} + \mathrm{i}\epsilon^2 \partial_\tau \rho_{jj}^{\delta} = \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot [\mathbf{M}, \rho]_{jj}^{\delta} + \epsilon^2 \left[V^{\mathrm{C}}(\rho), \rho \right]_{jj}^{\delta}, \tag{3.37}$$

avec $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$.

Cohérences.

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jk}^{\delta} + \mathrm{i}\epsilon^2 \partial_\tau \rho_{jk}^{\delta} = (\mathcal{E}_j^{\delta} - \mathcal{E}_k^{\delta} - \mathrm{i}\lambda)\rho_{jk}^{\delta} + \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot [\mathbf{M}, \rho]_{jk}^{\delta} + \epsilon \left[V^{\mathrm{C}}(\rho), \rho \right]_{jk}^{\delta}, \tag{3.38}$$

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{cv}} + \mathrm{i}\epsilon^2 \partial_\tau \rho_{jk}^{\mathrm{cv}} = (\mathcal{E}_j^{\mathrm{c}} - \mathcal{E}_k^{\mathrm{v}} - \mathrm{i}\lambda)\rho_{jk}^{\mathrm{cv}} + \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \cdot [\mathbf{M}, \rho]_{jk}^{\mathrm{cv}} + \epsilon \left[V^{\mathrm{C}}(\rho), \rho \right]_{jk}^{\mathrm{cv}}. \tag{3.39}$$

3.6.2 Dérivation d'un modèle asymptotique

Le modèle de Bloch sont en général l'outil de modélisation fiable des systèmes quantiques et il peut être approché dans certains contextes par les équations de taux.
Les équations de taux sont les équations différentielles ordinaires qui donnent l'évolution temporelle des populations d'un système quantique. Aucune cohérence n'apparaît dans les dynamiques des populations. Les évolutions des populations $\rho_{jj}(t)$ s'écrivent

$$\partial_t \rho_{jj}(t) = \sum_k \sigma_{jk}\big(\rho_{kk}(t) - \rho_{jj}(t)\big), \tag{3.40}$$

où σ_{jk} est la matrice de taux de transitions et dépend les paramètres physiques du champ électrique et des boîtes quantiques.
La matrice de taux de transitions est la source de description des résonances du système quantique et elle est symétrique car

$$\forall j, k \in \mathbb{N}, \quad \sigma_{jk} = \sigma_{kj}.$$

Les équations de taux sont souvent appelées équation de Boltzmann ([BCD04, BCDG04]) et peuvent être généralisées avec les équations de Fokker–Planck.
On retrouve dans les articles [Cas99, Cas01, Cas02] les dérivations rigoureuses des équations de Boltzmann à partir des équations de Liouville. Ces dérivations sont faites sur les systèmes périodiques contenant un seul électron. Les résultats de non convergence pour les systèmes périodiques sont aussi donnés dans [CP02, CP03]. On trouve dans les articles [BCD04, BCDG04] les dérivations les équations de taux à partir des équations de Bloch. Dans ces modèles de Bloch, les termes de relaxation ont été considérés et un couplage fait avec le champ électromagnétique.
Déterminons le comportement en temps lent (temps macroscopique) des modèles de Bloch (3.37), (3.38) et (3.39). Le résultat est donné par le théorème suivant.

Propriété 4 (Modèle asymptotique)**.** *En temps long, les modèles donnés par les équations* (3.37)*,* (3.38) *et* (3.39) *pour une excitation monochromatique d'intensité faible tendent formellement vers une équation de taux* (3.40)*. En plus cette équation de taux est indépendante des termes de l'interaction de Coulomb.*
Remarque 2. *La propriété 4 est obtenu avec un champ électrique $E(\boldsymbol{R}, t)$ et la matrice du moment dipolaire M en dimension 1.*

Démonstration. Supposons que la matrice densité ρ^ϵ s'écrit comme le développement en série du petit paramètre ϵ.

$$\rho^\epsilon = \sum_{p \geq 0} \epsilon^p \rho^{(p)} = \rho^{(0)} + \epsilon \rho^{(1)} + \epsilon^2 \rho^{(2)} + \cdots . \tag{3.41}$$

Remplaçons la matrice densité par sa forme développée (3.41) dans les équations (3.37), (3.38) et (3.39), on obtient

$$\sum_{p\geq 0}\left(\mathrm{i}\epsilon^p\partial_t\rho_{jj}^{\delta(p)}+\mathrm{i}\epsilon^{p+2}\partial_\tau\rho_{jj}^{\delta(p)}\right)=\sum_{p\geq 0}\epsilon^{p+1}E(\mathbf{R},t)\left[M,\rho^{(p)}\right]_{jj}^{\delta}+\sum_{p,q\geq 0}\epsilon^{p+q+2}\left[V^{\mathrm{C}}(\rho^{(p)}),\rho^{(q)}\right]_{jj}^{\delta}, \tag{3.42}$$

$$\begin{aligned}\sum_{p\geq 0}\left(\mathrm{i}\epsilon^p\partial_t\rho_{jk}^{\delta(p)}+\mathrm{i}\epsilon^{p+2}\partial_\tau\rho_{jk}^{\delta(p)}\right)=&\sum_{p\geq 0}\left(\epsilon^pW_{jk}^{\delta}\rho_{jk}^{\delta(p)}+\epsilon^{p+1}E(\mathbf{R},t)\left[M,\rho^{(p)}\right]_{jk}^{\delta}\right)\\&+\sum_{p,q\geq 0}\epsilon^{p+q+1}\left[V^{\mathrm{C}}(\rho^{(p)}),\rho^{(q)}\right]_{jk}^{\delta},\end{aligned} \tag{3.43}$$

et

$$\begin{aligned}\sum_{p\geq 0}\left(\mathrm{i}\epsilon^p\partial_t\rho_{jk}^{\mathrm{cv}(p)}+\mathrm{i}\epsilon^{p+2}\partial_\tau\rho_{jk}^{\mathrm{cv}(p)}\right)=&\sum_{p\geq 0}\left(\epsilon^pW_{jk}^{\mathrm{cv}}\rho_{jk}^{\mathrm{cv}}+\epsilon^{p+1}E(\mathbf{R},t)\left[M,\rho^{(p)}\right]_{jk}^{\mathrm{cv}}\right)\\&+\sum_{p,q\geq 0}\epsilon^{p+q+1}\left[V^{\mathrm{C}}(\rho^{(p)}),\rho^{(q)}\right]_{jk}^{\mathrm{cv}},\end{aligned} \tag{3.44}$$

avec $W_{jk}^{\delta\delta'}=\mathcal{E}_j^{\delta}-\mathcal{E}_k^{\delta'}-\mathrm{i}\lambda$ et $\delta,\delta'\in\{\mathrm{c},\mathrm{v}\}$.

Hypothèse 3. *(i) Nous supposons que le champ $E(\boldsymbol{R},t)$ est une fonction à valeurs réelles et représente un laser monochromatique.*

$$E(\boldsymbol{R},t)=\frac{E_{max}}{\hbar}\cos(\omega_0t)=\frac{E_{max}}{2\hbar}\sum_{\alpha\in\{-1,1\}}\exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0t),$$

où ω_0 est la fréquence propre de l'onde.
(ii) Les éléments de la matrice du moment dipolaire M sont complexes.

$$\forall j,k\quad et\quad \forall\delta\in\{\mathrm{c},\mathrm{v},\mathrm{cv}\},\quad M_{jk}^{\delta}\in\mathbb{C}.$$

(iii) On relie les données initiales des deux variables de temps t et τ. C'est-à-dire que pour tout $j\neq k$,

$$\rho_{jk}^{\delta}(0,0)=\rho_{jk}^{\delta}(0,\tau)=\rho_{jk}^{\delta}(t,0)=0, \tag{3.45}$$

avec $\delta\in\{\mathrm{c},\mathrm{v}\}$.

La démonstration du théorème se fait en deux étapes :
- écriture des équations des populations et les cohérences correspondantes aux différents ordres du petit paramètre ϵ,
- résolution de ces équations.

Première étape. Écrivons les équations correspondantes aux ordres 0, 1 et 2 du petit paramètre ϵ.

Ordre 0. Les trois dynamiques à l'ordre 0 sont données par

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jj}^{\delta(0)} = 0, \tag{3.46a}$$

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jk}^{\delta(0)} = W_{jk}^{\delta} \rho_{jk}^{\delta(0)} \tag{3.46b}$$

et

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{cv}(0)} = W_{jk}^{\mathrm{cv}} \rho_{jk}^{\mathrm{cv}(0)}. \tag{3.46c}$$

Ordre 1. Les dynamiques à l'ordre 1 sont

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jj}^{\delta(1)} = \frac{E_{max}}{2\hbar} \sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) \left[M, \rho^0\right]_{jj}^{\delta}, \tag{3.47a}$$

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jk}^{\delta(1)} = W_{jk}^{\delta} \rho_{jk}^{\delta(1)} + \frac{E_{max}}{2\hbar} \sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) \left[M, \rho^0\right]_{jk}^{\delta} + \left[V_g^{\mathrm{C}}(\rho^0), \rho^0\right]_{jk}^{\delta}, \tag{3.47b}$$

et

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jk}^{\mathrm{cv}(1)} = W_{jk}^{\mathrm{cv}} \rho_{jk}^{\mathrm{cv}(1)} + \frac{E_{max}}{2\hbar} \sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) \left[M, \rho^0\right]_{jk}^{\mathrm{cv}} + \left[V_g^{\mathrm{C}}(\rho^0), \rho^0\right]_{jk}^{\mathrm{cv}}. \tag{3.47c}$$

Ordre 2. On ne s'intéresse qu'aux populations à l'ordre 2.

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jj}^{\delta(2)} + \mathrm{i}\partial_\tau \rho_{jj}^{\delta(0)} = \frac{E_{max}}{2\hbar} \sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) \left[M, \rho^1\right]_{jj}^{\delta} + \left[V_p^{\mathrm{C}}(\rho^0), \rho^0\right]_{jj}^{\delta} \tag{3.48}$$

Seconde étape. Résolvons les équations des différents ordres données par (3.46)–(3.48).

Ordre 0. Avec les données initiales (3.45), les solutions des équations (3.46) sont respectivement données par

$$\rho_{jj}^{\delta(0)} = F_j^{\delta}(\tau), \tag{3.49a}$$

$$\rho_{jk}^{\delta(0)} = \rho_{jk}^{\mathrm{cv}(0)} = 0. \tag{3.49b}$$

La matrice densité ρ^0 est diagonale.

Ordre 1. Puisque ρ^0 est diagonale, on a

$$\left[M, \rho^0\right]_{jk} = M^\delta_{jk}\left(\rho^{\delta(0)}_{kk} - \rho^{\delta(0)}_{jj}\right) = M^\delta_{jk}\left(F^\delta_k(\tau) - F^\delta_j(\tau)\right).$$

Dans ce cas, la première équation de (3.47) donne

$$\mathrm{i}\partial_t \rho^{\delta(1)}_{jj} = \frac{E_{max} M^\delta_{jj}}{2\hbar}\left(F^\delta_j(\tau) - F^\delta_j(\tau)\right)\sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) = 0.$$

Sa solution ne dépend pas de la variable t alors elle dépend seulement de la variable τ. On note

$$\rho^{\delta(1)}_{jj} = G^\delta_j(\tau).$$

Pour les deux autres équations, il faut connaître l'expression du commutateur $\left[V^{\mathrm{C}}_g(\rho^0), \rho^0\right]_{jk}$:

$$\left[V^{\mathrm{C}}_g(\rho^0), \rho^0\right]^\delta_{jk} = \sum_l V^\delta_{gjk}(\rho^0)\left(\rho^{\delta(0)}_{kk} - \rho^{\delta(0)}_{jj}\right) \tag{3.50a}$$

et

$$\left[V^{\mathrm{C}}_g(\rho^0), \rho^0\right]^{\mathrm{cv}}_{jk} = \sum_l \gamma^{\mathrm{cv}}_{gjk}(\rho^0)\left(\rho^{v(0)}_{kk} - \rho^{c(0)}_{jj}\right) \tag{3.50b}$$

Les termes (3.32) montrent que pour une matrice diagonale ρ^0, on a $\gamma^{\mathrm{cv}}_{gjk}(\rho^0) = 0$ et $V^\delta_{gjk}(\rho^0)$ est diagonale. Dans ce cas, les deux termes de (3.50) sont nuls et on a

$$\mathrm{i}\partial_t \rho^{\delta(1)}_{jk} = W^\delta_{jk}\rho^{\delta(1)}_{jk} + \frac{E_{max} M^\delta_{jk}}{2\hbar}\left(F^\delta_k(\tau) - F^\delta_j(\tau)\right)\sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t), \tag{3.51a}$$

et

$$\mathrm{i}\partial_t \rho^{\mathrm{cv}(1)}_{jk} = W^{\mathrm{cv}}_{jk}\rho^{\mathrm{cv}(1)}_{jk} + \frac{E_{max} M^{\mathrm{cv}}_{jk}}{2\hbar}\left(F^{\mathrm{v}}_k(\tau) - F^{\mathrm{c}}_j(\tau)\right)\sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t). \tag{3.51b}$$

Analyse des résonances. Dans le cas où $\lambda = 0$, les termes qui s'annulent grâce à la résonance entre les états j et k sont donnés par

$$\alpha\omega_0 - W^\delta_{jk} \quad \text{et} \quad \alpha\omega_0 - W^{\mathrm{cv}}_{jk},$$

avec $\alpha \in \{-1, 1\}$. Hors résonance, les solutions sont

$$\rho^{\delta(1)}_{jk} = -\frac{E_{max} M^\delta_{jk}}{2\hbar}\left(F^\delta_k(\tau) - F^\delta_j(\tau)\right)\sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \frac{\exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) - \exp(-\mathrm{i}W^\delta_{jk} t)}{\alpha\omega_0 + W^\delta_{jk}}$$

et

$$\rho^{\mathrm{cv}(1)}_{jk} = -\frac{E_{max} M^{\mathrm{cv}}_{jk}}{2\hbar}\left(F^{\mathrm{v}}_k(\tau) - F^{\mathrm{c}}_j(\tau)\right)\sum_{\alpha\in\{-1,1\}} \frac{\exp(\mathrm{i}\alpha\omega_0 t) - \exp(-\mathrm{i}W^{\mathrm{cv}}_{jk} t)}{\alpha\omega_0 + W^{\mathrm{cv}}_{jk}}.$$

Ordre 2. Puisque la matrice densité ρ^0 est diagonale alors pour tout j, le commutateur $\left[V_p^{\mathrm{C}}(\rho^0), \rho^0\right]_{jj}^{\delta}$ est nul. L'équation (3.48) devient

$$\mathrm{i}\partial_t \rho_{jj}^{\delta(2)} + \mathrm{i}\partial_\tau F_j^\delta = \frac{E_{max}}{2\hbar} \sum_{\alpha', l\neq j} \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 t) \left(M_{jl}^\delta \rho_{lj}^{\delta(1)} + M_{jl}^{\delta\delta'} \rho_{lj}^{\delta'\delta(1)} - \rho_{jl}^{\delta(1)} M_{lj}^\delta - \rho_{jl}^{\delta\delta'(1)} M_{lj}^{\delta'\delta} \right).$$

La solution donne

$$\rho_{jj}^{\delta(2)} = -t\partial_\tau F_j^\delta - \frac{\mathrm{i}E_{max}}{2\hbar} \sum_{\alpha', l\neq j} \int_0^t \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 s) \left(M_{jl}^\delta \rho_{lj}^{\delta(1)} + M_{jl}^{\delta\delta'} \rho_{lj}^{\delta'\delta(1)} - \rho_{jl}^{\delta(1)} M_{lj}^\delta - \rho_{jl}^{\delta\delta'(1)} M_{lj}^{\delta'\delta} \right) ds. \tag{3.53}$$

Hors résonance, commençons le calcul de la première intégrale de (3.53) :

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha'} \int_0^t \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 s) \rho_{lj}^{\delta(1)} ds \\
= & -\frac{E_{max} M_{lj}^\delta}{2\hbar} \left(F_j^\delta(\tau) - F_l^\delta(\tau) \right) \sum_{\alpha\neq-\alpha'} \left(\int_0^t \frac{\exp(\mathrm{i}(\alpha+\alpha')\omega_0 s)}{\alpha\omega_0 + W_{lj}^\delta} ds + \int_0^t \frac{\exp(\mathrm{i}(\alpha'\omega_0 - W_{lj}^\delta)s)}{\alpha\omega_0 + W_{lj}^\delta} ds \right) \\
& -\frac{E_{max} M_{lj}^\delta}{2\hbar} \left(F_j^\delta(\tau) - F_l^\delta(\tau) \right) \sum_{\alpha} \left(\frac{2t}{\alpha\omega_0 + W_{lj}^\delta} + \int_0^t \frac{\exp(\mathrm{i}(-\alpha\omega_0 - W_{lj}^\delta)s)}{\alpha\omega_0 + W_{lj}^\delta} ds \right).
\end{aligned}$$

Les temps les plus rapides sont obtenus en faisant tendre le paramètre ϵ vers 0. Les intégrales du calcul précédent ont une limite nulle quand $\epsilon \to 0$. Alors l'intégrale précédente nous donne

$$\sum_{\alpha'} \int_0^t \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 s) \rho_{lj}^{\delta(1)} = -\frac{E_{max} M_{lj}^\delta}{\hbar} \left(F_j^\delta(\tau) - F_l^\delta(\tau) \right) \sum_{\alpha} \left(\frac{t}{\alpha\omega_0 + W_{lj}^\delta} \right).$$

Identiquement les autres intégrales de (3.53) peuvent être déduites. On a

$$\sum_{\alpha'} \int_0^t \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 s) \rho_{lj}^{\delta'\delta(1)} = -\frac{E_{max} M_{lj}^{\delta'\delta}}{\hbar} \left(F_j^\delta(\tau) - F_l^{\delta'}(\tau) \right) \sum_{\alpha} \left(\frac{t}{\alpha\omega_0 + W_{lj}^{\delta'\delta}} \right),$$

$$\sum_{\alpha'} \int_0^t \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 s) \rho_{jl}^{\delta(1)} = -\frac{E_{max} M_{jl}^\delta}{\hbar} \left(F_l^\delta(\tau) - F_j^\delta(\tau) \right) \sum_{\alpha} \left(\frac{t}{\alpha\omega_0 + W_{jl}^\delta} \right)$$

et

$$\sum_{\alpha'} \int_0^t \exp(\mathrm{i}\alpha'\omega_0 s) \rho_{jl}^{\delta\delta'(1)} = -\frac{E_{max} M_{jl}^{\delta\delta'}}{\hbar} \left(F_l^{\delta'}(\tau) - F_j^\delta(\tau) \right) \sum_{\alpha} \left(\frac{t}{\alpha\omega_0 + W_{jl}^{\delta\delta'}} \right).$$

La solution donnée par (3.53) devient alors

$$\begin{aligned}
\rho_{jj}^{\delta(2)} = & -t\partial_\tau F_j^\delta + t\frac{E_{max}^2}{2\hbar^2}\mathrm{i} \sum_{\alpha, l\neq j} |M_{jl}^\delta|^2 \left(F_j^\delta(\tau) - F_l^\delta(\tau) \right) \left(\frac{W_{jl}^\delta + W_{lj}^\delta}{(\alpha\omega_0 + W_{lj}^\delta)(\alpha\omega_0 + W_{jl}^\delta)} \right) \\
& + t\frac{E_{max}^2}{2\hbar^2}\mathrm{i} \sum_{\alpha, l\neq j} |M_{jl}^{\delta\delta'}|^2 \left(F_j^\delta(\tau) - F_l^{\delta'}(\tau) \right) \left(\frac{W_{jl}^{\delta\delta'} + W_{lj}^{\delta'\delta}}{(\alpha\omega_0 + W_{lj}^{\delta'\delta})(\alpha\omega_0 + W_{jl}^{\delta\delta'})} \right).
\end{aligned}$$

Pour que le second terme des populations s'annule pour les petits temps, il faut que

$$\partial_\tau F_j^\delta = \frac{E_{max}^2}{2\hbar^2}\mathrm{i}\left(\sum_{\alpha,l\neq j}|M_{jl}^\delta|^2\left(F_j^\delta(\tau)-F_l^\delta(\tau)\right)\left(\frac{W_{jl}^\delta+W_{lj}^\delta}{(\alpha\omega_0+W_{lj}^\delta)(\alpha\omega_0+W_{jl}^\delta)}\right)\right. \tag{3.54}$$
$$\left.+\sum_{\alpha,l\neq j}|M_{jl}^{\delta\delta'}|^2\left(F_j^\delta(\tau)-F_l^{\delta'}(\tau)\right)\left(\frac{W_{jl}^{\delta\delta'}+W_{lj}^{\delta'\delta}}{(\alpha\omega_0+W_{lj}^{\delta'\delta})(\alpha\omega_0+W_{jl}^{\delta\delta'})}\right)\right).$$

En utilisant la relation (3.49a), l'équation (3.54) peut se réécrire

$$\begin{aligned}\partial_\tau\rho_{jj}^\delta &= -\frac{2\lambda E_{max}^2}{2\hbar^2}\left(\sum_{\alpha,l\neq j}\frac{|M_{jl}^\delta|^2}{(\alpha\omega_0+W_{lj}^\delta)(\alpha\omega_0+W_{jl}^\delta)}\big(\rho_{jj}^\delta(\tau)-\rho_{ll}^\delta(\tau)\big)\right.\\ &\qquad\left.+\sum_{\alpha,l\neq j}\frac{|M_{jl}^{\delta\delta'}|^2}{(\alpha\omega_0+W_{lj}^{\delta\delta'})(\alpha\omega_0+W_{jl}^{\delta\delta'})}\big(\rho_{jj}^\delta(\tau)-\rho_{ll}^{\delta'}(\tau)\big)\right)\\ &= \sum_{l\neq j}\sigma_{jl}^\delta\big(\rho_{jj}^\delta(\tau)-\rho_{ll}^{\delta'}(\tau)\big),\end{aligned} \tag{3.55}$$

avec

$$\sigma_{jl}^\delta=\begin{cases}-\dfrac{2\lambda E_{max}^2|M_{jl}^\delta|^2}{2\hbar^2(\alpha\omega_0+W_{lj}^\delta)(\alpha\omega_0+W_{jl}^\delta)} & \text{si} \quad l\in I^\delta=\{1,\cdots,N_\delta\},\\ -\dfrac{2\lambda E_{max}^2|M_{jl}^{\delta\delta'}|^2}{2\hbar^2(\alpha\omega_0+W_{lj}^{\delta\delta'})(\alpha\omega_0+W_{jl}^{\delta\delta'})} & \text{si} \quad l\in I^{\delta'}=\{1,\cdots,N_{\delta'}\} \quad \text{et} \quad \delta\neq\delta'.\end{cases}$$

La matrice σ est symétrique car $\forall j,l,\ \sigma_{jl}=\sigma_{lj}$.
L'équation (3.55) est une équation de taux dont la matrice σ est celle de taux de transition.

□

Dans l'expression de l'équation (3.55) les effets coulombiens n'apparaissent nulle part. L'interaction de Coulomb est une correction qui apparaît dans le modèle de Bloch pour les boîtes quantiques que pour les évolutions en temps rapide. Elle est nulle ou même négligeable dans les évolutions temporelles des populations en échelle de temps lents.

Remarque 3. *Dans les tests numériques effectués dans le chapitre 4 sur la transparence auto-induite, en prenant les fréquences de Rabi égales aux fréquences inter-bandes des boîtes quantiques ($\omega_{jk}^{\mathrm{cv}}=\omega_R$), nous assistons aux modifications apportées par les effets coulombiens sur les dynamiques des populations.*

Chapitre 4

Simulations numériques

Sommaire

4.1 Introduction 99

4.2 Schémas pour les équations de Maxwell 100

4.2.1 Équations de Maxwell unidimensionnelles 100

4.2.2 Discrétisation 100

4.3 Schémas pour le modèle de Bloch 102

4.3.1 Méthode de splitting 102

4.3.2 Approximation de la matrice densité 103

4.3.3 Approximation de la densité assistée par les phonons 109

4.3.4 Solutions numériques des modèles de Bloch 110

4.4 Modèle Maxwell–Bloch discrétisé 113

4.4.1 Couplage Maxwell–Bloch faible avec l'interaction de Coulomb . . 114

4.4.2 Couplage Maxwell–Bloch faible avec l'interaction électron-phonon 115

4.4.3 Condition aux bords 115

4.5 Tests numériques 117

4.5.1 Transparence auto-induite 117

4.5.2 Transfert de Cohérence 129

4.5.3 Analyse numérique des termes de Coulomb 130

4.5.4 L'interaction électron–phonon dans les boîtes quantiques 132

4.1 Introduction

Ce chapitre concerne l'étude numérique du modèle de Maxwell–Bloch pour l'interaction entre les boîtes quantiques et le laser. Le modèle de Bloch est non linéaire et sa solution doit préserver certaines propriétés qualitatives et quantitatives telles que la conservation de la trace, l'hermicité et la positivité. L'étude mathématique effectuée dans le chapitre précédent sur le modèle de Bloch continu faisant intervenir l'hamiltonien libre des électrons, l'hamiltonien de l'interaction laser–boîte et l'hamiltonien de Coulomb, ont montré que ces propriétés qualitatives sont conservées au cours du temps.
L'étude numérique nous permet de construire un modèle numérique couplé de Maxwell–Bloch qui approche efficacement le modèle continu et permet de préserver les bonnes propriétés de la solution à chaque pas de temps.
Les deux problèmes sont approchés séparément. Tout d'abord, nous approchons le modèle de Bloch avec la méthode de splitting. Ensuite les équations de Maxwell sont approchées avec la méthode des différences finies en utilisant le schéma de Yee donné dans [Yee66]. Le schéma de Yee consiste à calculer les deux variables électriques et magnétiques sur des grilles différents.
Des simulations numériques des propriétés physiques et quantiques de certaines boîtes quantiques ont été réalisées. Elles permettent de valider le modèle numérique obtenu après la discrétisation et de comprendre les comportements des boîtes quantiques.
Ce chapitre est organisé de la manière suivante :
Tout d'abord, la section 4.2 traite la discrétisation des équations de Maxwell avec le schéma de Yee. La discrétisation du modèle de Bloch avec la méthode de splitting définie dans la section 4.3.1, est traitée dans la section 4.3. Le couplage pour discrétiser les modèles de Maxwell–Bloch est donné dans la section 4.4. Enfin la section 4.5 est consacrée à la validation des modèles et aux tests numériques.

4.2 Schémas pour les équations de Maxwell

L'utilisation de schémas numériques pour les équations de Maxwell dans le cadre du couplage avec les équations de Bloch est exposée dans [Zio97a, Zio97b, ZAG95, Rei00, BBFB+04, Bid03, Sau05, Bid06, BS06, SB07].

Les équations de Maxwell couplées avec les modèles de Bloch pour les atomes à deux niveaux d'énergie sont discrétisées avec une méthode de type différences finies FDTD (Finite-Difference-Time-Domain) dans [Zio97a, Zio97b] et un schéma de Crank-Nicolson pour l'équation de Bloch. Cette méthode de Crank-Nicolson doit être résolue avec un point fixe, ce qui pose le problème d'accumulation d'erreurs d'approximation. Ce modèle est aussi utilisé dans [ZAG95] dans le cadre de la simulation de la transparence auto-induite. Les modèles couplés de Maxwell-Bloch sont aussi approchées avec les méthodes de volumes finis dans [Rei00, Bid06]. L'étude de la stabilité linéaire et non-linéaire des modèles numériques obtenus avec le schéma de Yee est donnée dans [Bid03, Bid06] avec plusieurs types de discrétisation du modèle de Bloch. Nous retrouvons la discrétisation des équations de Maxwell avec le schéma de Yee dans les travaux d'Olivier Saut ([Sau03, Sau04, BS06, SB07]) pour simuler l'interaction entre l'onde électromagnétique et les cristaux non-linéaires comme le KDP. Enfin, pour diminuer le coût et la complexité de calcul des équations de Maxwell dans le cas du couplage avec les modèles de Bloch, l'article [Sau05] présente une discrétisation du modèle couplé avec une méthode spectrale.

Les cas tests étudiés dans cette thèse sont mis en œuvre avec les équations de Maxwell unidimensionnelles données dans [Sau03, Sau04, Bid06]. Nous explicitons dans la suite de cette partie, la discrétisation des équations de Maxwell unidimensionnelles avec le schéma de Yee.

4.2.1 Équations de Maxwell unidimensionnelles

Supposons que l'onde électromagnétique du laser se propage suivant la direction longitudinale z et que les variables du modèle de Maxwell ne dépendent que de la variable z. Les variables qui ont alors une évolution temporelle non triviale sont (E_x, E_y) et (B_x, B_y). Le modèle sans dimension est

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \partial_t\big(B_x, B_y\big) & = & -\partial_z\big(-E_y, E_x\big), \\ \partial_t\big(E_x, E_y\big) & = & \partial_z\big(-B_y, B_x\big) - \frac{\mu v^2}{E_{\max}}\big(J_x, J_y\big), \end{array} \right.$$

avec $\mathbf{J} = \partial_t \mathbf{P}$.

Dans de nombreux cas applicatifs, les deux polarisations (B_x, E_y) et (B_y, E_x) sont couplées via l'expression de J_x et J_y.

4.2.2 Discrétisation

La discrétisation de ces équations est effectuée avec un schéma aux différences finies qu'on peut retrouver dans [Yee66, ZAG95, Bid03, Bid06, Sau03]. Le schéma aux différences

finies repose sur une localisation très spécifique des variables du problème dans l'espace–temps. Il respecte les propriétés de symétrie des équations de Maxwell et il est explicite en temps.

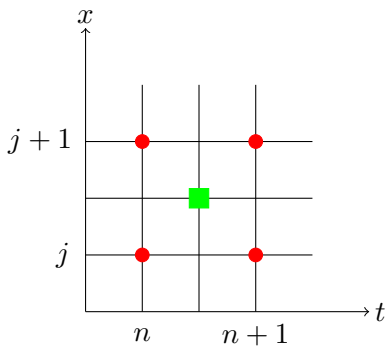


FIGURE 4.1 – Schéma de Yee

On peut voir via la figure 4.1 deux familles de points de calcul : les points entiers $(n\delta t, j\delta z)$ sont indiqués par les cercles rouges et demi-entiers $((n+\frac{1}{2})\delta t, (j+\frac{1}{2})\delta z)$ sont indiqués par les rectangles verts $(n, j \in \mathbb{N})$.
L'équation de Faraday est résolue aux demi-pas entiers en temps et en espace alors que celle d'Ampère aux pas entiers. Notons pour tout $\mu \in \{x, y\}$

$$B^{n+\frac{1}{2}}_{\mu,j+\frac{1}{2}} \approx B_\mu\big((n+\frac{1}{2})\delta t, (j+\frac{1}{2})\delta z\big) \quad \text{et} \quad E^n_{\mu,j} \approx E_\mu(n\delta t, j\delta z).$$

L'équation de Faraday discrétisée donne

$$\left(\frac{B^{n+\frac{1}{2}}_{x,j+\frac{1}{2}} - B^{n-\frac{1}{2}}_{x,j+\frac{1}{2}}}{\delta t}, \frac{B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} - B^{n-\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}}}{\delta t}\right) = -\left(\frac{-E^n_{y,j+1} + E^n_{y,j}}{\delta z}, \frac{\mathbf{E}^n_{x,j+1} - \mathbf{E}^n_{x,j}}{\delta z}\right). \tag{4.1}$$

L'équation d'Ampère discrétisée donne

$$\begin{aligned}\left(\frac{E^{n+1}_{x,j} - E^n_{x,j}}{\delta t}, \frac{E^{n+1}_{y,j} - E^n_{y,j}}{\delta t}\right) &= \left(\frac{-B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} + B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j-\frac{1}{2}}}{\delta z}, \frac{B^{n+\frac{1}{2}}_{x,j+\frac{1}{2}} - B^{n+\frac{1}{2}}_{x,j-\frac{1}{2}}}{\delta z}\right) \\ &\quad - \frac{\mu v^2}{E_{\max}}\left(J^{n+\frac{1}{2}}_{x,j}, J^{n+\frac{1}{2}}_{y,j}\right).\end{aligned} \tag{4.2}$$

Le schéma est explicite et l'ordre de consistance des solutions des équations (4.1) et (4.2) est 2 pour $\mathbf{J} = 0$.

Condition de stabilité du schéma.

Modèle linéaire. Les équations de Maxwell sont linéaires dans les cas où $\mathbf{J} = 0$.
Propriété 5. *La condition de stabilité du schéma dans le cas du modèle linéaire est* $\frac{\delta t}{\delta z} < 1$.

La démonstration est notamment donnée dans [Bid06] grâce à l'analyse de von Neumann et aussi dans le cas non linéaire par une méthode d'énergie.

4.3 Schémas pour le modèle de Bloch

4.3.1 Méthode de splitting

La méthode de splitting permet de donner des algorithmes ayant un coût réduit de calcul et ainsi d'aborder des problèmes très complexes. Nous l'utilisons car dans notre contexte elle a l'avantage de conserver les propriétés mathématiques des modèles continus. Comme son nom l'indique, le mécanisme d'application est tout simplement "Séparer et résoudre".
Une introduction générale sur la méthode est donnée dans [MQ02]. Elle est utilisée dans de nombreux domaines d'application tels que la chimie complexe, la météorologie, l'océanographie, la décomposition de domaine, les méthodes d'ondelettes, les mathématiques financières, la mécanique quantique, la physique des plasmas, l'astrophysique, etc. Elle a été utilisée par exemple pour l'approximation des équations d'advection–diffusion–réaction dans [HV03], des équations de Schrödinger non-linéaire dans [BBD02], des équations paraboliques non-homogènes dans [FOS], des EDP hamiltoniennes [FG11].
Concernant les méthodes d'approximation des modèles de Bloch, on retrouve dans [BBR01, Bid06] la méthode de splitting utilisée dans le cas des modèles prenant compte les termes de relaxation et ces modèles numériques sont utilisés par O. Saut pour simuler l'interaction entre le laser et les cristaux non-linéaires [Sau03, Sau04, BBFB$^+$04, Sau05, BS06, SB07].

Principe. L'approximation des équations avec la méthode de splitting se fait en trois étapes :
- diviser l'équation de départ en plusieurs sous-équations,
- approcher les sous-équations avec des méthodes d'approximation adaptées,
- composer les solutions des sous-équations selon le schéma de splitting souhaité.

Les schémas de splitting largement utilisés dans la littérature sont le schéma de Lie et le schéma de Strang qui donnent respectivement des approximations d'ordre 1 et d'ordre 2 sur les systèmes linéaires non raides.

Le théorème de Trotter–Kato permet d'assurer que la méthode de splitting est une méthode convergente. La structure de la méthode de splitting assure que les propriétés telles que la trace, l'hermicité et la positivité de la solution sont conservées au cours du temps.
Dans notre cas, nous approchons le modèle de Bloch suivant avec la méthode de splitting :

$$\mathrm{i}\partial_t\rho(t) = \big[V(t,\rho(t)),\rho(t)\big] + \sum_{\mathbf{q}} \big(\big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)\big] - \big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(t)\big]^*\big), \tag{4.3}$$

$$\mathrm{i}\partial_t S_{\mathbf{q}}(t) = \big[V(t,\rho(t)), S_{\mathbf{q}}(t)\big] + \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} S_{\mathbf{q}}(t) + n_{\mathbf{q}}\big[G^*_{\mathbf{q}}, \rho(t)\big] + G^*_{\mathbf{q}}\rho(t) + A\big(\rho(t), G^*_{\mathbf{q}}\big), \tag{4.4}$$

avec

$$V(t,\rho(t)) = E_0 + \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho(t)),$$

où les matrices E_0, $\mathbf{M}$, $V^{\mathrm{C}}(\rho(t))$ et $G_{\mathbf{q}}$ et le champ $\mathbf{E}(\mathbf{R},t)$ correspondent aux valeurs sans dimension données dans le chapitre 3.

Les deux modèles (4.3) et (4.4) sont couplés. L'approximation de la densité $\rho(t)$ avec la méthode de splitting nécessite une approximation de la densité $S_{\mathbf{q}}$ qui est obtenue avec l'approximation du modèle (4.4).
Nous commençons avec la discrétisation en temps de l'équation (4.3). Cette discrétisation va nous permettre de déterminer l'ordre nécessaire d'approximation de l'équation (4.4).

4.3.2 Approximation de la matrice densité

L'application de la méthode de splitting sur l'équation (4.3) pour approcher la matrice densité $\rho(t)$ procède ainsi.

Séparation de la première équation du système. C'est la première étape de la méthode. Pour cette équation, nous décidons de la diviser en trois sous-équations données par

$$\mathrm{i}\partial_t\rho_1 = \big[E_0, \rho_1\big], \tag{4.5}$$

$$\mathrm{i}\partial_t\rho_2 = T(t), \tag{4.6}$$

et

$$\mathrm{i}\partial_t\rho_3 = \sum_{\mathbf{q}} \big(\big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}\big] - \big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}\big]^*\big), \tag{4.7}$$

avec $T(t) = \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\big[\mathbf{M},\rho_2\big] + \big[V^{\mathrm{C}}(\rho_2),\rho_2\big]$.

Le choix de cette séparation est liée à la nature des solutions exactes des sous-équations et l'ordre des méthodes d'approximation classiques qui sont utilisées pour les approcher. Une autre alternative possible est de diviser le système (4.6) en quatre sous-équations dont trois équations pour le second membre $\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M}$. Nous obtenons avec cette division une approximation d'ordre 2 avec plusieurs opérateurs à traiter, contrairement à notre alternative qui nécessite au maximum trois opérateurs pour l'approximation d'ordre 2 souhaitée.

Solutions exactes des sous-équations Notons δt le pas de calcul des solutions du problème. Les solutions exactes des trois sous-problèmes au temps $t+\delta t$ en fonction de sa valeur au temps t se déterminent différemment.

Premier système (4.5)**.** La solution est explicite et donnée par

$$\rho_1(t+\delta t) = \exp\big(-\mathrm{i}E_0\delta t\big)\rho_1(t)\exp\big(\mathrm{i}E_0\delta t\big). \tag{4.8}$$

C'est la solution exacte d'une équation classique de Liouville linéaire.

Second système (4.6)**.** Il est impossible d'écrire la solution du modèle (4.6) sous la forme de la solution d'un problème de Liouville linéaire donnée par le premier système (4.5). Sa solution exacte est donnée par la formulation de Duhamel :

$$\rho_2(t+\delta t) = \rho_2(t) - \mathrm{i}\int_t^{t+\delta t} \Big(\big[\mathbf{E}(\mathbf{R},s)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(s)), \rho_2(s)\big]\Big) ds, \tag{4.9}$$

mais nous n'utilisons pas cette forme pour la discrétisation.

Troisième système (4.7)**.** La forme intégrale de la solution est donnée par

$$\rho_3(t+\delta t) = \rho_3(t) - \mathrm{i}\sum_{\mathbf{q}}\int_t^{t+\delta t} \Big(\big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(s)\big] - \big[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}(s)\big]^* \Big) ds. \tag{4.10}$$

Semi-groupes d'évolution du problème. Nous définissons conformément à notre problème trois semi-groupes d'évolution

$$\big(\mathcal{A}(t,P)\big)_{t\geq 0}, \quad \big(\mathcal{B}(t,P)\big)_{t\geq 0} \quad \text{et} \quad \big(\mathcal{C}(t,P,P')\big)_{t\geq 0}$$

où P et P' sont des matrices.
Pour toute matrice M, les trois semi-groupes sont définis par

$$\mathcal{A}(t,P)M = \exp\big(-\mathrm{i}Pt\big)M\exp\big(\mathrm{i}Pt\big),$$

$$\mathcal{B}(t,P)M = M - \mathrm{i}tP$$

et

$$\mathcal{C}(t,P,P')M = \exp\big(-\mathrm{i}(P+P')t\big)M\exp\big(\mathrm{i}Pt\big).$$

Lemme 5. *Pour toutes matrices $M, P \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$, on a*
(i) les flots $t \mapsto \mathcal{A}(t,P)M$, $t \mapsto \mathcal{B}(t,P)M$ et $t \mapsto \mathcal{C}(t,P,P')M$ appartiennent à l'ensemble $\mathcal{C}\big(\mathbb{R}^+, \mathcal{M}_N(\mathbb{C})\big)$.
(ii) Pour P et P' hermitiennes, $\mathcal{A}(t,P)$ et $\mathcal{C}(t,P,P')$ préservent la norme :

$$\|\mathcal{A}(t,P)M\| = \|M\|, \quad \|\mathcal{C}(t,P,P')M\| = \|M\|,$$

où $\|.\|$ est la norme matricielle donnée pour toute matrice A par

$$\|A\|^2 = \mathrm{Tr}(AA^*).$$

Approximation. L'approximation de la matrice densité consiste à approcher les sous-équations (4.8), (4.9) et (4.10). Nous approchons ces sous-équations avec des méthodes numériques qui permettent d'obtenir les ordres d'approximation souhaités et permettent aussi d'obtenir des solutions numériques qui conservent les propriétés qualitatives à chaque pas de temps.

Approximation des sous-équations. Soit n un entier et notons par ρ^n la solution au temps $n\delta t$ de la variable ρ.
Pour le système (4.5), nous gardons la solution exacte au temps $(n+1)\delta t$ en fonction de celle du temps $n\delta t$ (solution (4.8)) :

$$\rho_1^{n+1} = \mathcal{A}(\delta t, E_0)\rho_1^n.$$

Pour le second système (4.6), nous écrivons une solution approchée de $\rho_2(t)$ en utilisant la forme de la solution d'une équation de Liouville linéaire :

$$\rho_2(t+\delta t) = \mathcal{A}\Big(\delta t, \int_t^{t+\delta t} T(s)ds)\Big)\rho_2(t). \tag{4.11}$$

Nous choisissons cette approximation parce que la solution numérique préserve les propriétés qualitatives. Pour que cette solution soit d'ordre 2, nous approchons l'intégrale avec la méthode du point milieu et cela nous donne

$$\rho_2^{n+1} = \mathcal{A}\Big(\delta t, T^{n+\frac{1}{2}}\Big)\rho_2^n$$

avec

$$T^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{E}(\mathbf{R}, (n+\frac{1}{2})\delta t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2^{n+\frac{1}{2}}).$$

La matrice densité $\rho_2^{n+\frac{1}{2}}$ est calculée en approchant l'intégrale de l'équation (4.11) par la méthode des rectangles.

$$\rho_2^{n+\frac{1}{2}} = \mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, T^n\Big)\rho_2^n, \tag{4.12}$$

avec

$$T^n = \mathbf{E}(\mathbf{R}, n\delta t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2^n).$$

Ainsi la méthode utilisée pour approcher cette sous-équation est de type prédicteur–correcteur. La solution approchée du troisième système (4.7) est calculée en approchant sa solution exacte (4.10) avec la méthode du point milieu.

$$\rho_3^{n+1} = \mathcal{B}(\delta t, S^{n+\frac{1}{2}})\rho_3^n$$

avec

$$S^{n+\frac{1}{2}} = \sum_{\mathbf{q}} \big([G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}^{n+\frac{1}{2}}] - [G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}^{n+\frac{1}{2}}]^*\big).$$

Lemme 6. *Pour tout temps t, il existe deux constantes K_1 et K_2 telles que :*

$$\Big\|\rho_2(t+\delta t) - \mathcal{A}\Big(\delta t, T(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_2(t)\Big\| \leq K_1(\delta t)^3$$

et

$$\Big\|\rho_3(t+\delta t) - \mathcal{B}\Big(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_3(t)\Big\| \leq K_2(\delta t)^3.$$

Démonstration. On sait que

$$\mathcal{A}\Big(\delta t, T(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_2(t) = \exp\Big(-\mathrm{i}T(t+\frac{\delta t}{2})\delta t\Big)\rho_2(t)\exp\Big(\mathrm{i}T(t+\frac{\delta t}{2})\delta t\Big).$$

En faisant les développements limités des exponentielles, nous obtenons

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{A}}\Big(\delta t, T(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_2(t) &= \Big(I - \mathrm{i}\delta t T(t+\frac{\delta t}{2}) - \frac{\delta t^2}{2}T^2(t+\frac{\delta t}{2}) + O(\delta t^3)\Big)\rho_2(t)\\ &\quad \Big(I + \mathrm{i}\delta t T(t+\frac{\delta t}{2}) - \frac{\delta t^2}{2}T^2(t+\frac{\delta t}{2}) + O(\delta t^3)\Big).\end{aligned}$$

Puisque

$$T(t+\frac{\delta t}{2}) = \mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)) + \frac{\delta t}{2}\big(\mathbf{E}'(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\partial_t\rho_2(t))\big) + O(\delta t^2)$$

et

$$T^2(t+\frac{\delta t}{2}) = \Big(\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t))\Big)^2 + O(\delta t),$$

alors cela nous donne

$$\begin{aligned}&\mathcal{A}\Big(\delta t, T(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_2(t)\\ &= \rho_2(t) - \mathrm{i}\delta t\big[\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)), \rho_2(t)\big] - \frac{\mathrm{i}\delta t^2}{2}\big[\mathbf{E}'(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\partial_t\rho_2(t)), \rho_2(t)\big]\\ &\quad -\frac{\delta t^2}{2}\big[\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)), \big[\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)), \rho_2(t)\big]\big] + O(\delta t^3).\end{aligned}$$

Sachant que

$$\partial_t\rho_2(t) = -\mathrm{i}\big[\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)), \rho_2(t)\big]$$

et

$$\begin{aligned}\partial_t^2\rho_2(t) &= -\mathrm{i}\big[\mathbf{E}'(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\partial_t\rho_2(t)), \rho_2(t)\big]\\ &\quad -\big[\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)), \big[\mathbf{E}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{M} + V^{\mathrm{C}}(\rho_2(t)), \rho_2(t)\big]\big],\end{aligned}$$

alors

$$\mathcal{A}\Big(\delta t, T(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_2(t) = \rho_2(t) + \delta t\partial_t\rho_2(t) + \frac{\delta t^2}{2}\partial_t^2\rho_2(t) + O(\delta t^3).$$

Cette expression correspond au développement limité de $\rho_2(t+\delta t)$ à l'ordre 2.
Pour la seconde inégalité du lemme, on procède de la même manière en faisant le développement limité de $S(t+\frac{\delta t}{2})$:

$$S(t+\frac{\delta t}{2}) = S(t) + \frac{\delta t}{2}\partial_t S(t) + O(\delta t^2).$$

On obtient

$$\begin{aligned}\mathcal{B}\Big(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_3(t) &= \rho_3(t) - \mathrm{i}\delta t S(t+\frac{\delta t}{2})\\ &= \rho_3(t) - \mathrm{i}\delta t S(t) - \frac{\mathrm{i}\delta t^2}{2}\partial_t S(t) + O(\delta t^3).\end{aligned}$$

Cela revient à

$$\mathcal{B}\Big(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_3(t) = \rho_3(t) + \delta t\partial_t\rho_3(t) + \frac{\delta t^2}{2}\partial_t^2\rho_3(t) + O(\delta t^3).$$

Donc

$$\Big\|\rho_3(t+\delta t) - \mathcal{B}\Big(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2})\Big)\rho_3(t)\Big\| = O(\delta t^3).$$

□

Méthode de Strang La méthode de Strang donnée dans [Str68] permet de construire une solution approchée du modèle (4.3). La solution approchée au pas $(n+1)\delta t$ est donnée par

$$\rho^{n+1} = \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T^{n+\frac{1}{2}})\mathcal{B}(\delta t, S^{n+\frac{1}{2}})\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T^{n+\frac{1}{2}})\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho^n. \tag{4.13}$$

Théorème 8. *La solution numérique donnée par* (4.13) *est d'ordre 2 en temps.*

Démonstration. Commençons par le développement limité des deux premiers opérateurs en utilisant la première inégalité du lemme 6 :

$$\begin{aligned}
&\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\\
&= \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t}{2}\big[T(t), \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\big] - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{4}\big[T'(t), \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\big]\\
&\quad -\frac{\delta t^2}{8}\big[T(t), [T(t), \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)]\big] + O(\delta t^3).
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Le facteur du troisième terme à droite de l'égalité nous donne $-\mathrm{i}\frac{\delta t^2}{4}$ au lieu de $-\mathrm{i}\frac{\delta t^2}{8}$ parce que nous avons

$$\frac{\delta t}{2}T(t+\frac{\delta t}{2}) = \frac{\delta t}{2}T(t) + \frac{\delta t^2}{4}T'(t) + O(\delta t^3),$$

et

$$\exp(\mathrm{i}\frac{\delta t}{2}T(t+\frac{\delta t}{2})) = I + \mathrm{i}\frac{\delta t}{2}T(t) + \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{4}T'(t) - \frac{\delta t^2}{8}T^2(t) + O(\delta t).$$

Utilisons le second membre de (4.14) pour écrire explicitement le développement limité de l'opérateur suivant :

$$\begin{aligned}
&\mathcal{B}(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\\
&= \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t}{2}\big[T(t), \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\big] - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{4}\big[T'(t), \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\big]\\
&\quad -\frac{\delta t^2}{8}\big[T(t), [T(t), \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)]\big] - \mathrm{i}\delta t S(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{2}S'(t) + O(\delta t^3).
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Le développement limité du premier opérateur à droite de la formule nous donne

$$\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t) = \rho(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t}{2}\big[E_0, \rho(t)\big] - \frac{\delta t^2}{8}\big[E_0, [E_0, \rho(t)]\big] + O(\delta t^3).$$

En remplaçant l'opérateur $\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)$ par son développement limité d'ordre 2 dans l'expression (4.15), nous obtenons

$$\begin{aligned}
&\mathcal{B}(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\\
&= \rho(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t}{2}\big[E_0, \rho(t)\big] - \mathrm{i}\frac{\delta t}{2}\big[T(t), \rho(t)\big] - \mathrm{i}\delta t S(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{2}S'(t) - \frac{\delta t^2}{8}\big[E_0, [E_0, \rho(t)]\big]\\
&\quad -\frac{\delta t^2}{4}\big[T(t), [E_0, \rho(t)]\big] - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{4}\big[T'(t), \rho(t)\big] - \frac{\delta t^2}{8}\big[T(t), [T(t), \rho(t)]\big] + O(\delta t^3).
\end{aligned}$$

Finalement la densité au temps $t + \frac{\delta t}{2}$ nous donne

$$\begin{aligned}
&\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{B}(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\\
&= \rho(t) - \mathrm{i}\delta t\big[E_0, \rho(t)\big] - \mathrm{i}\delta t\big[T(t), \rho(t)\big] - \mathrm{i}\delta t S(t) - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{2}S'(t) - \frac{\delta t^2}{2}\big[E_0, [E_0, \rho(t)]\big]\\
&-\frac{\delta t^2}{2}\big[E_0, [T(t), \rho(t)]\big] - \frac{\delta t^2}{2}\big[T(t), [E_0, \rho(t)]\big] - \mathrm{i}\frac{\delta t^2}{2}\big[T'(t), \rho(t)\big]\\
&-\frac{\delta t^2}{2}\big[T(t), [T(t), \rho(t)]\big] - \frac{\delta t^2}{2}\big[E_0, S(t)\big] - \frac{\delta t^2}{2}\big[T(t), S(t)\big] + O(\delta t^3).
\end{aligned}$$

Sachant que

$$\partial_t \rho(t) = -\mathrm{i}\big[E_0, \rho(t)\big] - \mathrm{i}\big[T(t), \rho(t)\big] - \mathrm{i}S(t),$$

et

$$\begin{aligned}
\partial_t^2 \rho(t) \;=\; & -\big[E_0, [E_0, \rho(t)]\big] - \big[E_0, [T(t), \rho(t)]\big] - \big[T(t), [E_0, \rho(t)]\big] - \big[T(t), [T(t), \rho(t)]\big]\\
& -\big[E_0, S(t)\big] - \big[T(t), S(t)\big] - \mathrm{i}\big[T'(t), \rho(t)\big] - \mathrm{i}S'(t),
\end{aligned}$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}
&\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{B}(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\\
&= \rho(t) + \delta t \partial_t \rho(t) + \frac{\delta t^2}{2}\partial_t^2 \rho(t) + O(\delta t^3).
\end{aligned}$$

Ceci correspond un développement d'ordre 2 de $\rho(t+\delta t)$, alors il existe une constante K telle que

$$\left\|\rho(t+\delta t) - \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{B}(\delta t, S(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, T(t+\frac{\delta t}{2}))\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho(t)\right\| \leq K(\delta t)^3$$

□

Dans la démonstration du théorème, on utilise un développement limité d'ordre 1 de la variable $S(t)$. Dans ce cas, nous avons besoin d'une approximation d'ordre 1 de la densité assistée par les phonons $S_{\mathbf{q}}$ dont la dynamique est donnée par l'équation (4.4).

4.3.3 Approximation de la densité assistée par les phonons

La dynamique de la densité $S_{\mathbf{q}}$ est donnée par l'équation (4.4). Pour approcher la solution de cette équation avec la méthode de splitting, nous procédons comme précédemment en la divisant en trois sous-équations.

$$\mathrm{i}\partial_t S_{\mathbf{q},1} = \left[E_0, S_{\mathbf{q},1}\right] + \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} S_{\mathbf{q},1}, \tag{4.16a}$$

$$\mathrm{i}\partial_t S_{\mathbf{q},2} = \left[T(t), S_{\mathbf{q},2}\right], \tag{4.16b}$$

et

$$\mathrm{i}\partial_t S_{\mathbf{q},3} = Q(t), \tag{4.16c}$$

avec $Q(t) = n_{\mathbf{q}} \left[G^*_{\mathbf{q}}, \rho\right] + G^*_{\mathbf{q}}\rho + A(\rho, G^*_{\mathbf{q}})$.

Approximation des sous-équations. Les semi-groupes $\big(\mathcal{A}(t,P)\big)_{t\geq 0}$, $\big(\mathcal{B}(t,P)\big)_{t\geq 0}$ et $\big(\mathcal{C}(t,P,P')\big)_{t\geq 0}$ donnés dans la section précédente sont utilisés pour écrire les solutions approchées des trois sous-équations (4.16). Puisque la solution numérique de la densité ρ (équation (4.13)) fait intervenir les valeurs des densités $S_{\mathbf{q}}$ au demi-pas entier alors nous discrétisons les densités $S_{\mathbf{q}}$ sur les demi-pas de temps. Nous définissons les solutions des sous-équations (4.16a), (4.16b) et (4.16c) au temps $(n+\frac{1}{2})\delta t$ respectivement par

$$S^{n+\frac{1}{2}}_{\mathbf{q},1} = \mathcal{C}\left(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\right) S^{n-\frac{1}{2}}_{\mathbf{q},1},$$

$$S^{n+\frac{1}{2}}_{\mathbf{q},2} = \mathcal{A}\left(\delta t, T^n\right) S^{n-\frac{1}{2}}_{\mathbf{q},2}$$

et

$$S^{n+\frac{1}{2}}_{\mathbf{q},3} = \mathcal{B}\left(\delta t, Q^n\right) S^{n-\frac{1}{2}}_{\mathbf{q},3},$$

où I est la matrice identité et

$$Q^n = n_{\mathbf{q}} \left[G^*_{\mathbf{q}}, \rho^n\right] + G^*_{\mathbf{q}}\rho^n + A(\rho^n, G^*_{\mathbf{q}}).$$

Méthode de Lie. Une approximation d'ordre 1 de la variable $S(t)$ permet à la solution approchée (4.13) d'être d'ordre 2. C'est pour cela, nous décidons d'approcher les densités assistées par les phonons avec la méthode de Lie.

$$S^{n+\frac{1}{2}}_{\mathbf{q}} = \mathcal{C}\left(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\right) \mathcal{A}\left(\delta t, T^n\right) \mathcal{B}\left(\delta t, Q^n\right) S^{n-\frac{1}{2}}_{\mathbf{q}}. \tag{4.17}$$

Théorème 9. *La solution numérique* (4.17) *est une approximation d'ordre 1 en temps du modèle* (4.4).

Démonstration. Nous devons montrer que

$$\left\| S_{\mathbf{q}}(t+\frac{\delta t}{2}) - \mathcal{C}\Big(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T(t)\Big)\mathcal{B}\Big(\delta t, Q(t)\Big) S_{\mathbf{q}}(t-\frac{\delta t}{2})\right\| = O(\delta t^3).$$

Posons $s = t - \frac{\delta t}{2}$, cela revient à montrer que

$$\left\| S_{\mathbf{q}}(s+\delta t) - \mathcal{C}\Big(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T(s+\frac{\delta t}{2})\Big)\mathcal{B}\Big(\delta t, Q(s+\frac{\delta t}{2})\Big) S_{\mathbf{q}}(s)\right\| = O(\delta t^3).$$

Nous avons

$$\mathcal{B}\Big(\delta t, Q(s+\frac{\delta t}{2})\Big) S_{\mathbf{q}}(s) = S_{\mathbf{q}}(s) - \mathrm{i}\delta t Q(s) + O(\delta t^2).$$

En utilisant le lemme 6, nous pouvons écrire

$$\mathcal{A}\Big(\delta t, T(s+\frac{\delta t}{2})\Big)\mathcal{B}\Big(\delta t, Q(s+\frac{\delta t}{2})\Big) S_{\mathbf{q}}(s) = S_{\mathbf{q}}(s) - \mathrm{i}\delta t\big[T(s), S_{\mathbf{q}}(s)\big] - \mathrm{i}\delta t Q(s) + O(\delta t^2).$$

Le développement limité d'ordre 1 du dernier opérateur donne :

$$\begin{aligned}
&\mathcal{C}\Big(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T(s+\frac{\delta t}{2})\Big)\mathcal{B}\Big(\delta t, Q(s+\frac{\delta t}{2})\Big) S_{\mathbf{q}}(s)\\
&= S_{\mathbf{q}}(s) - \mathrm{i}\delta t\big[E_0, S_{\mathbf{q}}(s)\big] - \mathrm{i}\delta t\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} S_{\mathbf{q}}(s) - \mathrm{i}\delta t\big[T(s), S_{\mathbf{q}}(s)\big] - \mathrm{i}\delta t Q(s) + O(\delta t^2).
\end{aligned}$$

Sachant que

$$\partial_s S_{\mathbf{q}}(s) = -\mathrm{i}\big[E_0, S_{\mathbf{q}}(s)\big] - \mathrm{i}\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} S_{\mathbf{q}}(s) - \mathrm{i}\big[T(s), S_{\mathbf{q}}(s)\big] - \mathrm{i}Q(s),$$

alors

$$\mathcal{C}\Big(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T(s+\frac{\delta t}{2})\Big)\mathcal{B}\Big(\delta t, Q(s+\frac{\delta t}{2})\Big) S_{\mathbf{q}}(s) = S_{\mathbf{q}}(s) + \delta t\partial_s S_{\mathbf{q}}(s) + O(\delta t^2).$$

□

4.3.4 Solutions numériques des modèles de Bloch

Initialisation. Au temps initial $t_0 = 0$, nous supposons que la matrice densité $\rho(0) = \rho_0$ est connue et qu'elle est non-nulle mais par contre la densité assistée par les phonons initiale $S_{\mathbf{q}}(0)$ est nulle. Nous déterminons sa valeur au temps $\frac{\delta t}{2}$ avec le schéma d'Euler.

$$S_{\mathbf{q}}^{\frac{1}{2}} = -2\mathrm{i}\delta t\Big(n_{\mathbf{q}}\left[G_{\mathbf{q}}^*, \rho^0\right] + G_{\mathbf{q}}^*\rho^0 + A(\rho^0, G_{\mathbf{q}}^*)\Big) = -2\mathrm{i}\delta t Q^0.$$

Modèle de Bloch avec l'interaction de Coulomb. Ce modèle ne fait intervenir que l'hamiltonien libre, l'hamiltonien de l'interaction laser–boîte et l'hamiltonien de Coulomb. Le modèle continu sans dimension est donné par

$$\mathrm{i}\partial_t\rho(t) = \big[V(t, \rho(t)), \rho(t)\big],$$

et le modèle numérique obtenu avec la méthode de splitting donne

$$\left\{\begin{array}{rcl} \rho^{n+1} & = & \mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, E_0\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T^{n+\frac{1}{2}}\Big)\mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, E_0\Big)\rho^n, \\ \rho^0 & = & \rho(0). \end{array}\right. \tag{4.18}$$

Théorème 10.
(i) La méthode de splitting est stable et l'ordre de consistance est 2.
(ii) Pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\mathrm{Tr}(\rho^n) = \mathrm{Tr}(\rho^0)$.
(iii) Pour tout $n \in \mathbb{N}$, la densité ρ^n est hermitienne si ρ^0 est hermitienne.
(iv) Pour tout n, ρ^n est positive si ρ^0 l'est.

Démonstration. (i) L'ordre de consistance est l'ordre de la méthode de Strang donnée par la propriété 8. La stabilité est obtenue en utilisant la seconde propriété du lemme 5 (préservation de la norme).
(ii) La trace de la solution numérique au pas n est

$$\mathrm{Tr}(\rho^n) = \mathrm{Tr}\Big(\mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, E_0\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T^{n+\frac{1}{2}}\Big)\mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, E_0\Big)\rho^{n-1}\Big).$$

On montre facilement que pour toutes matrices P et M et pour tout t

$$\mathrm{Tr}(\mathcal{A}(t,P)M) = \mathrm{Tr}(M),$$

alors

$$\mathrm{Tr}(\rho^n) = \mathrm{Tr}(\rho^{n-1}) = \cdots = \mathrm{Tr}(\rho^0).$$

(iii) Si ρ^{n-1} est hermitienne, calculons l'adjoint de la solution ρ^n :

$$(\rho^n)^* = \Big(\mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, E_0\Big)\mathcal{A}\Big(\delta t, T^{n+\frac{1}{2}}\Big)\mathcal{A}\Big(\frac{\delta t}{2}, E_0\Big)\rho^{n-1}\Big)^*.$$

On montre cette fois aussi que

$$\Big(\mathcal{A}(t,P)M\Big)^* = \mathcal{A}(t,P)M^*,$$

on obtient dans ce cas $(\rho^n)^* = \rho^n$ dans les cas où ρ^{n-1} est hermitienne. On peut montrer par récurrence que ρ^{n-1} est hermitienne si ρ^0 l'est.
(iv) Soit $X \in \mathbb{C}^{N_\mathrm{c}+N_\mathrm{v}}$, ρ^n est positive si $X^*\rho^n X \geq 0$.
On voit que

$$X^*\mathcal{A}(t,P)MX = X^*\exp\big(-\mathrm{i}Pt\big)M\exp\big(\mathrm{i}Pt\big)X = Y^*MY \geq 0,$$

si M est positif. Dans ce cas $X^*\rho^n X \geq 0$ si ρ^{n-1} est positive. □

Remarque 4. *La propriété de positivité n'est pas évidente pour le modèle continu car dans la démonstration il fallait procéder à plusieurs séparations du modèle continu. Le modèle numérique obtenu conserve la positivité car il est explicite et utilise les valeurs déja connues des variables dans les opérateurs non-linéaires.*

Modèle de Bloch avec l'interaction électron–phonon. Le modèle continu dépend de l'hamiltonien libre, de l'hamiltonien d'interaction laser–boîte et de l'hamiltonien d'interaction électron–phonon. Le modèle numérique obtenu avec la méthode de splitting donne

$$\left\{\begin{array}{rcl} \rho^{n+1} & = & \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, \mathbf{E}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{R})\cdot\mathbf{M})\mathcal{B}(\delta t, S^{n+\frac{1}{2}})\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, \mathbf{E}^{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{R})\cdot\mathbf{M})\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho^n, \\ S^{n+\frac{1}{2}} & = & \sum_{\mathbf{q}}\left(\left[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}^{n+\frac{1}{2}}\right] - \left[G_{\mathbf{q}}, S_{\mathbf{q}}^{n+\frac{1}{2}}\right]^*\right), \\ S_{\mathbf{q}}^{n+\frac{3}{2}} & = & \mathcal{C}\big(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\big)\mathcal{A}(\delta t, \mathbf{E}^{n+1}(\mathbf{R})\cdot\mathbf{M})\mathcal{B}\big(\delta t, Q^{n+1}\big)S_{\mathbf{q}}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \rho^0 & = & \rho(0), \\ S_{\mathbf{q}}^{\frac{1}{2}} & = & -2\mathrm{i}\delta t Q^0. \end{array}\right. \tag{4.19}$$

Théorème 11.
(i) Pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\mathrm{Tr}(\rho^n) = \mathrm{Tr}(\rho^{n-1})$.
(ii) La densité ρ^n est hermitienne si ρ^0 est hermitienne pour tout $n \in \mathbb{N}$.

La démonstration de ce théorème est semblable à celle du théorème 10.

4.4 Modèle Maxwell–Bloch discrétisé

D'un point de vue numérique, nous avons deux types de couplage possibles entre les boîtes quantiques et l'onde électromagnétique : le couplage fort et le couplage faible.

- le couplage est fort lorsque les variables ($\mathbf{E}$, ρ) sont localisées aux même points en espace et en temps,
- le couplage est faible lorsque les éléments ($\mathbf{E}$, ρ) ne sont pas calculés aux même points de discrétisation.

Le modèle de type Bloch étudié dans [Zio97a] concerne les atomes à deux niveaux. Il est couplé fortement avec les équations de Maxwell. Dans nos notations, ce modèle numérique est donné par

$$B_{y,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = B_{y,j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{\delta z}\big(E_{x,j+1}^{n} - E_{x,j}^{n}\big), \tag{4.20a}$$

$$E_{x,j}^{n+1} = E_{x,j}^{n} - \frac{\delta t}{\delta z}\big(B_{y,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{y,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\big) + C\mathrm{Tr}\Big(M_x\big[E_0 + M_x\frac{E_{x,j}^{n+1}+E_{x,j}^{n}}{2}, \frac{\rho_j^{n+1}+\rho_j^{n}}{2}\big]\Big), \tag{4.20b}$$

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n} + P_1\big(\frac{\rho_j^{n+1}+\rho_j^{n}}{2}\big) + P_2\frac{E_{x,j}^{n+1}+E_{x,j}^{n}}{2}, \tag{4.20c}$$

où C est une constante, P_1 et P_2 sont les matrices. Elles dépendent des paramètres numériques et physiques de l'onde électromagnétique et du gaz d'atomes.
La résolution du modèle numérique (4.20) se fait avec un algorithme de point fixe, pour résoudre E_x^{n+1} et ρ^{n+1}.

Dans notre cas, nous utilisons un couplage faible (voir [Bid03, AC09]) et les points de calcul des variables du modèle couplé de Maxwell–Bloch sont localisés sur la figure 4.2.

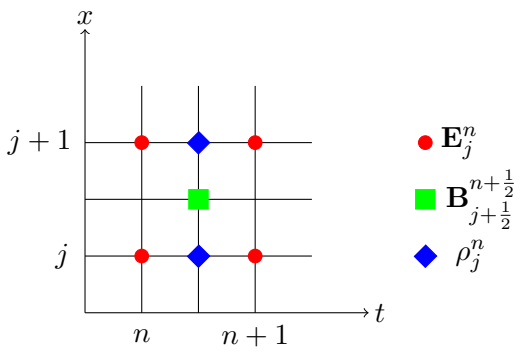


FIGURE 4.2 – Points de discrétisation des variables. Le champ électrique $\mathbf{E}$ en rouge, le champ magnétique $\mathbf{B}$ en vert et la densité ρ en bleu.

Les calculs réalisés dans cette thèse sont en dimension 1 et concernent seulement la polarisation P_x qui couple les variables B_y et E_x.

4.4.1 Couplage Maxwell–Bloch faible avec l'interaction de Coulomb

Le modèle de Bloch numérique avec l'interaction de Coulomb est celui donné par le système (4.18). Son couplage avec les équations de Maxwell se fait via la variable $\mathbf{J}$.

Pour tout j, on considère les composantes des champs électrique et magnétique initiaux :

$$E^0_{x,j} \quad \text{et} \quad B^{\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} = -\frac{\delta t}{\delta z}\big(E^0_{x,j+1} - E^0_{x,j}\big).$$

On calcule la densité au premier demi-pas de temps et nous obtenons

$$\rho_j^{\frac{1}{2}} = \mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, E_0\big)\mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, T_j^0\big)\rho_j^0,$$

avec $T_j^0 = E^0_{x,j} M_x + V^{\mathrm{C}}(\rho_j^0)$.
La densité ρ_j^0 est nulle dans les cas où $j\delta z$ ne correspond pas à l'abscisse d'une boîte quantique. La résolution du problème dans les cas où j correspond à la position discrète d'une boîte se fait en plusieurs étapes pour tout $n \in \mathbb{N}$:

- calcul du champ magnétique $B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j}$ avec l'équation de Faraday,
- calcul de la variable $J^{n+\frac{1}{2}}_{x,j}$,
- calcul du champ électrique $E^{n+1}_{x,j}$ avec l'équation d'Ampère,
- calcul de la densité $\rho_j^{n+\frac{3}{2}}$ avec le modèle de Bloch.

Si l'entier j ne correspond pas à la position d'une boîte quantique, il nous revient à résoudre le problème en deux étapes :

- résolution de l'équation de Faraday,
- calcul du champ électrique $E^{n+1}_{x,j}$ avec l'équation d'Ampère,

Dans les cas où les entiers j sont les positions des boîtes quantiques, les équations par ordre de calcul sont données par

$$B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} = B^{n-\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{\delta z}\big(E^n_{x,j+1} - E^n_{x,j}\big) \tag{4.21a}$$

$$J^{n+\frac{1}{2}}_{x,j} = N_b \mathrm{Tr}\Bigg(M_x\Bigg[V((n+\frac{1}{2})\delta t, \rho_j^{n+\frac{1}{2}}), \rho_j^{n+\frac{1}{2}}\Bigg]\Bigg), \tag{4.21b}$$

$$E^{n+1}_{x,j} \;=\; E^n_{x,j} - \frac{\delta t}{\delta z}\big(B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} - B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j-\frac{1}{2}}\big) - \frac{\mu v^2 \delta t}{E_{\max}} J^{n+\frac{1}{2}}_{x,j}, \tag{4.21c}$$

et

$$\begin{cases} E^{n+\frac{1}{2}}_{x,j} &= \frac{1}{2}\big(E^{n+1}_{x,j} + E^n_{x,j}\big), \\ T_j^{n+\frac{1}{2}} &= E^{n+\frac{1}{2}}_{x,j} M_x + V^{\mathrm{C}}(\rho_j^{n+\frac{1}{2}}), \\ \rho_j^{n+1} &= \mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, T^{n+\frac{1}{2}}\big)\rho_j^{n+\frac{1}{2}}, \\ T_j^{n+1} &= E^{n+1}_{x,j} M_x + V^{\mathrm{C}}(\rho_j^{n+1}), \\ \rho_j^{n+\frac{3}{2}} &= \mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, E_0\big)\mathcal{A}\big(\delta t, T_j^{n+1}\big)\mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, E_0\big)\rho_j^{n+\frac{1}{2}}. \end{cases} \tag{4.21d}$$

Corrolaire 1. *Le système formé avec les équations* (4.21a)–(4.21d) *est explicite et d'ordre 2 en temps et en espace.*

4.4.2 Couplage Maxwell–Bloch faible avec l'interaction électron-phonon

Nous considérons dans cette partie le modèle de Bloch (4.19) et les équations de Maxwell en 1D données dans la section 4.2.

Pour tout j, considérons les données initiales

$$E^0_{x,j}, \quad S^0_{\mathbf{q},j} = 0, \quad B^{\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} = -\frac{\delta t}{\delta z}\big(E^0_{x,j+1} - E^0_{x,j}\big) \quad \text{et} \quad \rho^{\frac{1}{2}}_j = \mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, E_0\big)\mathcal{A}\big(\frac{\delta t}{2}, T^0_j\big)\rho^0_j.$$

Si les boîtes se trouvent dans les positions j, les variables du problème sont calculées selon l'ordre des équations suivantes :

$$B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} = B^{n-\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{\delta z}\big(E^n_{x,j+1} - E^n_{x,j}\big), \tag{4.22a}$$

$$J^{n+\frac{1}{2}}_{x,j} = N_b \mathrm{Tr}\Big(M_x\Big[V((n+\frac{1}{2})\delta t, \rho^{n+\frac{1}{2}}_j), \rho^{n+\frac{1}{2}}_j\Big]\Big), \tag{4.22b}$$

$$E^{n+1}_{x,j} \quad = \quad E^n_{x,j} - \frac{\delta t}{\delta z}\big(B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j+\frac{1}{2}} - B^{n+\frac{1}{2}}_{y,j-\frac{1}{2}}\big) - \frac{\mu v^2 \delta t}{E_{\max}} J^{n+\frac{1}{2}}_{x,j}, \tag{4.22c}$$

et

$$\begin{cases} E^{n+\frac{1}{2}}_{x,j} & = & \frac{1}{2}\big(E^{n+1}_{x,j} + E^n_{x,j}\big), \\ Q^{n+\frac{1}{2}}_j & = & n_{\mathbf{q}}\big[G^*_{\mathbf{q}}, \rho^{n+\frac{1}{2}}_j\big] + G^*_{\mathbf{q}}\rho^{n+\frac{1}{2}}_j + A(\rho^{n+\frac{1}{2}}_j, G^*_{\mathbf{q}}) \\ S^{n+1}_{\mathbf{q},j} & = & \mathcal{C}\big(\delta t, E_0, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_c} I\big)\mathcal{A}(\delta t, E^{n+\frac{1}{2}}_{x,j} M_x)\mathcal{B}\big(\delta t, Q^{n+\frac{1}{2}}_j\big) S^n_{\mathbf{q},j}, \\ S^{n+1}_j & = & \sum_{\mathbf{q}}\big(\big[G_{\mathbf{q}}, S^{n+1}_{\mathbf{q},j}\big] - \big[G_{\mathbf{q}}, S^{n+1}_{\mathbf{q},j}\big]^*\big), \\ \rho^{n+\frac{3}{2}}_j & = & \mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E^{n+1}_{x,j} M_x)\mathcal{B}(\delta t, S^{n+1}_j)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E^{n+1}_{x,j} M_x)\mathcal{A}(\frac{\delta t}{2}, E_0)\rho^{n+\frac{1}{2}}_j. \end{cases} \tag{4.22d}$$

Corrolaire 2. *Le système formé avec les équations* (4.22a)–(4.22d) *est explicite et d'ordre 2 en temps et en espace.*

4.4.3 Condition aux bords

Équation d'Ampère. La condition aux bords que nous introduisons dans les calculs est la condition d'onde incidente qui est étudiée dans [Rei00]. Les calculs sur les bords du domaine sont effectués grâce à une équation des ondes dont la variable dépend du champ électrique E_x. Notons u la solution de l'équation des ondes et la version sans dimension de cette équation est donnée par

$$\partial_t^2 u = \partial_z^2 u.$$

Cette équation se décompose en un système de deux équations de transport correspondant aux évolutions des ondes entrantes et sortantes. Nous nous intéressons particulièrement aux ondes entrantes dont l'équation est donnée par

$$\partial_t u = \partial_z u. \tag{4.23}$$

Discrétisons les dérivées premières partielles de l'équation (4.23). La discrétisation de la dérivée partielle temporelle s'effectue sur la moyenne de la variable u entre les deux premiers points de la discrétisation spatiale. Cette moyenne est donnée par

$$\frac{1}{2}(u_1 + u_0).$$

Pour $t = n\delta t$, la discrétisation de la dérivée temporelle donne

$$\partial_t u = \frac{1}{2}\big(\frac{u_1^{n+1} - u_1^n}{\delta t} + \frac{u_0^{n+1} - u_0^n}{\delta t}\big).$$

La discrétisation de la dérivée spatiale se fait sur la moyenne de la variable u entre les instants t et $t + \delta t$. Elle nous donne

$$\partial_z u = \frac{1}{2}\big(\frac{u_1^{n+1} - u_0^{n+1}}{\delta z} + \frac{u_1^n - u_0^n}{\delta z}\big).$$

L'équation (4.23) discrétisée nous donne

$$u_0^{n+1} = u_1^n + \frac{1 - \delta t/\delta z}{1 + \delta t/\delta z}\big(u_0^n - u_1^{n+1}\big).$$

La condition d'onde incidente impose que

$$u_1^n = E_{x,1}^n - E_{inc} \quad \text{et} \quad u_0^n = E_{x,0}^n.$$

Alors nous obtenons

$$E_{x,0}^{n+1} = E_{x,1}^n - E_{inc} + \frac{1 - \delta t/\delta z}{1 + \delta t/\delta z}\big(E_{x,0}^n - E_{x,1}^{n+1} - E_{inc}\big).$$

4.5 Tests numériques

Les simulations numériques sont des outils indispensables pour la validation des modèles continus et discrets car elles constituent réellement la mise en œuvre et l'adaptation aux moyens numériques des modèles mathématiques. Les tests numériques sont utilisés en général pour comprendre le fonctionnement et les propriétés des systèmes physiques, biologiques, etc. En ce qui concerne les boîtes quantiques, nous avons rencontré des difficultés dans le choix des tests numériques à cause

- du manque d'information sur les paramètres physiques,
- du manque des résultats de référence pour les comparaisons.

Les cas tests réalisés dans cette thèse utilisent les valeurs des paramètres physiques conformément aux tailles et aux caractéristiques des boîtes quantiques. Nous comparons les résultats obtenus avec les résultats de certaines théories (modèles) données dans les articles. Les différents cas tests réalisés dans cette thèse sont

- la transparence auto-induite,
- le transfert de cohérence,
- la pertinence des termes de Coulomb,
- l'impact des phonons dans les boîtes quantiques.

Ces tests numériques sont réalisés avec les modèles numériques de Maxwell–Bloch donnés dans les sections 4.4.1 et 4.4.2. Les modèles de Bloch sont couplés faiblement avec les équations de Maxwell. Les tests numériques réalisés dans cette thèse nous servent d'outils de vérification des propriétés qualitatives et de validation des modèles continus et numériques.

4.5.1 Transparence auto-induite

La transparence auto-induite est un phénomène découvert théoriquement avec les modèles de l'optique non linéaire et a été confirmé par les réalisations expérimentales sur certains systèmes ([AE87, MH67, GS70]) tels que la propagation d'ondes dans les fibres optiques. Elle peut être réalisée avec les modèles très simples tels que l'équation de Schrödinger, l'équation de Vlasov et même avec des modèles couplés (Maxwell–Bloch [Bid06]). Pour montrer l'importance des effets cinétiques dans le problème couplé laser–plasma lors d'un régime relativiste, la transparence auto-induite a été mise en œuvre et on l'appelle allumateur rapide dans ce contexte (voir [BGB$^+$99]). La transparence auto-induite est le cas test utilisé par R. Ziolkowski, J. M. Arnold et D. M. Gogny [ZAG95] pour tester leur premier code Maxwell–Bloch, pour des atomes à deux niveaux d'énergie. Dans notre contexte, ce cas test va nous permettre de valider les propriétés qualitatives et quantitatives des modèles continus et discrets que nous avons dérivés.

Principe. Cela consiste à éclairer le matériau avec une onde incidente spécifique bien calibrée. L'onde incidente procure au matériau de l'énergie qui lui est restituée intégralement

et l'onde ressort inchangée du matériau. Nous pouvons illustrer le mécanisme de passage d'énergie avec la figure 4.3.

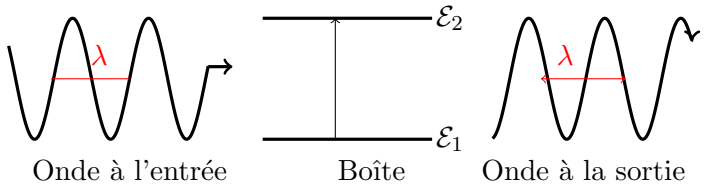


FIGURE 4.3 – L'excitation de deux niveaux $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ d'une boîte quantique. L'onde identique à l'entrée et à la sortie avec la même longueur d'onde λ.

Onde calibrée. La forme de l'enveloppe et l'amplitude de l'onde doivent être très spécifiques ([MH67, BFK14]). Son expression mathématique pour réaliser la transparence auto-induite est donnée par

$$E(z,t) = \mathcal{U}(z,t)\sin(\omega_0 t),$$

où ω_0 est la fréquence de l'onde et $\mathcal{U}(z,t)$ est l'enveloppe de l'onde, égale à

$$\mathcal{U}(z,t) = \frac{E_{\max}}{\mathrm{ch}(\frac{t-z/v}{\tau_p})},$$

où $E_{\max}$ est l'amplitude maximale de l'onde et τ_p est la longueur de la pulsation de l'onde. L'aire de l'enveloppe de l'onde sur tout $\mathbb{R}$ vaut

$$A = m\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{U}(z,t)dt = mE_{\max}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt}{\mathrm{ch}(\frac{t-z/v}{\tau_p})} = mE_{\max}\tau_p\pi,$$

avec $m = \frac{\|\mathbf{M}\|_\infty}{\hbar}$.
Pour les simulations numériques, nous n'allons pas pouvoir varier le temps t dans tout $\mathbb{R}$. Pour un intervalle de temps $20\tau_p$, les bornes de l'intégrale deviennent $-10\tau_p$ et $10\tau_p$ et on obtient

$$A_p = mE_{\max}\tau_p\int_{2\mathrm{arctg}(\exp(-10))}^{2\mathrm{arctg}(\exp(10))} ydy = mE_{\max}\tau_p(0.999942\pi).$$

Pour que l'aire de la pulsation soit égale à $k\pi$ ($k \in \mathbb{N}$) ou obtenir une k inversion, il faut que l'amplitude maximale de l'onde soit égale à

$$E_{\max} = \frac{k}{0.999942m\tau_p} = \frac{k\hbar}{0.999942\|\mathbf{M}\|_\infty\tau_p}.$$

Finalement, l'onde calibrée qui permet de réaliser la transparence auto-induite est

$$E(z,t) = \frac{k\hbar}{0.999942\|\mathbf{M}\|_\infty\tau_p}\frac{\sin(\omega_0 t)}{\mathrm{ch}(\frac{t-z/v}{\tau_p})}.$$

L'évolution temporelle de l'onde calibrée donnée par la figure 4.4 correspond à ses valeurs aux positions données dans le tableau 4.1.

Point	z_1	z_2	z_3	z_4
Position(nm)	225	15750	31500	47250

TABLE 4.1 – Tableau des points de calcul de l'onde calibrée.

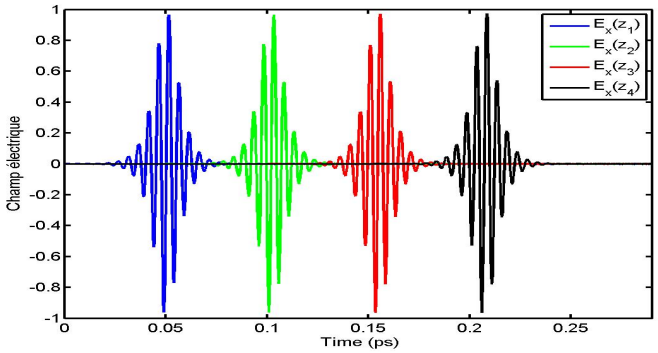


FIGURE 4.4 – L'évolution du champ calibré en espace et en temps. Les courbes bleue, verte, rouge, noire correspondent respectivement aux évolutions temporelles de $E(z_1, t)$, $E(z_2, t)$, $E(z_3, t)$ et $E(z_4, t)$.

Paramètres physiques et numériques. Le cas test de la transparence auto-induite est mis en œuvre avec les valeurs des paramètres des boîtes quantiques conçues à partir des molécules d'arsénuire de gallium GaAs et d'arsénuire d'indium InAs. Ces types de boîtes sont notés $\mathrm{Ga}_\alpha\mathrm{In}_{1-\alpha}\mathrm{As}$ avec $\alpha \in [0, 1]$. Les paramètres physiques pour ces types de boîtes donnés dans [LRS96] sont rappelés dans le tableau 4.2 en fonction de la valeur du paramètre α.

Paramètre physique	Symbole	Unité	Valeur
Constante diélectrique statique	ϵ_s	Sans unité	15.1-2.87α + 0.67 α^2
Constante diélectrique haute fréquence	ϵ_∞	Sans unité	12.3-1.4α
Énergie de gap	E_g	eV	0.36 + 0.63 α + 0.43 α^2
Densité d'atome	N_a	m^{-3}	(3.59-0.83 α) 10^{28}

TABLE 4.2 – Paramètres physiques des boîtes $\mathrm{Ga}_\alpha\mathrm{In}_{1-\alpha}\mathrm{As}$ donnés dans [LRS96].

Pour que l'onde puisse franchir le gap de la boîte, il faut que l'énergie de Planck de l'onde $\hbar\omega_0$ soit supérieure ou égale à E_g. Dans ce cas, la longueur d'onde associée à l'onde de fréquence propre ω_0 susceptible de produire la résonance (excitation totale) entre les niveaux séparés par le gap est donnée par

$$\lambda = \frac{2\pi v}{\omega_0} \geq \frac{2\pi v\hbar}{E_g} = \frac{2\pi c\hbar}{E_g\sqrt{\epsilon_r(\omega_g)\mu_r(\omega_g)}},$$

où ω_g est la fréquence associée à l'énergie de gap E_g, $\epsilon_r(\omega_g)$ et $\mu_r(\omega_g)$ sont respectivement

la permittivité relative et la perméabilité relative.
Nous déterminons la permittivité relative avec le modèle de Debye. Son expression est donnée pour toute fréquence ω par

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \mathrm{i}\omega t_r},$$

oú t_r est le temps de relaxation.
Nous prenons le temps de relaxation d'un électron piègé à l'intérieur d'une boîte quantique quelconque donnée dans [Gau11] ($t_r = 300\mu s$). Dans ce cas nous obtenons une permittivité relative qui est quasiment égale à la constante de permittivité à haute fréquence de la boîte pour un champ de fréquence $\omega_g = \frac{E_g}{\hbar}$:

$$\epsilon_r(\omega_g) = \epsilon_\infty. \tag{4.24}$$

On suppose que les boîtes quantiques n'ont pas d'effet magnétique, ce qui donne une perméabilité relative qui est égale à 1 ($\mu_r(\omega_g) = 1$).
Les valeurs des longueurs d'onde utilisées dans nos codes sont de l'ordre de $4.56\ 10^{-7}$:

$$\lambda \approx 4.56\ 10^{-7}\ \mathrm{m}. \tag{4.25}$$

La discrétisation du domaine de calcul se fait en fonction de cette longueur d'onde λ. Nous choisissons 20 points de calcul par longueur d'onde, ainsi le pas de calcul suivant la direction de propagation est

$$\delta z = \frac{\lambda}{20} \approx 2.28\ 10^{-8}\ \mathrm{m}.$$

Avec une constante de stabilité $\mathtt{CFL} = 0.95$, on obtient

$$\delta t = 0.95\frac{\delta z}{c} = \frac{0.95\lambda}{20c} \approx 0.2\ \mathrm{fs}.$$

Sur une distance de propagation $L = 10^{-4}$ m, le nombre total de points de calcul est

$$\mathtt{Dis} = \frac{L}{\delta z} = 1333.$$

Pour ne pas dériver les conditions aux bords spécifiques au modèle couplé de Maxwell–Bloch, on place les boîtes à une certaine distance du bord du domaine de calcul. Les boîtes quantiques sont disposées entre les points `begdot` et `enddot` avec

$$\mathtt{begdot} = 0.1\mathtt{Dis} \quad \text{et} \quad \mathtt{enddot} = 0.9\mathtt{Dis}.$$

La figure 4.5 nous donne la disposition des points de calcul correspondant au matériau quantique suivant la direction de propagation de l'onde électromagnétique. Les boîtes quantiques sont représentées par les points rouges du dessin. Les valeurs numériques des positions des boîtes peuvent être déterminées avec le tableau 4.3. Les boîtes sont alignées entre les points `begdot` et `enddot`.

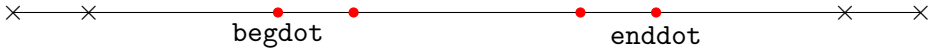


FIGURE 4.5 – Points de discrétisation en espace. Les croix noires correspondent aux points de calcul du matériau sans boîtes et les points rouges correspondent à la zone occupée par les boîtes.

Dis	begdot	enddot
1333	133	1199

TABLE 4.3 – Valeurs des paramètres numériques. La variable `Dis` est le nombre total de points de calcul et les variables `begdot` et `enddot` sont les points respectivement initial et final de localisation des boîtes.

Transparence auto-induite d'un modèle à deux niveaux d'énergies

En principe, la transparence auto-induite met en jeu deux niveaux d'énergie et elle est généralement réalisée avec des systèmes à deux niveaux.

Notre premier cas test consiste à reproduire le phénomène sur les systèmes de boîtes quantiques à deux niveaux et ensuite tester les systèmes à trois niveaux en recherchant une configuration des niveaux qui permet d'obtenir une inversion totale du niveau d'énergie ciblé.

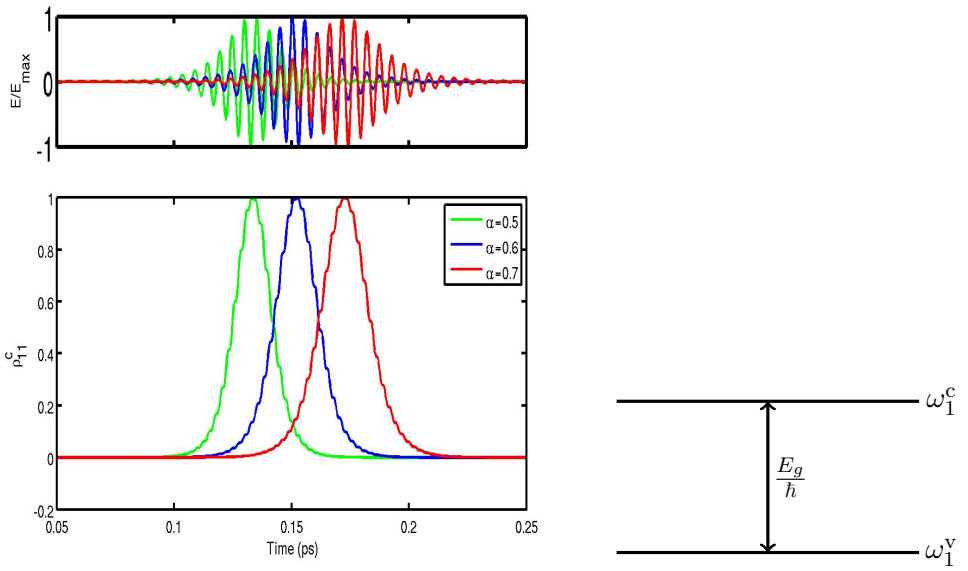
Tout d'abord, réalisons le phénomène avec un système à deux espèces d'électron et à deux niveaux d'énergie. Les deux niveaux sont séparés par l'énergie de gap E_g donnée dans le tableau 4.2. Nous avons un niveau dans la bande de conduction et le second dans la bande de valence comme le montre le dessin à droite de la figure 4.6. La densité initiale est donnée par

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{\mathrm{c}} & \rho_{11}^{\mathrm{cv}} \\ \rho_{11}^{\mathrm{vc}} & \rho_{11}^{\mathrm{v}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dans ce cas test, on ne considère que l'hamiltonien libre des électrons et l'hamiltonien de l'interaction laser–boîte.

La figure 4.6 montre une double inversion totale du niveau de la bande de conduction au moment de l'apparition du champ pour trois types de boîtes quantiques ($\alpha \in \{0.5, 0.6, 0.7\}$).

Le peuplement du niveau de conduction nécessite un dépeuplement du niveau de valence.



(a) (b)

FIGURE 4.6 – (a) Transparence auto-induite dans les boîtes quantiques à deux niveaux, (b) schéma du système à deux niveaux.

On remarque à travers la figure 4.6 que l'excitation de la population ρ_{11}^{c} ne se fait pas aux mêmes moments dans les trois boîtes quantiques car l'inversion de la population dépend de l'énergie de gap du système qui sépare les deux niveaux.

Transparence auto-induite d'un modèle à trois niveaux d'énergies

Passons au cas d'un système à trois niveaux où nous avons deux niveaux dans la bande de valence et un seul dans la bande de conduction. Nous considérons que l'écart entre le niveau de conduction et le second niveau de la bande de valence est égale à E_g. La densité initiale du système est

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{c} & \rho_{11}^{cv} & \rho_{12}^{cv} \\ \rho_{11}^{vc} & \rho_{11}^{v} & \rho_{12}^{v} \\ \rho_{21}^{vc} & \rho_{21}^{v} & \rho_{22}^{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nous envisageons deux configurations pour l'écart entre les deux niveaux de valence :

- Première configuration : $\hbar(\omega_2^{v} - \omega_1^{v}) = E_g$,
- Seconde configuration : $\hbar(\omega_2^{v} - \omega_1^{v}) = 2E_g$.

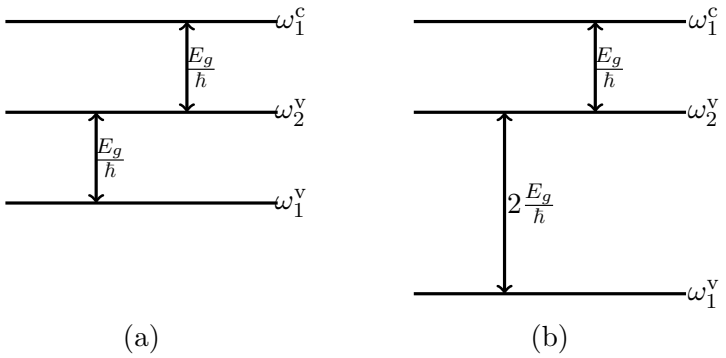


FIGURE 4.7 – (a) Première configuration du système à trois niveaux. (b) Seconde configuration du système à trois niveaux.

Première configuration. Les écarts entre les trois niveaux sont égaux. Nous pouvons schématiser ce type de système avec schéma (a) de la figure 4.7.

Choisissons précisément la boîte quantique $Ga_{0.5}In_{0.5}As$ pour les tests de cette partie.

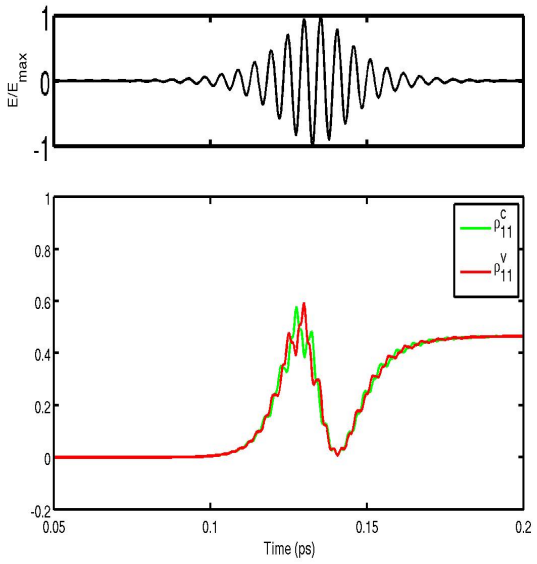


FIGURE 4.8 – Mise en œuvre de la transparence auto-induite de le cadre de la première configuration donnée par la figure 4.7.

La figure 4.8 montre qu'on n'obtient pas une double inversion totale du niveau de conduction à cause de l'excitation du premier niveau de valence. Pour éviter que le niveau de valence s'excite, nous allons augmenter son écart par rapport au second niveau. C'est ce qui nous pousse à envisager une nouvelle configuration.

Seconde configuration. L'écart entre le niveau de conduction et le second niveau de valence pour cette configuration est le double de l'énergie de gap de la boîte considérée. La configuration du système est représentée par le schéma (b) de la figure 4.7. Avec ce système, nous assistons à une inversion totale de la population de conduction ρ_{11}^{c}. La première population de valence ρ_{11}^{v} reste inchangée (voir la figure 4.9). Cela est dû au fait que la fréquence correspondant à l'écart entre les deux niveaux de valence est nettement supérieure à la fréquence de l'onde incidente. Cette configuration a permis de provoquer seulement l'excitation du niveau de conduction dont la fréquence d'écart avec le niveau initialement excité (second niveau de valence) est égale à la fréquence de l'onde incidente.

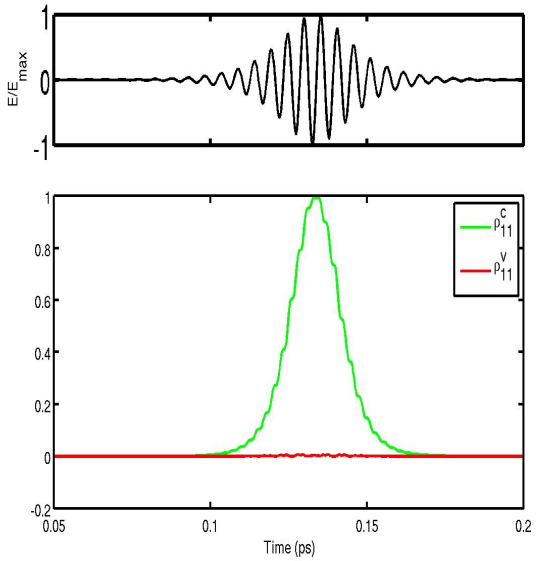


FIGURE 4.9 – Mise en œuvre de la transparence dans le cadre de la seconde configuration représentée par le schéma (b) la figure 4.7.

Contribution des termes de Coulomb. Tous les calculs précédents ont été effectués avec le modèle numérique de Maxwell–Bloch couplé faiblement donné dans la section 4.4.1 sans ajouter les termes de Coulomb.

Ajoutons au code utilisé dans les paragraphes précédents pour simuler le phénomène de transparence auto-induite la partie coulombienne en prenant compte l'hypothèse non physique suivante.

Hypothèse 4. *Pour tous entiers α_1, α_2, α_3 et α_4, les éléments du tenseur $R^{\delta}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_3}$ pour tout $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}, \mathrm{cv}\}$ sont tous égal à une constante $R_0 \in \mathbb{C}$.*

$$R^{\delta}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_3} = R_0.$$

Analysons la transparence auto-induite pour différentes valeurs du paramètre de Coulomb R_0 tout en comparant les résultats avec ceux obtenus dans le cas du modèle sans

terme de Coulomb.
La figure 4.10 nous montre qu'avec le même champ, nous avons une différence entre les variations de la population ρ_{11}^{c} en présence et en absence des termes de Coulomb. Les termes de Coulomb modifient légèrement les niveaux du système. Cela provoque une légère modification de l'énergie de gap et empêche l'excitation totale. On peut simplement dire que le système de boîtes n'est pas transparent pour ce rayonnement. Il faut un ajustement de la longueur d'onde du champ en prenant en compte les corrections énergétiques des termes de Coulomb. Le cas test est réalisé avec $R_0 = 10^{-21}$ J.

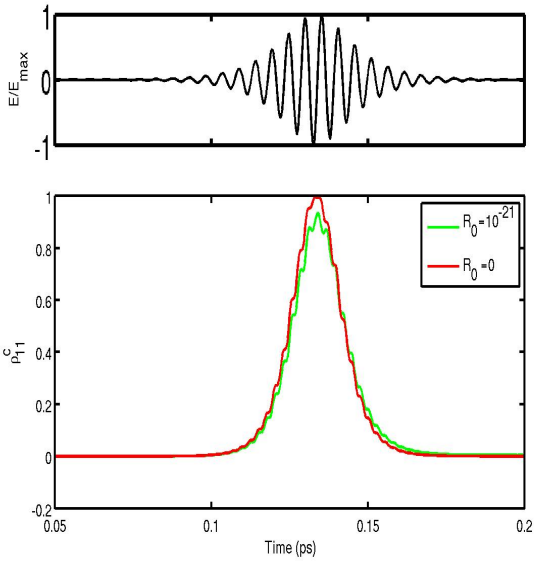


FIGURE 4.10 – Comparaison du modèle avec et sans les termes de Coulomb.

Augmentons la valeur de la constante R_0. Comme le montre la figure 4.11 une trop grande valeur de la constante détruit complètement le phénomène de transparence auto-induite. Il est détruit parce que les valeurs critiques de R_0 modifient significativement l'énergie de gap qui vaut environ $2.507\,10^{-19}$ J pour $\alpha = 0.5$ (voir tableau 4.2). Nous assistons à une excitation du premier niveau de valence et une destruction du phénomène de la transparence auto-induite. Pour éviter cela, il faut changer la structuration du modèle comme il est fait dans la section 4.5.3 en décalant les niveaux d'énergie du système.

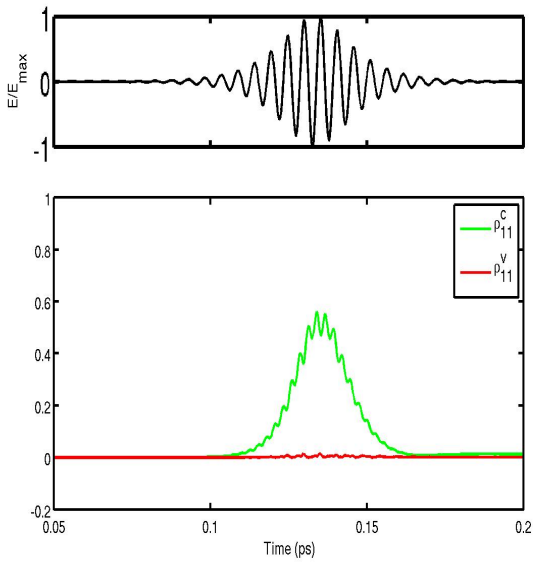


FIGURE 4.11 – Impact des valeurs critiques de la constante R_0.

Impact des densités intra-bandes. Les modèles utilisés dans [GH02, GH03] ne font pas intervenir les cohérences intra-bandes dans leur modèle. Ceci induit une simplification dans les modèles qui ne font intervenir que les populations ρ^{c}_{11}, ρ^{v}_{11}, ρ^{v}_{22} et les cohérences interbandes ρ^{cv}_{11}, ρ^{cv}_{12}, ρ^{vc}_{11} et ρ^{vc}_{21}. La question qui se pose est de savoir si cette simplification permet de réaliser sans erreur la transparence auto-induite. Le dessin associé au modèle simplifié dans notre cas (modèle à trois niveaux), est donné par la figure 4.12.

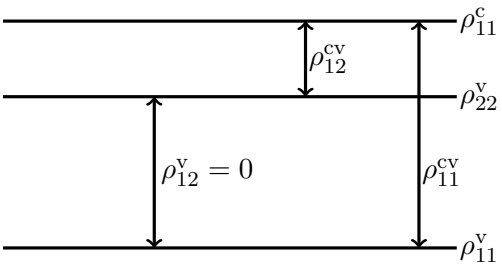


FIGURE 4.12 – Modèle à trois niveaux sans les densités intra-bandes.

Cas tests avec les paramètres des boîtes quantiques. Réalisons tout d'abord ce cas test sans prendre en compte les termes de l'interaction de Coulomb. Le modèle simplifié sans les termes de Coulomb permet de reproduire le phénomène avec une légère différence par rapport au modèle complet (voir figure 4.13).

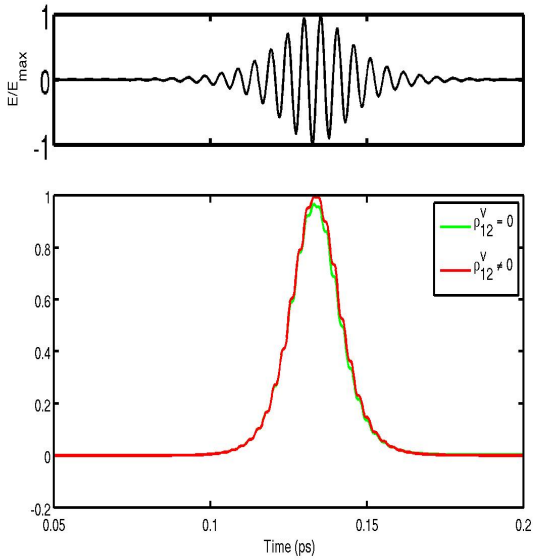
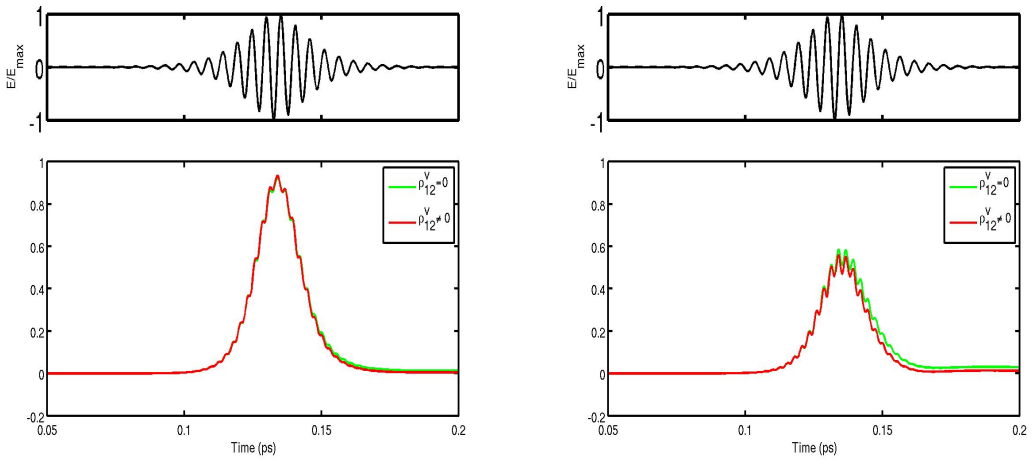


FIGURE 4.13 – Inversion de la population ρ^{c}_{11} dans le cas sans terme de Coulomb ($R_0 = 0$) : en rouge le cas $\rho^{v}_{12} \neq 0$ et en vert le cas $\rho^{v}_{12} = 0$.

Ajoutons les termes de Coulomb au modèle. Les inversions obtenues avec les termes de Coulomb ne sont pas totales comme le montre les deux figures 4.14 et cela est dû aux perturbations apportées par l'interaction de Coulomb et à la simplification du modèle. La simplification du modèle détruit sa structure algébrique qui peut rendre le modèle invalide car la destruction algébrique du modèle peut générer des valeurs physiquement inadmissibles (voir plus bas).



(a) $R_0 = 10^{-21}$ (b) $R_0 = 3\ 10^{-21}$

FIGURE 4.14 – Inversion de la population de conduction pour des modèles avec les termes de Coulomb : comparaison entre le modèle simplifié et le modèle complet.

Remarque 5. *Pour l'implémentation numérique, il suffit dans notre code standard d'annuler les cohérences intrabandes à chaque pas pour reproduire le modèle sans cohérence intrabande.*

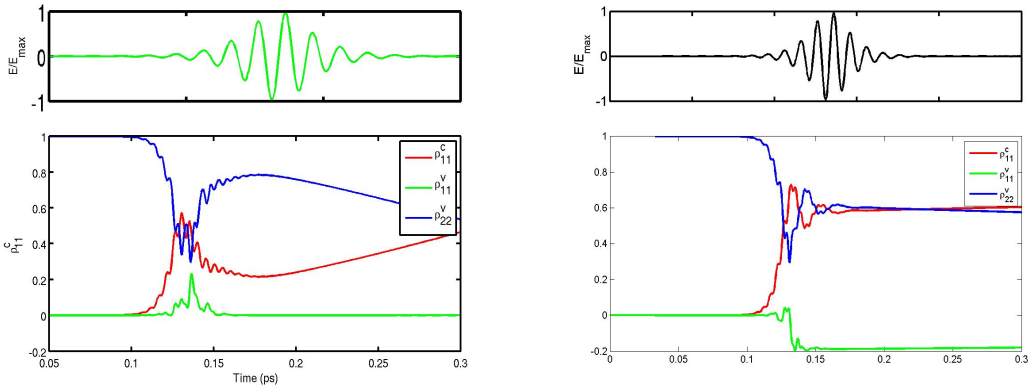
Donnons un système quantique pour lequel la simplification suggérée dans les deux articles [GH02, GH03] invalide le modèle de Bloch.

Construction d'un cas test violant les contraintes physiques. Nous avons constaté l'invalidité du modèle simplifié avec certains jeux de paramètres physiquement acceptables mais qui ne correspondent pas aux paramètres des boîtes $\mathrm{Ga}_\alpha\mathrm{In}_{1-\alpha}\mathrm{As}$. Ces paramètres sont donnés dans le tableau 4.4.

Paramètre physique	Symbole	Unité	Valeur
Constante diélectrique relative	ϵ_r	Sans unité	14
Énergie de gap	E_g	J	$6.6170\ \ 10^{-20}$
Densité volumique	N_b	m^{-3}	10^{20}
Paramètre de Coulomb	R_0	J	$3.5\ \ 10^{-21}$

TABLE 4.4 – Paramètres physiques du système quantique, invalidant les modèles utilisés dans [GH02, GH03].

Avec les paramètres donnés dans le tableau 4.4, la population de valence ρ^{v}_{11} donne les valeurs négatives (voir figure 4.15). Ces valeurs négatives ne sont pas physiquement acceptables.
Ainsi la simplification utilisée par [GH02, GH03] détruit la structure algébrique du modèle et cette destruction invalide cette simplification.



(a) (b)

FIGURE 4.15 – Invalidité du modèle simplifié. (a) Les variations des populations dans les cas du modèle avec $\rho^{\mathrm{v}}_{12} \neq 0$. (b) Les variations des populations dans les modèles sans les termes intra-bandes, la première population donne les valeurs négatives.

4.5.2 Transfert de Cohérence

Le transfert de cohérence est un phénomène qui s'intéresse explicitement aux cohérences du modèle. Il a déjà été réalisé dans le cadre de l'interaction entre un laser et un gaz d'atomes (voir [Sut97, Bid06]). Ce phénomène nous semble intéressant pour l'interaction entre les boîtes quantiques et le laser mais on ne le retrouve pas parmi les tests réalisés sur les boîtes quantiques dans la littérature. Il nécessite un modèle non simplifié et permet de justifier le développement des codes Maxwell–Bloch sur les modèles complets.
Considérons un modèle à trois niveaux d'énergie dont deux niveaux dans la bande de valence et un seul dans la bande de conduction. La configuration du modèle est celle donnée par le schéma (b) de la figure 4.7. On peuple les deux premiers niveaux des deux bandes $\rho^{\mathrm{c}}_{11} = 0.5$ et $\rho^{\mathrm{v}}_{11} = 0.5$. Puisque les deux populations ρ^{c}_{11} et ρ^{v}_{11} sont non nulles alors nous prenons la cohérence ρ^{cv}_{11} et son conjugué ρ^{vc}_{11} non nulles ($\rho^{\mathrm{cv}}_{11} = \rho^{\mathrm{vc}}_{11} = 0.25$).

Principe. Le principe du transfert de cohérence consiste à annuler les cohérences ρ^{cv}_{11} et ρ^{vc}_{11} et à rendre non nulles le deux autres cohérences ($\rho^{\mathrm{v}}_{12} \neq 0$ et $\rho^{\mathrm{v}}_{21} \neq 0$). C'est-à-dire au bout d'un temps, la matrice densité doit se transformer de la manière suivante

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho^{\mathrm{c}}_{11} & \rho^{\mathrm{cv}}_{11} & 0 \\ \rho^{\mathrm{vc}}_{11} & \rho^{\mathrm{v}}_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \rho^{\mathrm{c}}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho^{\mathrm{v}}_{11} & \rho^{\mathrm{v}}_{12} \\ 0 & \rho^{\mathrm{v}}_{21} & \rho^{\mathrm{v}}_{22} \end{pmatrix}.$$

Réalisons le phénomène pour les boîtes quantiques $\mathrm{Ga}_{0.5}\mathrm{In}_{0.5}\mathrm{As}$ dont les paramètres physiques peuvent être déterminés à partir du tableau 4.2 en prenant $\alpha = 0.5$.
Tout d'abord, considérons le modèle de Bloch simplifié en prenant en compte l'hamiltonien libre et l'hamiltonien de l'interaction laser–boîte, nous obtenons la figure 4.16.

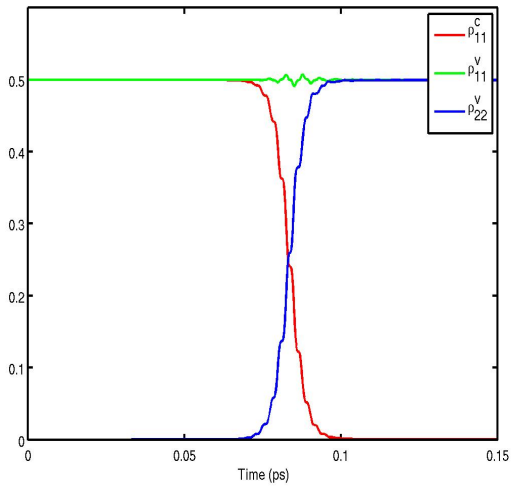


FIGURE 4.16 – Transfert de cohérence pour la boîte $\mathrm{Ga}_{0.5}\mathrm{In}_{0.5}\mathrm{As}$

On voit sur la figure 4.16 que la population ρ_{11}^{c} finit par s'annuler alors que la seconde population de valence ρ_{22}^{v} passe de 0 à 0.5. La première population de valence ρ_{11}^{v} quant à elle conserve sa valeur initiale. En utilisant les propriétés de positivité, les cohérences ρ_{11}^{cv} et ρ_{11}^{vc} sont nulles car les populations associées ρ_{11}^{c} et ρ_{11}^{v} s'annulent. Dans ce cas, nous venons de réaliser le transfert de cohérence avec le modèle sans terme de Coulomb.
Ensuite, ajoutons les termes de Coulomb. On arrive à reproduire le transfert de cohérence mais cette fois le phénomène se présente différemment (voir figure 4.17) à cause de l'impact des corrections coulombiennes.

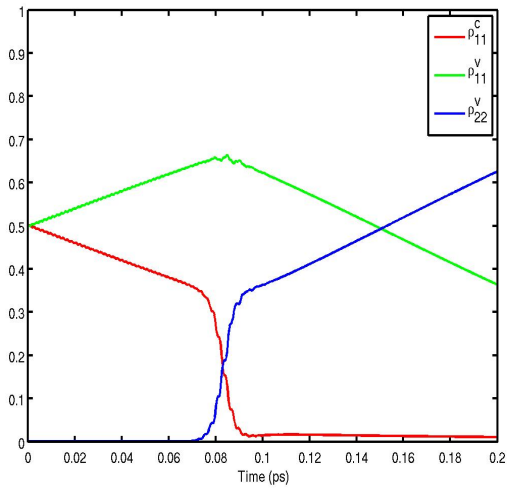


FIGURE 4.17 – Transfert de cohérence avec les termes de Coulomb.

4.5.3 Analyse numérique des termes de Coulomb

Les tests numériques réalisés plus haut montrent les failles des modèles simplifiés utilisés pour modéliser les nanostructures telles que les boîtes quantiques. L'interaction de Coulomb perturbe le système et modifie les propriétés de transparence du milieu au contact avec les radiations (champ électromagnétique).
Si nous prenons en compte les corrections coulombiennes dans le modèle, nous pouvons calculer les paramètres de l'onde électromagnétique capable de rendre le milieu transparent lors son passage. Les expressions des fréquences modifiées du système sont données pour tout j, k par

$$\Omega_j^{c} = \omega_j^{c} + \delta\omega_j^{c} \quad \text{et} \quad \Omega_k^{v} = \omega_k^{v} + \delta\omega_k^{v}.$$

Considérons le système de la seconde configuration donnée par le schéma (b) de la figure 4.7. On obtient les corrections constantes apportées par l'interaction de Coulomb en prenant les valeurs des paramètres de Coulomb $R_0 = 10^{-21}$. Les valeurs des corrections énergétiques $\delta\mathcal{E}_1^{c}$, $\delta\mathcal{E}_1^{v}$ et $\delta\mathcal{E}_2^{v}$ sont déterminées et données dans le tableau 4.5. Ces valeurs sont obtenues avec la boîte $Ga_{0.5}In_{0.5}As$. Ces corrections énergétiques permettent d'établir

la nouvelle configuration du système établie au cours du temps (voir figure 4.18).

Correction	$\delta\mathcal{E}_1^{\mathrm{c}}$	$\delta\mathcal{E}_1^{\mathrm{v}}$	$\delta\mathcal{E}_2^{\mathrm{v}}$
Énergie (J)	-10^{-21}	0	$2.\ 10^{-21}$

TABLE 4.5 – Valeur des corrections énergétiques apportées par l'interaction de Coulomb aux niveaux quantiques pour $R_0 = 10^{-21}$.

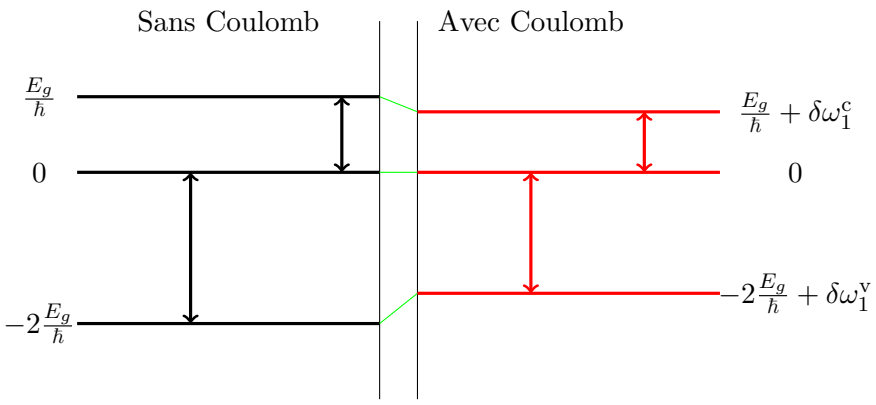


FIGURE 4.18 – Configuration du système pour les modèles sans et avec les termes de Coulomb. À gauche en noir le système sans les termes de Coulomb. À droite en rouge le système avec les termes de Coulomb.

La longueur d'onde du champ électromagnétique capable de provoquer l'inversion totale du niveau de conduction est donnée par

$$\tilde{\lambda} = \frac{2\pi v}{\tilde{\omega}_0} = \frac{2\pi v}{\omega_g + \delta\omega_{12}^{\mathrm{cv}}}.$$

On réalise le phénomène de transparence auto-induite sur les deux systèmes donnés par le schéma 4.18 et le schéma (b) de la figure 4.7. Les résultats sont donnés par la figure 4.19. Nous remarquons un petit retard dans l'excitation de la population de conduction du système corrigé par rapport au système de départ et la double inversion de la population est totale. Ce petit retard est provoqué par les termes de Coulomb

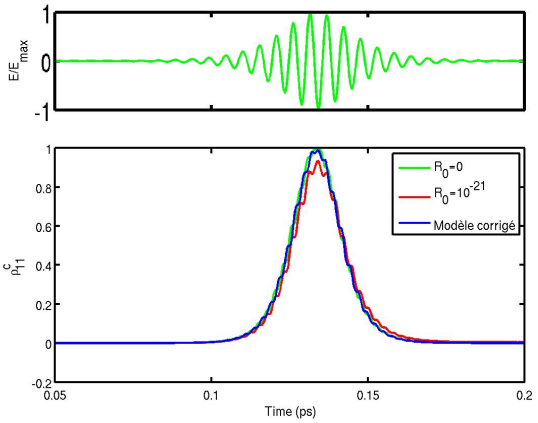


FIGURE 4.19 – Transparence auto-induite du modèle corrigé avec terme de Coulomb. L'évolution de la densité ρ_{11}^{c} du modèle quantique 4.7 dans le cas sans terme de Coulomb sont données par la courbe verte, en rouge le cas avec les termes de Coulomb. Son évolution pour le modèle à droite du schéma 4.18 est donnée par la courbe bleue.

Compte tenu de ces résultats, nous pouvons affirmer que le système représentant correctement la boîte quantique considérée ($Ga_{0.5}In_{0.5}As$) est le système corrigé 4.18. La correction apportée par les termes de Coulomb dépend de la valeur du paramètre R_0 qui à son tour dépend de la taille et de la forme de la boîte.
Bref l'interaction de Coulomb considérée très souvent comme une perturbation dans les boîtes joue un rôle non négligeable dans la détermination des caractéristiques des lasers qui sont capables d'exciter les niveaux quantiques des boîtes. En plus l'interaction de Coulomb retarde ou précipite les phénomènes au sein des boîtes quantiques.

4.5.4 L'interaction électron–phonon dans les boîtes quantiques

Les travaux de cette partie portent sur la mise en œuvre de cas tests numériques qui prennent en compte l'interaction électron-phonon dans le modèle de Bloch.
Nous réalisons les tests numériques seulement avec des phonons optiques. Dans ce cas, les paramètres énergétiques de l'interaction électron–phonon optique dépendent du coefficient de Fröhlich. Les expressions de ce coefficient sont données dans [Kit87, SKM94, SZC00]. En tenant compte de ces expressions, le carré du module du coefficient $\mathcal{E}_{\mathbf{q}}$ donné dans l'équation (2.69) devient

$$|\mathcal{E}_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{V|\mathbf{q}|^2\epsilon_0}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s}\right).$$

Réécrivons les éléments de la matrice de couplage $G_{\mathbf{q}}^{\delta}$ ($\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$) (voir les équations (2.71) et (2.72)) sous la forme suivante :

$$G_{\mathbf{q},j,k}^{\delta} = e\mathcal{E}_{\mathbf{q}}\Phi_{\mathbf{q},j,k}^{\delta},$$

avec

$$\Phi^{\delta}_{\mathbf{q},j,k} = \int_V \psi^{\delta *}_j(r) \exp(\mathrm{i}\mathbf{q}r)\psi^{\delta}_k(r)dr.$$

Remarque 6. *Dans les cas où les matrices $\Phi^{\delta}_{\boldsymbol{q}}$ sont égales à la matrice identité, nous retrouvons un modèle de Bloch dans lequel l'interaction électron–phonon est nulle (voir l'expression de S^{n+1}).*

Les tests numériques sont réalisés sur la boîte quantique $Ga_{0.5}In_{0.5}As$ dont les valeurs des paramètres physiques sont déterminées avec le tableau 4.2. Dans les tests, on prend comme volume des boîtes quantiques

$$V = 10^{-24}\ \mathrm{m}^3.$$

Choisissons un seul mode de phonon dans le réseau. La norme du vecteur d'onde du mode de phonon choisi est égale à

$$|\mathbf{q}| = \pi N_a^{1/3},$$

et l'énergie de ce mode correspond à celle donnée dans [LRS96] :

$$E_p = \hbar\omega_{\mathbf{q}} = 34\ 10^{-3}\ \mathrm{eV}.$$

Avec ces valeurs des paramètres, les éléments de la matrice $G^{\delta}_{\mathbf{q}}$ deviennent

$$G^{\delta}_{\mathbf{q},j,k} \approx 1.18\ 10^{-22}\Phi^{\delta}_{\mathbf{q},j,k}$$

Utilisons les paramètres de l'onde électromagnétique donnés par les expressions (4.24) et (4.25). Le modèle quantique choisi est celui de la configuration de la figure 4.7(b).
En tenant compte des calculs effectués dans l'annexe D, nous prenons des valeurs nulles pour les éléments diagonaux de la matrice de couplage $\Phi_{\mathbf{q},j,j}$ ($\Phi_{\mathbf{q},j,j} = 0$).
Dans ce cas la matrice de couplage se présente ainsi

$$\Phi_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a^* & 0 \end{pmatrix}.$$

Nous réalisons le phénomène de la transparence auto-induite avec différentes valeurs du paramètre de couplage non-diagonal a. Nous commençons avec les valeurs du paramètre qui sont réelles et comprises entre 0.1 et 1. Ces valeurs permettent de reproduire le phénomène sans aucun problème. Nous avons pris aussi les nombres complexes imaginaires purs comme valeur du paramètre a. Ces nombres sont sensiblement proches de la valeur donnée dans l'annexe D. Cela n'a pas affecté la réalisation du phénomène.
Les résultats des deux tests sont donnés par la même figure 4.20.

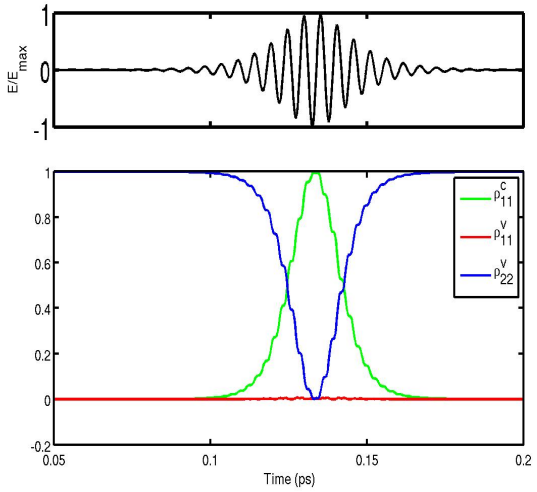


FIGURE 4.20 – Transparence auto-induite du modèle prenant en compte l'interaction électron–phonon avec $a = \mathrm{i}$.

Les modifications apportées par l'interaction électron–phonon au modèle de Bloch s'identifient difficilement (voir figure 4.20). En réalité les variations temporelles des populations données par la figure 4.20 ne sont pas identiques avec celles de la figure 4.9 (modèle sans l'interaction électron–phonon). Ces modifications ne sont pas identifiables sur la figure parce que la valeur de la norme de $\mathbf{q}$ choisie donne une énergie d'interaction $e\mathcal{E}_{\mathbf{q}} = 1.18\ 10^{-22}$ largement inférieure aux énergies propres des boîtes quantiques.

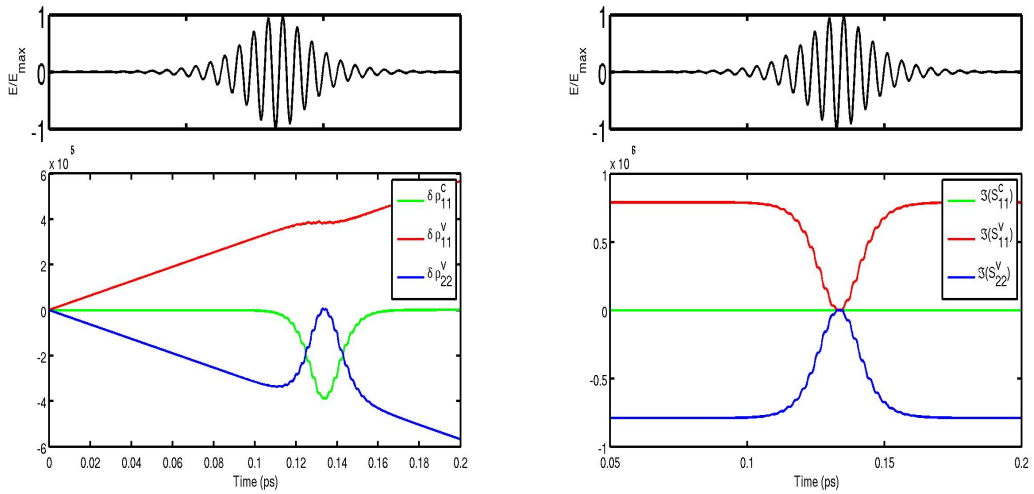
Pour mieux voir les modifications apportées par l'interaction électron-phonon, nous représentons les évolutions temporelles des éléments diagonaux de la matrice définie pour tout $n \in \mathbb{N}$ par

$$\delta\rho^{n+\frac{1}{2}} = \rho^{n+\frac{1}{2}} - \tilde{\rho}^{n+\frac{1}{2}},$$

où $\tilde{\rho}^{n+\frac{1}{2}}$ est la solution du modèle de Bloch sans les termes de l'interaction électron–phonon.

Les courbes de la figure 4.21(a) sont les évolutions temporelles des éléments diagonaux de la matrice $\delta\rho^{n+\frac{1}{2}}$. Ces courbes permettent de calculer les paramètres physiques (longueur d'onde, fréquence propre) du champ électrique susceptible d'exciter le niveau de conduction du modèle quantique.

Nous déterminons aussi les évolutions temporelles des élements diagonaux de la matrice $S(t)$ données par la figure 4.21(b). En présence du champ électrique, nous constatons que les comportements des éléments diagonaux S^{c}_{11}, S^{v}_{11} et S^{v}_{22} sont identiques à ceux des populations. En absence du champ électrique, ces éléments diagonaux restent constants au cours du temps.



(a) (b)

FIGURE 4.21 – (a) Evolutions temporelles des éléments diagonaux de la matrice $\delta\rho$ ou les modifications des populations apportées par l'interaction électron–phonon. (b) Evolutions temporelles des éléments diagonaux de la partie imaginaire de la matrice $S(t)$.

Prenons une valeur plus large du paramètre $a = 30$. La figure 4.22 nous montre que cette valeur du paramètre a détruit complètement le phénomène de la transparence auto-induite. On peut remarquer des modifications apportées par le couplage dans les évolutions temporelles des populations. Nous n'obtenons pas une double inversion totale des populations ρ^{c}_{11} et ρ^{v}_{22} et un retour à la valeur 0 de la population ρ^{v}_{11} après le passage du champ. Cette valeur du paramètre a donne des valeurs des élements diagonaux de la matrice $-\mathrm{i}\delta t S$ proches des valeurs des populations. Ce qui modifie significativement les évolutions des populations et détruisent le phénomène de transparence auto-induite. Cette valeur du paramètre a peut correspondre à une valeur totale du paramètre de couplage d'un système de 30 phonons de même vecteur mode $\mathbf{q}$ en interaction avec les électrons.

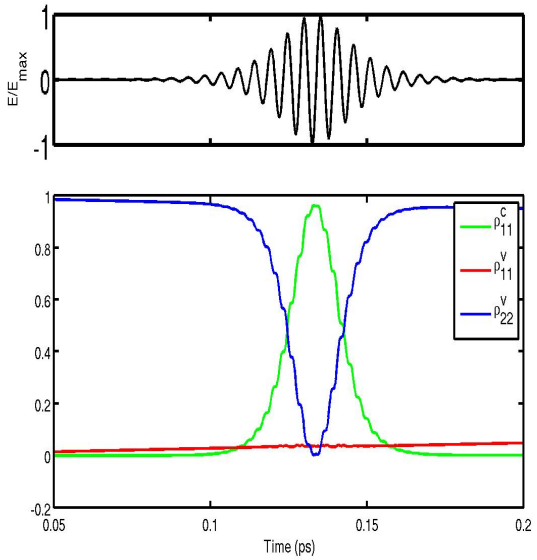


FIGURE 4.22 – Transparence auto-induite du modèle prenant en compte une large valeur du paramètre $a = 30$.

.

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

Les travaux de cette thèse portent sur la modélisation mathématique des boîtes quantiques avec les modèles de type Bloch (équation de Liouville).
En effet, les premiers travaux concernent les dérivations classiques des modèles de type Bloch non linéaires dont les termes non linéaires apparaissent à cause de l'interaction de Coulomb et de l'interaction électron–phonon, deux phénomènes très importants dans la modélisation quantique des boîtes (chapitre 2).
Ensuite, nous avons effectué des études mathématiques sur les modèles dérivés au chapitre 2. Ces études ont montré que la solution des modèles de Bloch conserve la trace et l'hermicité au cours du temps et la positivité dans certains cas. Il a été montré aussi que les modèles couplés Maxwell–Bloch sont bien posés localement et globalement en temps. En plus, on retrouve dans le même chapitre du document (chapitre 3) une dérivation formelle d'un modèle asymptotique en temps long. Cette dérivation est faite sur les modèles de Bloch non linéaires en interaction faible entre le laser et les boîtes quantiques.
Enfin, les travaux de cette thèse se terminent avec la détermination de modèles numériques permettant de préserver les propriétés qualitatives et quantitatives telles que la conservation de le trace, de l'hermicité et la positivité de la solution. Ces modèles numériques ont été utilisés pour réaliser des cas tests et grâce à ces réalisations numériques, nous traitons les corrections apportées par l'interaction de Coulomb dans le modèle de Bloch lors de l'interaction entre les boîtes quantiques et le laser et nous avons pu valider le modèle de Bloch obtenu au détriment de modèles utilisés dans la littérature.

À l'issue de ces travaux, de nombreuses perspectives s'ouvrent à nous.
Nous avons montré dans cette thèse que les modèles de Bloch continu et numérique possèdent une solution qui préserve la trace et l'hermicité au cours du temps. Nous avons montré aussi que les modèles simplifiés faisant intervenir les hamiltoniens tels que l'hamiltonien libre des électrons, de l'interaction laser-boîte et de l'interaction de Coulomb, possèdent des solutions qui préservent la propriété supplémentaire de positivité.

Le premier travail à envisager dans la suite de cette thèse concerne l'élaboration d'une preuve mathématique qui garantit la positivité de la solution des modèles de Bloch complet

avec les termes de l'interaction électron–phonon. Pour arriver à prouver cette propriété, il faut affiner les structures algébriques à imposer aux densités assistées par les phonons.
Le modèle asymptotique formellement dérivé dans cette thèse est issu du modèle de Bloch non linéaire faisant intervenir des hamiltoniens libre des électrons, de l'interaction laser–boîte et de Coulomb. La dérivation a été faite sans donner les estimations sur les erreurs commises lors de la dérivation du modèle asymptotique (les équations de taux). Dans la continuité de ces travaux de thèse, nous envisageons déterminer les estimations des erreurs commises lorsqu'on modélise les boîtes quantiques avec les équations de taux obtenues. Il s'agit, dans un cadre d'analyse fonctionnelle adéquat, d'estimer les cohérences puis de calculer l'erreur sur les populations. Ceci peut se faire dans un cadre plus général que les ondes monochromatiques, mais utilise de manière non triviale des conditions de non-résonance. Pour cela on peut s'inspirer des méthodes utilisées dans les articles [BCD04, BCDG04].
Dans le modèle de Bloch complet dérivé dans cette thèse (système (3.3)), il apparaît une variable intermédiaire (densité assistée par les phonons). Cette variable varie au cours du temps et apparaît dans le cadre de l'interaction électron–phonon. Les études théoriques ([BB90, BSTW91, IS92]) ont montré que le phénomène de "phonon bottleneck" affecte la relaxation d'énergie dans les boîtes quantiques et les temps de relaxation dans les boîtes sont importants dans le cadre des applications où les boîtes sont utilisées comme sources et détecteurs de l'infrarouge lointain (voir [Gra08]). Dans nos études, nous ne traitons pas l'interaction électron–phonon comme un effet de relaxation car la complexité du modèle général rend difficile l'étude du rôle de l'interaction. Pour montrer que l'interaction électron–phonon est un effet de relaxation, le mieux serait de dériver un modèle asymptotique dans lequel la variable intermédiaire apparaîtra autrement. Si l'interaction électron–phonon est vraiment un effet de relaxation alors son expression dans le modèle asymptotique se comportera comme les trois expressions des relaxations connus dans la littérature (uni-niveau, cascade, Pauli) données dans [Boy92, Sut97, Bid06]. Dans la continuité de nos travaux, nous souhaitons dériver des modèles asymptotiques à partir des modèles de Bloch faisant intervenir l'interaction électron–phonon et rechercher les termes de relaxation qui correspondent aux attentes.
Une autre dérivation dans cette direction serait de ramener le modèle de Bloch complet à deux densités à un modèle de Bloch qui donne l'évolution temporelle d'une seule densité ρ. C'est-à-dire trouver un modèle de Bloch dans lequel il n'apparaît pas les densités assistées par les phonons. Cette dérivation nécessiterait l'écriture des commutateurs obtenus grâce à l'interaction électron–phonon en fonction de la densité ρ et des paramètres physiques des boîtes et des phonons.
Le but des tests numériques réalisés dans cette thèse est la validation des modèles de Bloch continus et numériques. Les codes réalisés peuvent être utilisés dans les contextes physiques réalistes. On peut utiliser les champs plus réalistes pour représenter le laser (par exemple des champs gaussiens largement utilisés en physique) et simuler les phénomènes

de transition optique inter-bandes et intra-bandes dans les boîtes quantiques avec les bons paramètres physiques. On peut ensuite utiliser les résultats des phénomènes de transition optique pour déterminer le spectre d'absorption des boîtes dont les valeurs théoriques et expérimentales sont données dans [TMNA99, Kam05].
Après avoir établi une bibliographie riche sur les mesures expérimentales des paramètres des boîtes quantiques (conductivité, coefficient d'absorption, etc), nous devons trouver les liens entre certains paramètres dont les valeurs sont connues expérimentalement et les variables des modèles dérivés dans cette thèse. Cela nous permettra de comprendre encore mieux le comportement des boîtes quantiques au contact avec le champ électromagnétique.
Les couches de mouillage sont les nanostructures bidimensionnelles qui engendrent les liaisons entre les boîtes (voir l'image à gauche de la figure 1.1). Elles induisent un couplage entre deux boîtes au sein d'un matériau. Les caractéristiques de couplage de deux boîtes quantiques dépendent de l'épaisseur de la couche de mouillage. Il a été évoqué dans la thèse de Mourad Baira [Bai09] que la recherche menée sur les boîtes quantiques $Ga_{\alpha}In_{1-\alpha}As$ couplées émettant à 1.3 μm représente un enjeu important dans le cadre des applications du domaine des télécommunications optiques. L'une des perspectives intéressante dans la continuité des travaux peut porter sur la dérivation d'un modèle pour les structures de boîtes couplées. On peut considérer un système de boîtes couplées comme un ensemble de systèmes boîte–couche de mouillage. Puisque les couches de mouillage ont une structure de puits quantiques, la dynamique de la densité des électrons peut être représentée par un modèle cinétique (voir [GH02, GH03]). Le modèle mathématique pour les structures de boîtes couplées reviendrait alors au couplage du modèle de type Bloch dérivé dans cette thèse avec un modèle cinétique.

Annexe A

Détermination des fonctions propres et énergies des boîtes quantiques

Les boîtes quantiques contenant un seul électron, peuvent être utilisées comme des sources de photon unique via l'excitation par un laser. La fréquence d'un photon unique dépend évidemment des états propres du système. Les états propres des boîtes contenant un seul électron sont solutions de l'équation aux valeurs propres de Schrödinger (2.2) donnée par

$$H\psi_j = \mathcal{E}_j\psi_j \quad \text{avec} \quad j \in \{1, \cdots\}.$$

L'hamiltonien du système H est la somme de l'hamiltonien libre H_0 et l'hamiltonien de confinement dans les trois directions de l'espace $V_c(r)$.

$$H = H_0 + V_c(r) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V_c(r).$$

Les résultats analytiques simples sont obtenus en supposant que l'hamiltonien est infini à l'extérieur du domaine et nul à l'intérieur.

$$V_c(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad r \in D, \\ \infty & \text{pour} \quad r \in \mathbb{R}^3 - D, \end{cases}$$

où D est la boîte quantique.
Ceci se traduit mathématiquement par une condition de Dirichlet au bord de la boîte.
Déterminons les fonctions propres ψ_j des boîtes de forme cubique et cylindrique.

Boîtes cubiques. Dans les boîtes cubiques, nous choisissons un référentiel cartésien dans lequel la formulation du problème devient

$$\begin{cases} \partial_x^2\psi_j(x,y,z) + \partial_y^2\psi_j(x,y,z) + \partial_z^2\psi_j(x,y,z) &= E_j\psi_j(x,y,z) \quad \text{pour} \quad (x,y,z) \in D, \\ \psi_j(x,y,z) &= 0 \quad \text{pour} \quad (x,y,z) \in \partial D, \end{cases} \tag{A.1}$$

avec $E_j = -\frac{2m_e}{\hbar^2}\mathcal{E}_j$.
La méthode de séparation de variables permet de poser pour tout niveau j :

$$\psi_j(x,y,z) = \phi_{1,j}(x)\phi_{2,j}(y)\phi_{3,j}(z).$$

Grâce à la méthode de séparation de variables, le système (A.1) s'écrit comme trois problèmes aux valeurs propres unidimensionnels.
Considérons les boîtes centrées au point d'origine 0 dont les longueurs sont identiques suivant les trois directions de l'espace ($2L$). Le domaine de ces boîtes cubiques est donné par $[-L, L]^3$. Dans ces types de boîtes, les expressions des fonctions propres dépendent de la parité des niveaux quantiques.
La résolution d'un problème unidimensionnel obtenu avec la méthode de séparation de variables nous donne la solution suivante :

$$\phi_{1,j}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}}\sin(\frac{m_j\pi}{2L}x) & \text{pour} \quad m_j \quad \text{pair,} \\ \frac{1}{\sqrt{L}}\cos(\frac{m_j\pi}{2L}x) & \text{pour} \quad m_j \quad \text{impair.} \end{cases} \tag{A.2}$$

En dimension 3, les niveaux quantiques sont représentés par les triplets d'entiers (m_j, n_j, p_j). Donc les expressions des fonctions propres dépendent des parités des trois entiers m_j, n_j et p_j.

La valeur propre associée à la fonction propre (A.2) est donnée par

$$E_{1,j} = -\frac{m_j^2\pi^2}{4L^2}. \tag{A.3}$$

La valeur propre du problème en dimension 3 (A.1) est la somme des valeurs propres des trois problèmes unidimensionnels.

$$E_j = E_{1,j} + E_{2,j} + E_{3,j} = -\frac{\pi^2}{4L^2}(m_j^2 + n_j^2 + p_j^2).$$

Nous déduisons les expressions des énergies des niveaux quantiques, inversement proportionnelles au carré de la longueur des boîtes.

$$\mathcal{E}_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e}E_j = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m_eL^2}(m_j^2 + n_j^2 + p_j^2).$$

Choisissons trois niveaux quantiques en dimension 3 notés I, II et III tels que I $= (1,1,1)$, II $= (1,2,1)$ et III $= (2,2,1)$. Dans l'annexe B, nous calculons les valeurs des élements de la matrice dipolaire dans la cas d'un modèle quantique composé des trois niveaux I, II et III.

Dans le cas d'une boîte de longueur $2L = 2\ 10^{-8}$ les énergies de ces trois niveaux sont données dans le tableau A.1.

Niveau	Énergie (J)
I	$4.5187\ 10^{-22}$
II	$9.0374\ 10^{-22}$
III	$1.3556\ 10^{-21}$

TABLE A.1 – Les énergies de trois niveaux quantiques I, II, III d'une boîte cubique de longueur $2L = 2\ 10^{-8}$.

Boîtes cylindriques. Plaçons nous dans un référentiel cylindrique dans lequel l'expression du laplacien est donnée par

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{1}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\theta^2 + \partial_z^2.$$

Le domaine de la boîte quantique en coordonnées cylindriques s'écrit

$$D = \Big\{(r,\theta,z); \quad 0 \le r \le R, \quad 0 \le \theta \le 2\pi, \quad -L \le z \le L\Big\}.$$

En procédant comme précédemment avec l'utilisation de la méthode de séparation de variables. Pour un entier m_j pair, l'expression de la fonction propre nous donne

$$\psi_j(r,\theta,z) = \Big(A_1 \sin\big(\frac{m_j\pi}{2L}z\big)\sin\big(p_j\theta\big) + A_2 \sin\big(\frac{m_j\pi}{2L}z\big)\cos\big(p_j\theta\big)\Big)\sum_{n_j=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n_j}}{p_j!(n_j+p_j)!}\big(\frac{1}{2}r\big)^{2n_j+p_j},$$

où les constantes A_1 et A_2 sont déterminées avec la relation suivante :

$$\sum_j \|\psi_j\|_{L^2(D)} = 1.$$

Cette expression est différente pour un entier m_j impair, elle devient

$$\psi_j(r,\theta,z) = \Big(A_1 \cos\big(\frac{m_j\pi}{2L}z\big)\sin\big(p_j\theta\big) + A_2 \cos\big(\frac{m_j\pi}{2L}z\big)\cos\big(p_j\theta\big)\Big)\sum_{n_j=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n_j}}{p_j!(n_j+p_j)!}\big(\frac{1}{2}r\big)^{2n_j+p_j}.$$

Annexe B

Moment dipolaire pour les boîtes cubiques

Les éléments de la matrice dipolaire $\mathbf{M}^{\delta}$ ($\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$) dépendent de la charge de l'électron e, des fonctions propres des boîtes quantiques.
Dans cette partie, nous déterminons les éléments de la matrice dipolaire dans le cas des boîtes cubiques. Les fonctions propres des boîtes cubiques sont données dans l'annexe A.
Pour tout $j, k \in \mathbb{N}$, les éléments de la matrice dipolaire se présentent ainsi

$$\mathbf{M}_{j,k}^{\delta\delta'} = -e \int_{-L}^{L} \int_{-L}^{L} \int_{-L}^{L} \psi_j^{\delta *}(x,y,z) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \psi_k^{\delta'}(x,y,z) dxdydz$$

Propriété 6. *Pour les boîtes de forme cubique :*
(i) les éléments de la matrice dipolaire sont nuls.

$$\boldsymbol{M}_{j,j}^{\delta\delta'} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

(ii) Pour deux niveaux différents (m_j, n_j, p_j), (m_k, n_k, p_k) :

- $\boldsymbol{M}_{x,j,k}^{\delta\delta'}$ *est non-nulle si les entiers m_j et m_k sont différents, de parités différentes et si les deux autres entiers (n_j, p_j) et (n_k, p_k) sont égaux.*
- $\boldsymbol{M}_{y,j,k}^{\delta\delta'}$ *est non-nulle si les entiers n_j et n_k sont différents, de parités différentes et si les deux autres entiers (m_j, p_j) et (m_k, p_k) sont égaux.*
- $\boldsymbol{M}_{z,j,k}^{\delta\delta'}$ *est non-nulle si les entiers p_j et p_k sont différents, de parités différentes et si les deux autres entiers (m_j, n_j) et (m_k, n_k) sont égaux.*

Démonstration. Les éléments de la matrice dipolaire sont des vecteurs de dimension 3 dont les trois composantes peuvent s'écrire

$$\mathbf{M}_{x,j,k}^{\delta\delta'} = -eH_1(x)K_2(y)K_3(z), \quad \mathbf{M}_{y,j,k}^{\delta\delta'} = -eK_1(x)H_2(y)K_3(z),$$

et

$$\mathbf{M}^{\delta\delta'}_{z,j,k} = -eK_1(x)K_2(y)H_3(z),$$

où pour tout $u \in \{x, y, z\}$ et $l \in \{1, 2, 3\}$,

$$K_l(u) = \int_{-L}^{L} \phi^{\delta *}_{l,j}(u)\phi^{\delta'}_{l,k}(u)du \quad \text{et} \quad H_l(u) = \int_{-L}^{L} \phi^{\delta *}_{l,j}(u)u\phi^{\delta'}_{l,k}(u)du.$$

<u>*Détermination des éléments diagonaux*</u> : Les éléments diagonaux de la matrice $\mathbf{M}^{\delta\delta'}$ sont nuls car $\forall j, l$, la fonction $u|\phi_{l,j}(u)|^2$ est impaire et l'intégrale $H_l(u)$ dans le cas des éléments diagonaux s'annule.

$$\mathbf{M}^{\delta\delta'}_{j,j} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

<u>*Détermination des éléments non-diagonaux*</u> : Les déterminations des intégrales $K_l(u)$ et $H_l(u)$ permettent de déduire les éléments non-diagonaux de la matrice dipolaire.

Soient α_j et α_k les nombres quantiques associés aux niveaux j et k.

– Pour $\alpha_j \neq \alpha_k$ et de mêmes parités :

$$K_l(u) = 0 \quad \text{et} \quad H_l(u) = 0.$$

– Pour $\alpha_j \neq \alpha_k$ et de parités différentes (α_j pair et α_k impair) :

$$K_l(u) = 0 \quad \text{et} \quad H_l(u) = \frac{2L}{(\alpha_j + \alpha_k)^2\pi^2} \sin\big(\frac{\alpha_j + \alpha_k}{2}\pi\big) + \frac{2L}{(\alpha_j - \alpha_k)^2\pi^2} \sin\big(\frac{\alpha_j - \alpha_k}{2}\pi\big).$$

– Pour $\alpha_j = \alpha_k$:

$$K_l(u) = 1 \quad \text{et} \quad H_l(u) = 0.$$

□

Exemple 3. *Considérons les trois niveaux donnés dans l'annexe A :* I $= (1, 1, 1)$, II $= (1, 2, 1)$ *et* III $= (2, 2, 1)$. *Les valeurs des éléments de la matrice dipolaire correspondant à ces trois niveaux sont données dans le tableau B.1.*

	I	II	III
I	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{16Le}{9\pi^2} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
II	$\begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{16Le}{9\pi^2} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{16Le}{9\pi^2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
III	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{16Le}{9\pi^2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

TABLE B.1 – Matrice dipolaire du modèle quantique à trois niveaux I, II et III.

Les valeurs des éléments de la matrice $\boldsymbol{M}$ *données dans le tableau B.1 montrent qu'il n'y a pas de coupalge via les équations de Maxwell entre les niveaux* I *et* III*. Mais il existe des couplages entre les niveaux* I *et* II *suivant la direction* y *et entre les niveaux* II *et* III *suivant la direction* x*. Il n'y a pas de couplage suivant la direction* z *(voir la figure B.1).*

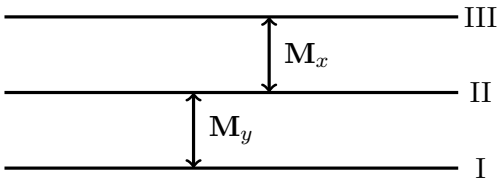


FIGURE B.1 – Couplage via les équations de Maxwell entre les niveaux I, II et III.

Annexe C

Paramètres de Coulomb pour les boîtes cubiques

Les paramètres de Coulomb dépendent des fonctions propres associées aux boîtes quantiques et du potentiel de Coulomb. Les expressions des fonctions propres diffèrent selon la forme de la boîte (voir l'annexe A). Considérons ici les fonctions propres des boîtes cubiques de l'annexe A. Le potentiel de Coulomb est une fonction qui dépend inversement de la distance entre les électrons en interaction. Son expression est donnée par

$$V(r, r') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0|r - r'|},$$

où e est la charge de l'électron, r et r' sont les positions des deux électrons en interaction.

Nous commençons par le calcul des paramètres de Coulomb en dimension 1 seulement pour les niveaux de nombres quantiques m_j pairs. Ce calcul en dimension 1 nous permet de repérer la singularité et, grâce à ce repérage, nous approchons les intégrales des paramètres de Coulomb en dimension 3 avec une méthode efficace.

Paramètre de Coulomb en dimension 1 Nous faisons les calculs avec les fonctions propres données dans l'annexe A dans le cadre d'une boîte cubique et en considérant que les niveaux de nombres quantiques paires. En dimension 1, nous avons

$$R_{2m_1,2m_2,2m'_1,2m'_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 L^2}\int_{-L}^{L}\int_{-L}^{L}\frac{\sin(\frac{m_1\pi}{L}x)\sin(\frac{m_2\pi}{L}x)\sin(\frac{m'_1\pi}{L}x')\sin(\frac{m'_2\pi}{L}x')}{|x - x'|}dxdx',$$

où $2L$ est la longueur totale de la boîte.
En utilisant les changements de variables $(y, y') = (\frac{x+L}{2L}, \frac{x'+L}{2L})$ pour ramener le domaine d'intégration à $[0, 1] \times [0, 1]$, le paramètre de Coulomb se réécrit :

$$R_{2m_1,2m_2,2m'_1,2m'_2} = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_r\epsilon_0 L}(-1)^{m_1+m_2+m'_1+m'_2}I,$$

avec

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \frac{\sin(\alpha y)\sin(\beta y)\sin(\gamma y')\sin(\delta y')}{|y-y'|} dy dy',$$

$\alpha = 2m_1\pi$, $\beta = 2m_2\pi$, $\gamma = 2m_2'\pi$ et $\delta = 2m_1'\pi$.
La fonction à intégrer $f(y,y') = \frac{\sin(\alpha y)\sin(\beta y)\sin(\gamma y')\sin(\delta y')}{|y-y'|}$ est définie sur l'ensemble

$$D = \Big\{(y,y') \in [0,1]\times[0,1]; y \neq y'\Big\}.$$

Pour éviter la singularité dans l'intégrale, nous notons

$$D_\epsilon = \Big\{(y,y') \in [0,1]\times[0,1]; y = y' \pm \epsilon\Big\},$$

et posons

$$I(\epsilon) = \int_{D_\epsilon} \frac{\sin(\alpha y)\sin(\beta y)\sin(\gamma y')\sin(\delta y')}{|y-y'|} dy dy', \tag{C.1}$$

avec

$$I = \lim_{\epsilon\to 0} I(\epsilon).$$

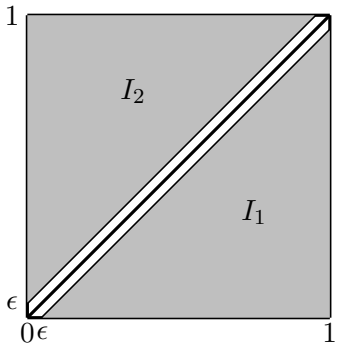


FIGURE C.1 – Domaine d'intégration D_ϵ.

Comme le montre la figure C.1, l'intégrale $I(\epsilon)$ est égale à la somme de deux intégrales sur deux domaines disjoints au dessus et en dessous de la première bissectrice.

$$I(\epsilon) = I_1(\epsilon) + I_2(\epsilon),$$

avec

$$I_1(\epsilon) = \int_\epsilon^1 \int_0^{y'-\epsilon} \frac{\sin(\alpha y)\sin(\beta y)\sin(\gamma y')\sin(\delta y')}{y'-y} dy dy',$$

et

$$I_2(\epsilon) = \int_0^{1-\epsilon} \int_{y'+\epsilon}^1 \frac{\sin(\alpha y)\sin(\beta y)\sin(\gamma y')\sin(\delta y')}{y-y'} dy dy'.$$

Calcul de $I_1(\epsilon)$. La première partie du calcul de $I_1(\epsilon)$ consiste à transformer le produit des fonctions trigonométriques au numérateur en une somme de fonctions trigonométriques.

$$\begin{aligned}
&\sin(\alpha y)\sin(\beta y)\sin(\gamma y')\sin(\delta y') \\
&\quad = \frac{1}{8}\Big(\cos(a_- y + b_- y') + \cos(a_- y - b_- y') + \cos(a_- y + b_+ y') + \cos(a_- y - b_+ y') \\
&\qquad + \cos(a_+ y + b_- y') + \cos(a_+ y - b_- y') + \cos(a_+ y + b_+ y') + \cos(a_+ y - b_+ y')\Big),
\end{aligned}$$

avec $a_- = \alpha - \beta$, $a_+ = \alpha + \beta$, $b_- = \gamma - \delta$ et $b_+ = \gamma + \delta$.
L'intégrale $I_1(\epsilon)$ se décompose en 4 intégrales

$$I_1(\epsilon) = \frac{1}{4}(I_{11}(\epsilon) - I_{12}(\epsilon) - I_{13}(\epsilon) + I_{14}(\epsilon)).$$

$$I_{11}(\epsilon) = \frac{1}{2}(F(a_-, b_-) + F(a_-, -b_-)), \quad I_{12}(\epsilon) = \frac{1}{2}(F(a_-, b_+) + F(a_-, -b_+))$$
$$I_{13}(\epsilon) = \frac{1}{2}(F(a_+, b_-) + F(a_+, -b_-)), \quad I_{14}(\epsilon) = \frac{1}{2}(F(a_+, b_+) + F(a_+, -b_+))$$

avec

$$F(a,b) = \int_\epsilon^1 \int_0^{y'-\epsilon} \frac{\cos(ay + by')}{y' - y} dy dy'.$$

Il suffit de déterminer $F(a,b)$ pour déduire les expressions de $I_{11}(\epsilon)$, $I_{12}(\epsilon)$, $I_{13}(\epsilon)$ et $I_{14}(\epsilon)$.
Faisons le changement de variables pour l'intégrale $F(a,b)$:

$$u = y' - y \quad \text{et} \quad v = y',$$

qui donne

$$\begin{aligned}
F(a,b) &= \int_\epsilon^1 \int_\epsilon^v \frac{\cos(-au + (a+b)v)}{u} du dv \\
&= \int_\epsilon^1 \cos((a+b)v) \int_\epsilon^v \frac{\cos(au)}{u} du dv + \int_\epsilon^1 \sin((a+b)v) \int_\epsilon^v \frac{\sin(au)}{u} du dv.
\end{aligned}$$

Le calcul de ces intégrales nécessite la connaissance des deux fonctions spéciales classiques suivantes.

Fonctions sinus intégral et cosinus intégral.

La fonction sinus intégral notée Si, est définie, continue et infiniment dérivable sur $\mathbb{R}$.

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \mathrm{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin(t)}{t} dt.$$

Sa dérivée appelée sinus cardinal est égale à

$$\mathrm{Si}'(x) = \frac{\sin(x)}{x}.$$

La fonction cosinus intégral se note Ci. C'est une fonction définie, continue et infiniment dérivable sur $\mathbb{R}_+^*$.

$$\forall x \in \mathbb{R}_+^*, \quad \mathrm{Ci}(x) = -\int_x^\infty \frac{\cos(t)}{t} dt.$$

Sa dérivée vaut

$$\mathrm{Ci}'(x) = \frac{\cos(x)}{x}.$$

Revenons au calcul de $F(a,b)$.
Si $a+b \neq 0$, on a

$$\begin{aligned}
F(a,b) &= \int_\epsilon^1 \cos((a+b)v) \int_\epsilon^v \frac{\cos(au)}{u} du dv + \int_\epsilon^1 \sin((a+b)v) \int_\epsilon^v \frac{\sin(au)}{u} du dv \\
&= \int_\epsilon^1 \cos((a+b)v)(\mathrm{Ci}(av) - \mathrm{Ci}(a\epsilon)) dv + \int_\epsilon^1 \sin((a+b)v)(\mathrm{Si}(av) - \mathrm{Si}(a\epsilon)) dv \\
&= \int_\epsilon^1 \cos((a+b)v)\mathrm{Ci}(av) dv + \int_\epsilon^1 \sin((a+b)v)\mathrm{Si}(av) dv \\
&- \frac{\mathrm{Ci}(a\epsilon)}{a+b}[\sin((a+b)v)]_\epsilon^1 + \frac{\mathrm{Si}(a\epsilon)}{a+b}[\cos((a+b)v)]_\epsilon^1 dv.
\end{aligned}$$

Faisons des intégrations par parties :

$$\begin{aligned}
F(a,b) &= \int_\epsilon^1 \cos((a+b)v)\mathrm{Ci}(av) dv + \int_\epsilon^1 \sin((a+b)v)\mathrm{Si}(av) dv \\
&- \frac{\mathrm{Ci}(a\epsilon)}{a+b}[\sin((a+b)v)]_\epsilon^1 + \frac{\mathrm{Si}(a\epsilon)}{a+b}[\cos((a+b)v)]_\epsilon^1 \\
&= \frac{1}{a+b}[\sin((a+b)v)\mathrm{Ci}(av)]_\epsilon^1 - \frac{1}{a+b}\int_\epsilon^1 \frac{\sin((a+b)v)\cos(av)}{v} dv \\
&- \frac{1}{a+b}[\cos((a+b)v)\mathrm{Si}(av)]_\epsilon^1 + \frac{1}{a+b}\int_\epsilon^1 \frac{\cos((a+b)v)\sin(av)}{v} dv \\
&- \frac{\mathrm{Ci}(a\epsilon)}{a+b}[\sin((a+b)v)]_\epsilon^1 + \frac{\mathrm{Si}(a\epsilon)}{a+b}[\cos((a+b)v)]_\epsilon^1 \\
&= -\frac{1}{a+b}\int_\epsilon^1 \frac{\sin((a+b)v)\cos(av)}{v} dv + \frac{1}{a+b}\int_\epsilon^1 \frac{\cos((a+b)v)\sin(av)}{v} dv \\
&- \frac{\cos(a+b)\mathrm{Si}(a)}{a+b} + \frac{\cos(a+b)\mathrm{Si}(a\epsilon)}{a+b} \\
&= -\frac{1}{a+b}\int_\epsilon^1 \frac{\sin(bv)}{v} dv - \frac{\cos(a+b)\mathrm{Si}(a)}{a+b} + \frac{\cos(a+b)\mathrm{Si}(a\epsilon)}{a+b} \\
&= \frac{-\cos(a+b)\mathrm{Si}(a) + \cos(a+b)\mathrm{Si}(a\epsilon) - \mathrm{Si}(b) + \mathrm{Si}(b\epsilon)}{a+b}.
\end{aligned}$$

Si $a+b=0$:

$$\begin{aligned}
F(a,b) &= \int_\epsilon^1 \int_\epsilon^v \frac{\cos(au)}{u} du dv = \int_\epsilon^1 (\mathrm{Ci}(av) - \mathrm{Ci}(a\epsilon)) dv \\
&= [v\mathrm{Ci}(av)]_\epsilon^1 - \int_\epsilon^1 \cos(av) dv - (1-\epsilon)\mathrm{Ci}(a\epsilon) \\
&= \mathrm{Ci}(a) - \mathrm{Ci}(a\epsilon) - \int_\epsilon^1 \cos(av) dv \\
&= \mathrm{Ci}(a) - \mathrm{Ci}(a\epsilon) + \frac{\sin(a\epsilon)}{a}.
\end{aligned}$$

Calcul de $I_2(\epsilon)$. Le calcul de $I_2(\epsilon)$ se fait de la même manière que précédemment. On écrit $I_2(\epsilon)$ comme la somme de 4 intégrales telles que :

$$I_2(\epsilon) = \frac{1}{4}(I_{21}(\epsilon) - I_{22}(\epsilon) - I_{23}(\epsilon) + I_{24}(\epsilon)),$$

avec

$$I_{21}(\epsilon) = \frac{1}{2}(G(a_-, b_-) + G(a_-, -b_-)), \quad I_{22}(\epsilon) = \frac{1}{2}(G(a_-, b_+) + G(a_-, -b_+))$$

$$I_{23}(\epsilon) = \frac{1}{2}(G(a_+, b_-) + G(a_+, -b_-)) \quad \textbf{et} \quad I_{24}(\epsilon) = \frac{1}{2}(G(a_+, b_+) + G(a_+, -b_+)).$$

Pour tous réels a, b,

$$G(a,b) = \int_0^{1-\epsilon} \int_{y'+\epsilon}^1 \frac{\cos(ay+by')}{y-y'} dy dy'.$$

En faisant le changement de variable $y = u+v$ et $y' = v$, on a :

$$\begin{aligned}
G(a,b) &= \int_0^{1-\epsilon} \int_\epsilon^{1-v} \frac{\cos(au+(a+b)v)}{u} du dv \\
&= \int_0^{1-\epsilon} \cos((a+b)v)(\mathrm{Ci}(a-av) - \mathrm{Ci}(a\epsilon)) dv \\
&- \int_0^{1-\epsilon} \sin((a+b)v)(\mathrm{Si}(a-av) - \mathrm{Si}(a\epsilon)) dv.
\end{aligned}$$

Si $a \neq -b$, par intégration par parties

$$\begin{aligned}
G(a,b) &= \frac{1}{a+b}[\sin((a+b)v)(\mathrm{Ci}(a-av) - \mathrm{Ci}(a\epsilon))]_0^{1-\epsilon} \\
&- \frac{1}{a+b}\int_0^{1-\epsilon} \sin((a+b)v)\frac{\cos(a-av)}{v-1} dv \\
&+ \frac{1}{a+b}[\cos((a+b)v)(\mathrm{Si}(a-av) - \mathrm{Si}(a\epsilon))]_0^{1-\epsilon} \\
&- \frac{1}{a+b}\int_0^{1-\epsilon} \cos((a+b)v)\frac{\sin(a-av)}{v-1} dv \\
&= -\frac{\mathrm{Si}(a) - \mathrm{Si}(a\epsilon)}{a+b} - \frac{\cos(a-b)}{a+b}\int_0^{1-\epsilon} \frac{\sin(b-bv)}{v-1} dv \\
&= -\frac{\mathrm{Si}(a) - \mathrm{Si}(a\epsilon) - \cos(a-b)(\mathrm{Si}(b\epsilon) - \mathrm{Si}(b))}{a+b}.
\end{aligned}$$

Si $a = -b$, on trouve :

$$\begin{aligned} G(a,b) &= \int_0^{1-\epsilon} (\mathrm{Ci}(a - av) - \mathrm{Ci}(a\epsilon))dv \\ &= \mathrm{Ci}(a) - \mathrm{Ci}(a\epsilon) + \frac{\sin(a\epsilon)}{a}. \end{aligned}$$

Dans les cas où $a+b = 0$, on se retrouve avec une intégrale $I(\epsilon)$ qui diverge car $\lim_{\epsilon\to 0}(F(a,b)+G(a,b)) = \infty$. Et cela vient de $\lim_{\epsilon\to 0} \mathrm{Ci}(a\epsilon)$.

Nous pouvons remarquer que les paramètres de Coulomb divergent en dimension 1 pour certaines fonctions propres. Ce sont les quatre fonctions propres telles ques $m_1 \pm m_2 + m_1' \pm m_2' \neq 0$.

Paramètre de Coulomb en dimension 3 On procède comme précédemment pour l'écriture du paramètre de Coulomb en dimension 3. En posant $\alpha_j = (2m_j, 2n_j, 2p_j)$ et $\alpha_j' = (2m_j', 2n_j', 2p_j')$ pour $j \in \{1, 2\}$, on obtient

$$R_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1',\alpha_2'} = \frac{8e^2}{\pi\epsilon_r\epsilon_0 L}(-1)^{\sum_{j=1}^2 (m_j+m_j'+n_j+n_j+p_j+p_j')} I,$$

avec

$$I = \int_{[0,1]^6} \frac{\prod_{j=1}^2 f(m_j x)f(n_j y)f(p_j z)f(m_j' x)f(n_j' x)f(p_j' x)}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} dxdx'dydy'dzdz',$$

avec

$$f(t) = \sin(2\pi t).$$

La fonction

$$J(r,r') = \frac{\prod_{j=1}^2 f(m_j x)f(n_j y)f(p_j z)f(m_j' x)f(n_j' x)f(p_j' x)}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}}$$

peut se réécrire encore

$$J(r,r') = \frac{\prod_{j=1}^2 f(m_j(u'-u))f(n_j(v'-v))f(p_j(w'-w))f(m_j' u')f(n_j' v')f(p_j' w')}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}$$

avec les changements de variables $x = u' - u$, $x' = u'$, $x = v' - v$, $x' = v'$, $x = w' - w$, $x' = w'$.

La partie qui rend la fonction divergente en dimension 1 s'écrit autrement en dimension 3. Elle est donnée par

$$\frac{\cos(\alpha u)}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}.$$

Les valeurs de v et w jouent un rôle très important dans la convergence de l'intégrale.

Pour $v^2 + w^2 = 0$, nous retrouvons le même problème qu'en dimension 1 et l'intégrande diverge dans ce cas. Pour éviter cela, nous utilisons une méthode d'approximation qui permet de traiter la singularité en mettant plus de points de discrétisation dans les endroits où la fonction est singulière.

Méthode de périodisation. La méthode de périodisation est donnée dans [HMR98]. Pour pouvoir calculer l'intégrale I avec la méthode de périodisation, il faut d'abord ramener toutes les variables d'intégration de I sur l'intervalle $[0,1]$. I est l'intégrale de la fonction $J(r,r')$ sur le domaine suivant

$$L = \left\{ \left(u, v, w, u', v', w' \right) / -u' \leq u \leq 1-u', -v' \leq v \leq 1-v' \quad \text{et} \quad -w' \leq w \leq 1-w' \right\}.$$

Pour ramener les domaines d'intégration des six variables à l'intervalle $[0,1]$, nous écrivons I en fonction d'une autre intégrale I_1. Cela donne

$$I = 8I_1,$$

avec

$$I_1 = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{u'} \int_0^{v'} \int_0^{w'} J(-u,-v,-w,u',v',w') du du' dv dv' dw dw'.$$

Les changements de variables $U = \frac{u}{u'}$, $V = \frac{v}{v'}$ et $W = \frac{w}{w'}$ ramènent toutes les variables d'intégration sur $[0,1]$ et on a

$$I_1 = \int_{[0,1]^6} J(-Uv', -Vv', -Ww', u', v', w') u'v'w' dU du' dV dv' dW dw'$$

Après les changements de variables pour ramener toutes les variables d'intégration sur l'intervalle $[0,1]$, il faut appliquer la méthode de périodisation pour traiter la singularité qui apparaît quand

$$V^2 u'^2 + W^2 w'^2 = 0.$$

Posons

$$J(-Uv', -Vv', -Ww', u', v', w') = \frac{K(-Uu', -Vv', -Ww', u', v', w')}{\sqrt{U^2 u'^2 + V^2 v'^2 + W^2 w'^2}},$$

avec

$$K(-Uu', -Vv', -Ww', u', v', w') = \prod_{j=1}^{2} f(-m_j U u') f(n_j V v') f(p_j W w') f(m'_j u') f(n'_j v') f(p'_j w').$$

On peut traiter la singularité de I_1 en s'arrangeant à éviter que deux variables parmi les trois variables U, V et W s'annulent simultanément. Pour cela nous posons

$$V = P(x) = \frac{\int_0^x t^{2k-2}(1-t)^{2k-2} dt}{\int_0^1 t^{2k-2}(1-t)^{2k-2} dt} \tag{C.2}$$

et

$$W = P(y) = \frac{\int_0^y t^{2k-2}(1-t)^{2k-2} dt}{\int_0^1 t^{2k-2}(1-t)^{2k-2} dt}, \tag{C.3}$$

où l'entier k dépend de la régularité de la fonction à intégrer.
L'intégrale I_1 devient

$$I_1 = \int_{[0,1]^6} F(-Uv', -P(x)v', -P(y)w', u', v', w')u'v'w'P'(x)P'(y)dUdu'dxdv'dydw'. \tag{C.4}$$

Maintenant on peut approcher l'intégrale (C.4) par la méthode des rectangles et observer la convergence de la solution approchée de l'intégrale I_1.
Pour les nombres quantiques $\alpha_1 = (2,2,2)$, $\alpha_2 = (4,4,4)$, $\alpha_1' = (2,2,2)$ et $\alpha_2' = (4,4,4)$, les variations des valeurs de l'intégrale I_1 en fonction du nombre de points de discrétisation sont données par la figure C.2.

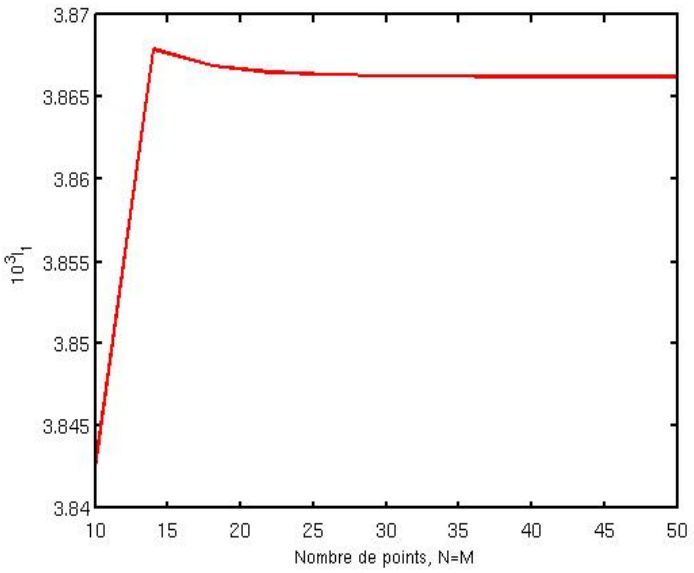


FIGURE C.2 – Valeurs de l'intégrale I_1 en fonction du nombre de points de discrétisation pour $k = 5$. Les paramètres numériques de discrétisation N et M sont égaux.

La courbe de la figure C.2 converge vers $3.867\ 10^{-3}$, alors

$$\boxed{I = 8I_1 = 3.09\ 10^{-2}}.$$

On peut prendre une valeur de référence des paramètres de Coulomb R_0 avec

$$R_0 = 3.09\ 10^{-2}\frac{8e^2}{\pi\epsilon_r\epsilon_0 L} \approx \frac{2.85\ 10^{-29}}{\epsilon_r L}.$$

Annexe D

Matrice de couplage électron–phonon optique pour les boîtes cubiques

Dans les boîtes cubiques, les éléments de la matrice de couplage entre les électrons et les phonons s'écrivent sous la forme suivante :

$$\Phi^{\delta}_{\mathbf{q},j,k} = \int_{-L}^{L}\int_{-L}^{L}\int_{-L}^{L} \psi_j^{\delta *}(x,y,z) \exp\big(\mathrm{i}(q_x x + q_y y + q_z z)\big)\psi_k^{\delta}(x,y,z)dxdydz,$$

avec $\delta \in \{\mathrm{c}, \mathrm{v}\}$.

Propriété 7. *Pour les boîtes de forme cubique :*
(i) les éléments diagonaux de la matrice de couplage électron–phonon sont nuls.

$$\Phi^{\delta}_{\mathbf{q},j,j} = 0.$$

(ii) Pour deux niveaux différents (m_j, n_j, p_j) et (m_k, n_k, p_k), les éléments $\Phi^{\delta}_{\mathbf{q},j,k}$ sont non-nuls si pour tout $\alpha \in \{m, n, p\}$, les nombres quantiques α_j et α_k sont différents et de parités différentes.

Démonstration. En remplaçant les fonctions propres par leurs expressions données par la méthode de séparation de variables, nous pouvons réécrire les éléments de la matrice.

$$\Phi^{\delta}_{\mathbf{q},j,k} = J_1(x)J_2(y)J_3(z),$$

avec pour tout $l \in \{1, 2, 3\}$ et $u \in \{x, y, z\}$,

$$J_l(u) = \int_{-L}^{L} \phi_{l,j}^{\delta *}(u) \exp(\mathrm{i}q_u u)\phi_{l,k}^{\delta}(u)du. \tag{D.1}$$

<u>*Détermination des éléments diagonaux*</u> : Dans les cas des éléments diagonaux ($j = k$), l'intégrale (D.1) donne un nombre réel car la fonction $\mathrm{i}|\phi_{l,j}^{\delta}(u)|^2 \sin(q_u u)$ est impaire et son

intégrale sur $[-L, L]$ est nulle. Pour les éléments diagonaux, on a

$$J_l(u) = \int_{-L}^{L} |\phi_{l,j}^{\delta}(u)|^2 \cos(q_u u) du.$$

Rappelons que le produit des composantes du vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et la longueur des boîtes est un multiple de 2π. Pour tout u, il existe un entier N tel que

$$2q_u L = 2N\pi.$$

Dans ce cas, si le nombre quantique α_j associé au niveau j est paire, on trouve

$$J_l(u) = \frac{1}{L} \int_{-L}^{L} \sin^2(\frac{\alpha_j \pi}{2L} u) \cos(q_u u) du = 0.$$

Si α_j est impaire, nous obtenons aussi

$$J_l(u) = \frac{1}{L} \int_{-L}^{L} \cos^2(\frac{\alpha_j \pi}{2L} u) \cos(q_u u) du = 0.$$

Dans tous les cas les termes diagonaux sont nuls.
Détermination des éléments non-diagonaux : Dans les cas des termes non-diagonaux, les intégrales (D.1) sont soit réelles ou imaginaires pures.

Soient α_j et α_k les nombres quantiques associés respectivement aux niveaux j et k.

– Si $\alpha_j \neq \alpha_k$ et de mêmes parités :

$$J_l(u) = \int_{-L}^{L} \phi_{l,j}^{\delta *}(u) \cos(q_u u) \phi_{l,k}^{\delta}(u) du = 0.$$

– Si $\alpha_j \neq \alpha_k$ et de parités différentes (α_j pair et α_k impair) :

$$\begin{aligned} J_l(u) &= \frac{\mathrm{i}}{L} \int_{-L}^{L} \sin\big(\frac{\alpha_j \pi}{2L} u\big) \sin(q_u u) \cos\big(\frac{\alpha_k \pi}{L} u\big) du \\ &= \mathrm{i}\Bigg(-\frac{\sin\big(\frac{2q_u L + (\alpha_j+\alpha_k)\pi}{2}\big)}{2q_u L + (\alpha_j+\alpha_k)\pi} + \frac{\sin\big(\frac{-2q_u L + (\alpha_j+\alpha_k)\pi}{2}\big)}{-2q_u L + (\alpha_j+\alpha_k)\pi} \\ &\quad - \frac{\sin\big(\frac{2q_u L + (\alpha_j-\alpha_k)\pi}{2}\big)}{2q_u L + (\alpha_j-\alpha_k)\pi} + \frac{\sin\big(\frac{-2q_u L + (\alpha_j-\alpha_k)\pi}{2}\big)}{-2q_u L + (\alpha_j-\alpha_k)\pi} \Bigg). \end{aligned}$$

□

Exemple 4. *Pour $q_u L = \pi$, calculons l'élément de la matrice de couplage électron–phonon des niveaux $(1,1,1)$ et $(2,2,2)$. Nous avons*

$$J_1(u) = J_2(u) = J_3(u) = \frac{32\mathrm{i}}{15\pi}.$$

La valeur de l'élément de la matrice pour ces deux niveaux donne

$$\Phi_{\boldsymbol{q},j,k}^{\delta} = (J_l(u))^3 = 0.3132\mathrm{i}.$$

Notation

Ensembles et espaces mathématiques :

$\mathbb{N}$	ensemble des nombres naturels
$\mathbb{Z}$	ensemble des nombres relatifs
$\mathbb{R}$	ensemble des nombres réels
$\mathbb{C}$	ensemble des nombres complexes
$\mathcal{M}_{n,m}$	ensemble des matrices d'ordre (n, m)
$\mathcal{M}_n$	ensemble des matrices carrées d'ordre n
L^2	espace des fonctions de carré intégrable
L^∞	espace des fonctions bornées presque partout
H^β	espace de Sobolev d'indice β
$\mathcal{H}_n(\mathbb{R}^3)$	espace des états d'un système quantique

Symboles :

∂_t	dérivée temporelle
∂_x, ∂_y, ∂_z	dérivées spatiales
Δ	opérateur laplacien
$[.,.]$	commutateur
$\{.,.\}$	anti-commutateur
$\langle \quad \rangle$	moyenne d'un observable
$\lvert . \rvert$	module
$\mathrm{Tr}(.)$	trace
$C(.)$	contraction

Variables :

$r = (x, y, z)$	variable d'espace
t	variable du temps
ψ	vecteur d'état d'un système quantique
ψ^*	adjoint de ψ
ψ_j	fonction propre du niveau j
ρ	matrice densité
$S_{\mathbf{q}}$	matrice de densité assistée par les phonons
$\mathbf{E}$	champ électrique
$\mathbf{B}$	champ magnétique
$\mathbf{H}$	induction magnétique
$\mathbf{P}$	polarisation
$\mathbf{J}$	la dérivée temporelle de la polarisation $\mathbf{P}$

Opérateurs et paramètres quantiques :

$\mathcal{E}_j$	énergie du niveau j
ω_j	fréquence du niveau j
ω_{jk}	fréquence de transition entre les niveaux j et k
ω_0	fréquence propre de l'onde électromagnétique
ω_R	fréquence de Rabi
ω_g	fréquence du gap
$\omega_{\mathbf{q}}$	fréquence des phonons de mode $\mathbf{q}$
$E_{\mathbf{q}}$	énergie du phonon de vecteur $\mathbf{q}$
E_g	énergie du gap
$\hat{\psi}$	opérateur de champ d'annihilation
$\hat{\psi}^\dagger$	opérateur de champ de création
c_j, v_k	opérateurs d'annihilation des électrons respectivement des états j et k
$c_j^\dagger$, $v_k^\dagger$	opérateurs de création des électrons respectivement des états j et k
$\hat{\mathbf{X}}_j$	opérateur de déplacement
$\hat{\mathbf{p}}_j$	opérateur d'impulsion
$\mathbf{q}$	vecteur d'onde des phonons
$b_{\mathbf{q}}$	opérateur d'annihilation des phonons
$b_{\mathbf{q}}^\dagger$	opérateur de création des phonons
$\mathbf{Q}$	champ de polarisation
H_0	hamiltonien libre
H^L	hamiltonien de l'interaction laser–boîte quantique
H^{C}	hamiltonien de Coulomb
$H^{\mathrm{e-ph}}$	hamiltonien de l'interaction électron–phonon
H^{ph}	hamiltonien des phonons libres
E_0	matrice diagonale des énergies propres
$\mathbf{p}$	opérateur dipolaire
$\mathbf{M}$	matrice dipolaire
R	tenseur des paramètres de Coulomb
R_0	valeur caractéristique du paramètre de Coulomb
V^{C}	matrice de l'interaction de Coulomb dans le modèle de Bloch
$V^{\mathrm{e-ph}}$	potentiel de l'interaction électron–phonon
$G_{\mathbf{q}}$	matrice de couplage électron–phonon
$\Phi_{\mathbf{q}}$	matrice de couplage électron–phonon normalisée
$n_{\mathbf{q}}$	densité des phonons
$A(\rho, G_{\mathbf{q}}^*)$	matrice quadratique en ρ (voir la section 2.6.3)
$\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$	semi-groupes d'évolution
N_{c}	nombre de niveaux d'énergie dans la bande de conduction
N_{v}	nombre de niveaux d'énergie dans la bande de valence

Paramètres physiques :

e	charge de l'électron
c	vitesse de la lumière
v	vitesse de l'onde électromagnétique
$\hbar$	constante réduite de Planck
ϵ_0	permittivité du vide
ϵ_r	permittivité relative
μ_0	perméabilité du vide
μ_r	perméabilité relative
m_e	masse de l'électron
d	densité du réseau cristallin
κ	constante de Boltzmann
T	température
N_b	densité volumique des boîtes
t_r	temps de relaxation
$E_{\max}$	amplitude maximale du champ électrique

Mots clés. Boîtes quantiques, modèle de type Bloch, interaction de Coulomb, interaction électron–phonon, propriétés qualitatives des modèles de type Bloch, problème de Cauchy, méthode de splitting, couplage faible Maxwell-Bloch, transparence auto-induite, transfert de cohérence.

Résumé. Les boîtes quantiques sont des nanostructures confinées fortement suivant les trois directions de l'espace. Depuis quelques décennies, de nombreuses études sont consacrées à ces boîtes pour leurs propriétés électroniques et optiques intéressantes.
Dans cette thèse, nous modélisons le comportement électronique de boîtes quantiques par un modèle de type Bloch dérivé dans le formalisme de Heisenberg. La fermeture des équations du modèle aboutit à un modèle non-linéaire issu des interactions coulombiennes et des interactions entre les électrons et les phonons. Nous étudions les propriétés qualitatives de la solution des modèles de Bloch obtenus (trace, hermicité, positivité) ainsi que le problème de Cauchy associé au couplage semi-classique avec les équations de Maxwell. Nous dérivons également formellement des équations de taux à partir des modèles de Bloch non-linéaires. La discrétisation des modèles unidimensionnels de Maxwell–Bloch fait appel à une méthode de splitting (méthode par pas fractionnaires) pour les équations de Bloch préservant les propriétés qualitatives du modèle continu. La validation du modèle et l'étude de la pertinence de certaines simplifications sont effectuées grâce à des cas tests de transparence auto-induite et de transfert de cohérence.

Keywords. Quantum dots, Bloch type model, Coulomb interaction, electron–phonon coupling, qualitative properties of Bloch model, Cauchy problem, splitting method, Maxwell–Bloch weak coupling, self-induced transparency, coherence transfer.

Summary. Quantum dots are nanostructures confined in the three space dimensions. Since many decades, numerous studies have been devoted to these structures for their interesting electronic and optical properties.
In this thesis, we model the electronic behaviour of quantum dots thanks to a Bloch type model derived in the Heisenberg formalism. The closure of equations leads to a nonlinear model stemming from Coulomb and electron–phonon interactions. We study the qualitative properties of the obtained Bloch models (trace, hermicity and positiveness) and the Cauchy problem for the semi-classical model coupling Bloch and Maxwell equations to describe laser–quantum dot interaction. We derive also formally rate equations from the nonlinear Bloch equations. The discretizations of one-dimensional Maxwell–Bloch equations involve splitting methods for the Bloch equations, which enable the preservation of the qualitative properties of the continuous model. The validation of some simplification is performed thanks to self-induced transparency and coherence transfer test cases.

Bibliographie

[AC09] J. Andreasen and H. Cao. Finite-difference time-domain formulation of stochastic noise in macroscopique atomic systems. *IEEE Transactions On Antennas And Propagation*, 27(20) :4530–4535, 2009.

[AE87] L. Allen and J. H. Eberly. *Optical resonance and two-level atoms.* Dover, 1987.

[Bai09] M. Baira. *Propriétés optiques et modélisation des structures à base de boîtes quantiques pour l'émission à 1.3 μm.* Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.

[BB90] U. Bockelmann and G. Bastard. Phonon scattering and energy relaxation in two-, one- and zero-dimensional electron gases. *Physical. Review. B*, 42(14) :8947–8951, 1990.

[BBD02] C. Besse, B. Bidégaray, and S. Descombes. Order estimates in time of splitting methods for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 40(1) :26–40, 2002.

[BBFB+04] C. Besse, B. Bidégaray-Fesquet, A. Bourgeade, P. Degond, and O. Saut. A Maxwell–Bloch model with discrete symetries for wave propagation in nonlinear crystals : an application to KDP. *Mathematical Modeling and Numerical Analysis*, 38 :321–344, 2004.

[BBR01] B. Bidégaray, A. Bourgeade, and D. Reignier. Introducing physical relaxation terms in Bloch equations. *Journal of Computational Physics*, 170 :603–613, 2001.

[BCD04] B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, and P. Degond. From the Bloch model to the rate equations. *Discrete and Continuous Dynamical System A*, 11 :1–26, 2004.

[BCDG04] B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, E. Dumas, and M. Gisclon. From Bloch model to the rate equations II : The case of almost degenerate energy levels. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14 :1785–1817, 2004.

[BFK14] B. Bidegaray-Fesquet and K. Keita. A nonlinear Bloch model for Coulomb interaction in quantum dots. *Journal of Mathematical Physics*, 55 :021501, 2014.

[BGB+99] M.L. Bégué, A. Ghizzo, P. Bertrand, E. Sonnendrücker, and O. Coulaud. Two-dimensional semi-Lagrangian Vlasov simulations of laser-plasma interaction in the relativistic regime. *Journal of Plasma Physics*, 62 :367–388, 1999.

[Bid03] B. Bidégaray. Time discretizations for Maxwell–Bloch equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 19 :284–300, 2003.

[Bid06] B. Bidégaray-Fesquet. *Hiérarchie de modèles en optique quantique. De Maxwell–Bloch à Schrödinger non-linéaire.* Coll. Mathématiques et Applications. vol. 49, Springer, 2006.

[Bid10] B. Bidégaray-Fesquet. Positiveness and Pauli exception principle in raw Bloch equations for quantum boxes. *Annals of Physics*, 325 :2090–2102, 2010.

[BJ04] R. Bose and H. T. Johnson. Coulomb interaction energy in optical and quantum computing applications of self-assembled quantum dots. *Microelectronic Engineering*, 75(1) :43–53, 2004.

[Bou08] E. Bourgeois. *Couplage électron-phonon dans les semi-conducteurs dopés et ses applications à la supraconductivité.* PhD thesis, Université Claude Bernard-Lyon I, 2008.

[Boy92] R. W. Boyd. *Nonlinear Optics.* Academic Press, 1992.

[BP99] P. G. Bolcatto and C. R. Proetto. Shape and dielectric mismatch effects in semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, 59(19) :12487–12498, 1999.

[BS06] A. Bourgeade and O. Saut. Numerical methods for the bidimensionnal Maxwell–Bloch equations in nonlinear crystals. *Journal of Computational Physics*, 213(2) :823–843, 2006.

[BSTW91] H. Benisty, C. M. Solomayor-Torrès, and C. Weisbuch. Intrinsic mechanism for the poor luminescence properties of quantum-box systems. *Physical Review B*, 44(19) :10945–10948, 1991.

[BT12] B. Billaud and T. T. Truong. Quantum properties of spherical semiconductor quantum dots. *hal-00609707*, 2012.

[Cac01] V. Cachia. *La formule de Trotter–Kato : Approximation des semi-groupes en normes d'opérateur et de trace.* Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée, 2001.

[Cas99] F. Castella. On the derivation of a quantum Boltzmann equation from the periodic von-Neumann equation. *Mathematical Modeling and Numerical Analysis*, 33(2) :329–349, 1999.

[Cas01] F. Castella. From the von-Neumann equation to the quantum Boltzmann equation in a deterministic framework. *Journal of Statistical Physics*, 104(1/2) :387–447, 2001.

[Cas02] F. Castella. From the von-Neumann equation to the quantum Boltzmann equation II : identifying the Born series. *Journal of Statistical Physics*, 106(5) :1197–1220, 2002.

[CD12] F. Castella and E. Dumas. High frequency behaviour of the Maxwell–Bloch model with relaxations : convergence to the Schrödinger–Boltzmann system. *Journal of Hyperbolic Differential Equations*, 9(3) :355–401, 2012.

[CDL97a] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique quantique.* vol. 1, Hermann, 1997.

[CDL97b] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique quantique.* vol. 2, Hermann, 1997.

[CH90] T. Cazenave and A. Haraux. *Introduction aux problèmes d'évolution semi-linéaires.* Ellipses, 1990.

[CLM06] E. Cancès, C. Le Bris, and Y. Maday. *Méthodes Mathématiques en Chimie Quantique - Une Introduction.* Coll. Mathématiques et Applications vol. 53, Springer, 2006.

[CP02] F. Castella and A. Plagne. A distribution result for slices of sums of squares. *Mathematical Proceeding of the Cambridge Philosophic*, 132(1) :1–22, 2002.

[CP03] F. Castella and A. Plagne. Non-derivation of the quantum Boltzmann equation from the periodic Schrödinger equation. *Indiana University Mathematical Physics*, 51(4) :963–1016, 2003.

[CVC+05] S. Cronenberger, Y. Viale, O. Crégut, M. Gallart, B. Hönerlage, and P. Gilliot. Electron–hole relaxation through optical-phonon emission in CdTe/ZnTe quantum dots. *Applied Surface Science*, 247(1) :556–560, 2005.

[Das08] M. Dasguspta. *An Introduction to Quantum Field Theory.* School of Physics and Astronomy, University of Manchester, 2008.

[DR96] P. Donnat and J. Rauch. Global solvability of the Maxwell–Bloch equations from nonlinear optics. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 136(3) :291–303, 1996.

[DS12] E. Dumas and F. Sueur. Cauchy problem and quasi-stationnary limit for the Maxwell–Landau–Lifschitz and Maxwell–Bloch equations. *Annali della Scuola Normale Superiore de Pisa, classe di Science*, XI(3) :503–543, 2012.

[Dum05] E. Dumas. Global existence for Maxwell-Bloch systems. *Journal of Differential Equations*, 219(2) :484–509, 2005.

[Elb95] E. Elbaz. *Quantique.* Ellipses, 1995.

[FG11] E. Faou and B. Grébert. Hamiltonian interpolation of splitting approximations for nonlinear PDEs. *Fundations of Computational Mathematics*, 11 :381–415, 2011.

[FOS] E. Faou, A. Ostermann, and K. Schratz. Analysis of exponential splitting methods for inhomogeneous parabolic equations. *To appear in IMA Journal of Numerical Analysis.*

[Fro54] H. Frhlich. Electrons in lattice fields. *Advanced Physics*, 3(11) :325–361, 1954.

[Gau11] L. Gaudreau. *Manipulation cohérente de qubits de spin dans une boîte quantique triple.* Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke (Quebec), 2011.

[GH02] E. Gehrig and O. Hess. Mesoscopic spatiotemporel theory for quantum-dot lasers. *Physical Review A*, 65(033804) :1–15, 2002.

[GH03] E. Gehrig and O. Hess. *Spatio-Temporal Dynamics and Quantum Fluctuations in Semiconductor Lasers.* vol 189 of Tracts in Modern Physics, Springer, 2003.

[Gra08] T. Grange. *Relaxation et décohérence des polarons dans les boîtes quantiques de semi-conducteurs.* Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), 2008.

[GS70] H. M. Gibbs and R. E. Slusher. Peak amplification and breakup of a coherent optical pulse in a simple atomic absorber. *Physical Review Letters*, 24(12) :638–641, 1970.

[Hei26] W. Heisenberg. On the Relation between the Quantum Mechanics of Heisenberg, Born, and Jordan, and that of Schrödinger. *Annalen der Physik*, 79(4) :45–61, 1926.

[HK96] O. Hess and T. Kuhn. Maxwell-Bloch equations for spatially inhomogeneous semiconductors lasers. I . Theorical formulation. *Physical Review A*, 54(4) :3347–3359, 1996.

[HK09] H. Haug and S. W. Koch. *Quantum Theory of the optical and electronic properties of semiconductors.* World Scientific, 2009.

[HLK90] Y. Z. Hu, M. Lindberg, and S. W. Koch. Theory of optically excited intrinsic semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, 42(3) :1713–1723, 1990.

[HMR98] P. Helluy, S. Maire, and P. Ravel. Intégration numérique d'ordre élévé de fonctions régulières ou singulières sur un intervalle. *Comptes Rendus à l'Academie des sciences, Série I*, 327(1) :843–848, 1998.

[HP97] U. Hohenester and W. Pötz. Density matrix approach to nonequilibrium free-carrier screening in semiconductors. *Physical Review B*, 56(20) :13177–13189, 1997.

[HPD+09] M.B. Haider, J. L. Pitters, G. A. DiLabio, L. Livadaru, J. Y. Mutus, and R. A. Wolkow. Controlled coupling and occupation of silicon atomic quantum dots at room temperature. *Physical Review Letters*, 102 :046805, 2009.

[HRM99] U. Hohenester, F. Rossi, and E. Molinari. Few-particle effects in the optical spectra of semiconductor quantum dots. *Solid State Communications*, 111(4) :187–192, 1999.

[HV03] W. Hundsdorfer and J. G. Verwer. *Numerical solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.

[IS92] I. Inoshita and H. Sakaki. Electron relaxation in a quantum dot : significance of multiphonon processes. *Physical Review B*, 46(11) :7260–7263, 1992.

[JMR00] J-L. Joly, G. Métivier, and J. Rauch. Global solutions to Maxwell equations in a ferromagnetic medium. *Annals Henri Poincaré*, 1(2) :307–340, 2000.

[Joc02] F. Jochmann. Existence of solutions and a quasi-stationnary limit for a hyperbolic system describing ferromagnetism. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 34(2) :315–340, 2002.

[Kam05] C. Kammener. *Spectroscopie optique des boîtes quantiques uniques : Effets de l'environnnement*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie Paris VI, 2005.

[Kaw07] S. Kawaguchi. Perturbative approach to coulomb interaction in double quantum dot systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 76(10) :104704, 2007.

[Kit87] C. Kittel. *Theory of solids*. Second Revised Edition, John Wiley and Sons, 1987.

[LA97] X.-Q. Li and Y. Arakawa. Ultrafast energy relaxation in quantum dots through defect states : A lattice-relaxation approach. *Physical Review B*, 56(16) :10423–10427, 1997.

[LD98] D. Loss and D. P. DiVicenzo. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, 57(1) :120–126, 1998.

[Lou00] R. Loudon. *The Quantum Theory of Light*. Oxford Science Publications, 2000.

[LRS96] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, and M. Schur. *Ternary and Quaternary III-V compounds*. World Scientific, London, 1996.

[MH67] S. L. McCall and E. L. Hahn. Self-induced transparency by pulsed coherent light. *Physical Review letters*, 18(21) :908–911, 1967.

[MQ02] R. I. McLachlan and G. R. W. Quispel. Splitting methods. *Acta Numerical*, 11 :341–434, 2002.

[NM92] A. C. Newell and J. V. Moloney. *Nonlinear Optics*. Advanced Topics in the interdisciplinary Mathematical Sciences, Addison–Wesley, 1992.

[OAM99] K. Oshiro, K. Akai, and M. Matsuura. Size dependence of polaronic effects on an exicton in spherical quantum dots. *Physical Review B*, 59(16) :10850–10855, 1999.

[Paz83] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Application to Partial Differential Equations*. Applied Mathematical Sciences 44, Springer, 1983.

[Per01] N. Perret. *Propriétés optiques et mécanismes de relaxation de l'énergie des porteurs dans les boîtes quantiques.* Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke (Québec), 2001.

[Rei00] D. Reignier. *Couplage des équations de Maxwell avec les équations de Bloch pour la propagation d'une onde électromagnétique.* Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier–Toulouse III, 2000.

[RS72] M. Reed and B. Simon. *Functional Analysis, Methods of Modern Mathematical Physics, vol I.* Academic Press, New York, 1972.

[Sau03] O. Saut. *Étude numérique des non-linéarités d'un cristal par résolution des équations de Maxwell–Bloch.* Thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2003.

[Sau04] O. Saut. Computational modeling of ultrashort powerful laser pulses in a nonlinear crystal. *Journal of Computational Physics*, 197 :624–646, 2004.

[Sau05] O. Saut. Une méthode spectrale pour les équations de Maxwell–Bloch bidimensionnelles dans les cristaux non-linéaires. *Comptes rendus Mathématique*, 340(12) :927–932, 2005.

[SB07] O. Saut and A. Bourgeade. Propagation d'impulsions laser ultracourtes dans un cristal non linéaire. *ESAIM Proceedings*, 18 :153–162, 2007.

[SIM99] M. S. Sherwin, A. Imamoglu, and T. Montroy. Quantum computation with quantum dots and terahertz cavity quantum electrodynamics. *Physical Review A*, 60(5) :3508–3514, 1999.

[SKM94] J. Schilp, T. Kuhn, and G. Mahler. Electron-phonon quantum kinetics in pulse-excited semiconductors : Memory and renormalizations effects. *Physical Review B*, 50(8) :5435–5447, 1994.

[SSL94] M. Sargent, M. O. Scully, and W. E. Lamb. *Laser Physics.* Addison–Wesley, 1994.

[Str68] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3) :506–517, 1968.

[Sut97] D. Suter. *The physics of Laser-Atom Interactions.* Cambridge University Press, 1997.

[SZC00] R. Stauber, R. Zimmermann, and H. Castella. Electron-phonon interaction in quantums dots : A solvable model. *Physical Review B*, 62(11) :7336–7343, 2000.

[TMNA99] Y. Toda, O. Morikawi, M. Nishioka, and Y. Arakawa. Efficient carrier relaxation mechanism in InAs/GaAs self-assembled quantum dots based on the existence of continuum states. *Physical Review Letters*, 82(20) :4114–4117, 1999.

[Tro59] H. F. Trotter. On the product of semigroups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 10 :545–551, 1959.

[Uni05] Ohio University. Scientists find flaw in quantum dot construction. *Science Daily*, 15 February 2005.

[Via04] Y. Viale. *Étude de boîtes quantiques de CdZnTn : processus de relaxation d'énergie et de phase*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur (Strasbourg I), 2004.

[Wic50] G. C. Wick. The evaluation of the collision matrix. *Physical Review*, 80(2) :268–272, 1950.

[Yee66] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(3) :302–307, 1966.

[ZAG95] R. W. Ziolkowski, J. M. Arnold, and D. M. Gogny. Ultrafast pulse interaction with two-level atoms. *Physical Review A*, 52(4) :3082–3094, 1995.

[Zio97a] R. W. Ziolkowski. The incorporation of microscopic material models into the FDTD approach for ultrafast optical pulse simulations. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 45(3) :375–391, 1997.

[Zio97b] R. W. Ziolkowski. Realization of all optical triode and diode with a two-level-atom loaded diffraction grating. *Applied Optics*, 36(33) :8547–8556, 1997.