



Modélisation des condensats de polaritons dans les microcavités planaires

Hamis Gargoubi

► To cite this version:

Hamis Gargoubi. Modélisation des condensats de polaritons dans les microcavités planaires. Autre [cond-mat.other]. Université Montpellier; Faculté des sciences de Bizerte (Tunisie), 2016. Français. NNT : 2016MONTT327 . tel-01816983

HAL Id: tel-01816983

<https://theses.hal.science/tel-01816983>

Submitted on 15 Jun 2018

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.



THÈSE

Pour obtenir le grade de
Docteur

Délivré par l'**Université de Montpellier**

Préparée au sein de l'école doctorale **Information
Structures et systèmes (I2S)**
Et de l'unité de recherche **L2C-UMR 5221**

Spécialité : **Physique**

Présentée par **Hamis GARGOUBI**

**Modélisation des condensats de polaritons
dans les microcavités planaires**

Soutenue le 14/12/2016 devant le jury composé de

Alberto Bramati, Pr, Univ. Pierre et Marie Curie
Fadi Issam Baïda, Pr, Univ. de Franche-Comté
Kaïs Boujdaria, Pr, Univ. de Carthage
Sihem Jaziri, Pr, Univ. de Carthage
Thierry Guillet, Pr, Univ. de Montpellier
Brahim Guizal, Pr, Univ. de Montpellier

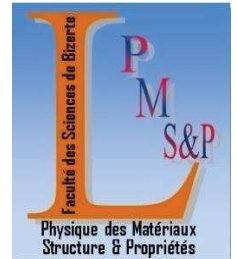
Président & Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Directrice de thèse
Co-directeur de thèse
Directeur de thèse





THÈSE

pour obtenir le grade de Docteur



Délivré par l'**Université De Carthage**

Faculté Des Sciences De Bizerte

Préparée au sein de l'école doctorale **Sciences, Vie et Matière**

Laboratoire de **Physique Des Matériaux :**
Structures Et Propriétés, Groupe Des Nanostructures

Spécialité: **Physique**

Présentée par **Hamis GARGOUBI**

Modélisation des condensats de polaritons dans les microcavités planaires

Soutenue publiquement le 14/12/2016, devant le jury composé de :

Alberto Bramati, Pr, Univ. Pierre et Marie Curie
Fadi Issam Baïda, Pr, Univ. de Franche-Comté
Kaïs Boujdaria, Pr, Univ. de Carthage
Sihem Jaziri, Pr, Univ. de Carthage
Thierry Guillet, Pr, Univ. de Montpellier
Brahim Guizal, Pr, Univ. de Montpellier

Président & Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Directrice de thèse
Co-directeur de thèse
Directeur de thèse

Remerciements

Cette thèse a été réalisée dans le cadre d'une co-tutelle entre l'université de Carthage et l'université de Montpellier. Elle est le résultat d'une collaboration entre le laboratoire de physique des matériaux, structures et propriétés de la faculté des sciences de Bizerte et le laboratoire Charles Coulomb. Ce travail a été financé par Campus France dans le cadre du programme de partenariat Hubert Curien et du ministère Tunisien de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique.

Les trois années de préparation de cette thèse m'ont permis de rencontrer plusieurs personnes qui ont ajouté à mes connaissances scientifiques et à ma "compréhension" de la vie et de moi-même. Je profite de ces lignes pour les remercier.

Je remercie d'abord ma directrice de thèse à la faculté des sciences de Bizerte, Sihem JAZIRI, pour le soutien scientifique et moral qu'elle m'a accordé tout au long de ces années de recherche.

Je remercie également mon directeur de thèse à l'université de Montpellier, Brahim GUIZAL, pour sa rigueur scientifique, sa pédagogie et son professionnalisme qui m'ont beaucoup appris. Je le remercie encore, pour toute l'aide qu'il m'a apportée.

Mes remerciements vont aussi à mon co-directeur de thèse à l'université de Montpellier, Thierry GUILLET. Je remercie Thierry profondément de m'avoir aidée à m'intégrer au sein de l'équipe de Charles Coulomb. Je le remercie également de m'avoir soutenue scientifiquement et de m'avoir rapprochée des expériences sur les polaritons. Et je le remercie finalement pour tous ses conseils avisés.

Je tiens à remercier aussi monsieur Jalloul BALTI, maître assistant à la faculté des sciences de Bizerte pour l'aide qu'il m'a apportée dans la partie

REMERCIEMENTS

numérique.

Je remercie les membres de mon jury d'avoir accepté d'évaluer mon travail.

Je remercie, tout d'abord le professeur Alberto BRAMATI de l'université Pierre et Marie Curie, d'avoir présidé le jury. Je le remercie d'avoir en même temps rapporté sur mon manuscrit.

Je remercie ensuite le professeur Fadi BAIDA de l'université de Franche-Comté, d'avoir rapporté sur mon manuscrit.

Et je remercie le professeur Kaïs BOUJDARIA de la faculté des sciences de Bizerte d'avoir accepté de participer à mon jury.

Merci à tous mes collègues au laboratoire de Bizerte pour leur soutien et leur bonne humeur.

Merci également à mes collègues au laboratoire Charles Coulomb pour leur serviabilité et pour la bonne ambiance que nous partageons. Merci aussi pour les différentes discussions enrichissantes que nous avons eues ensemble.

Merci à Rereao HAHE de m'avoir communiqué les résultats expérimentaux de sa thèse sur lesquels j'ai travaillé.

Je n'oublie pas de remercier les formidables personnes que j'ai connues à Montpellier, merci d'avoir été tellement généreux et de m'avoir aidée quand j'ai eu besoin d'aide.

J'adresse mes remerciements les plus cordiaux aux membres de ma famille sans qui je ne serais pas arrivée jusqu'à la fin de cette thèse. Merci pour tout votre amour et soutien. Ce manuscrit vous est dédié.

Finalement, merci à tous ceux qui m'ont soutenue, de près...ou de loin !

Table des matières

Remerciements	i
Introduction générale	1
1 État de l’art expérimental et théorique des polaritons de microcavité	6
1.1 Polaritons de microcavité	7
1.1.1 Microcavité semiconductrice et modes photoniques . .	8
1.1.2 L’exciton de microcavité	15
1.1.3 Couplage fort exciton-photon : Le polariton de microcavité	21
1.2 Propriétés d’émission des polaritons de microcavités	25
1.2.1 Le condensat de Bose-Einstein en physique statistique .	25
1.2.2 Génération des polaritons	26
1.2.3 Processus de gain et de perte dans un condensat	27
1.2.4 Laser à polaritons versus laser à photons	28
1.3 Modèles théoriques : Boltzmann versus Gross-Pitaevskii	29
1.3.1 Modèle quantique de Gross-Pitaevskii	30
1.3.2 Modèle semi-classique de Boltzmann	32
1.4 Géométries d’excitation optique	33
2 Implémentation numérique du modèle basé sur l’équation de G.P	37
2.1 Stratégies numériques pour l’équation de Gross-Pitaevskii . . .	38
2.2 Schéma numérique et détails de l’implémentation	40
2.3 Étude de la stabilité et de la convergence du schéma	44

TABLE DES MATIÈRES

2.4	Validation du code de calcul	48
3	Seuil de condensation et stationnarité	54
3.1	État de l'art	55
3.2	Étude d'un cas d'école sous excitation continue en grand spot	57
3.2.1	Comportement aux alentours du seuil de condensation	57
3.2.2	Nouvelle définition du seuil de condensation dans les simulations	59
3.2.3	Temps d'établissement du régime permanent	63
3.3	Effet de la taille du spot sur le seuil de condensation	64
3.3.1	Microcavité CdTe	65
3.3.2	Microcavité ZnO	68
3.3.3	État de l'art des instabilités	70
3.4	Seuil de condensation sous excitation impulsionnelle	72
4	Modélisation dynamique d'un condensat d'une microcavité ZnO	76
4.1	Mise en évidence de la condensation dans une microcavité ZnO	77
4.1.1	Microcavité ZnO et modes polaritoniques	77
4.1.2	Spécificités du pompage optique	78
4.1.3	Choix de l'expérience modélisée	78
4.2	Modélisation Gross-Pitaevskii	82
4.2.1	Paramètres	82
4.2.2	Étude des différents régimes de condensation	83
4.2.3	Étude des différents mécanismes de formation du condensat	87
4.2.4	Étude de la dynamique temporelle du condensat	88
4.2.5	Comparaison avec l'expérience : spectre intégré dans le temps	90
4.2.6	Dynamique spatiale sous le spot	91
4.2.7	Investigation des instabilités spatiales et temporelles	94
	Conclusion générale	97
A	Principe de la méthode Runge-Kutta 4	100

TABLE DES MATIÈRES

B Data de convergence	103
Résumé	107
Bibliographie	109

Introduction

Les polaritons excitoniques sont des bosons composites issus du couplage fort entre les excitons d'un semi-conducteur et les photons. Ce couplage fort lumière-matière et la façon de l'obtenir ne sont pas des notions évidentes. D'abord, la réalisation du couplage fort nécessite des structures spécifiques : généralement, microcavités semiconductrices [1, 2, 3, 4]. Dans ces structures, un mode photonique peut être sélectionné grâce à une cavité optique créée avec deux miroirs spécifiques appelés miroirs de Bragg. Également, un exciton peut être obtenu en insérant une couche semiconductrice à l'intérieur de la cavité. En assimilant, dans une image classique, les oscillations d'un photon dans la cavité à un premier oscillateur et la paire électron-trou, l'exciton du semi-conducteur, à un second oscillateur, nous pouvons voir les polaritons de cavité comme les modes propres de vibration de ces oscillateurs fortement couplés grâce à la structure qui leur a donné naissance. Étant des particules bosoniques (à spin entier), les polaritons peuvent connaître une phase de condensation de Bose-Einstein.

En effet, un condensat de Bose-Einstein est un état de la matière résultant d'une transition de phase qui se produit à l'échelle quantique "quand", une "densité suffisante" de bosons non dégénérés, condense dans un état quantique macroscopique. Cette prédiction mathématique des physiciens Satyendranath Bose et Albert Einstein datant de 1924, n'a été mise en évidence expérimentalement que soixante-dix ans après, en 1995, par Eric Cornell et Carl Wieman dans un système d'atomes de rubidium, puis, par Wolfgang Ketterle pour des atomes de sodium [5, 6]. Parallèlement, dans la physique des semi-conducteurs en 2006, une condensation des polaritons excitoniques dans une microcavité CdTe a été mise en évidence pour la première fois [7]. Ici, l'avantage majeur est l'utilisation de montages expérimentaux beaucoup

INTRODUCTION

plus simples. De plus, comme la température de condensation est inversement proportionnelle à la masse du boson, les polaritons excitoniques, avec leur masse très légère (10^{-5} fois la masse d'un électron libre), présentent une bonne alternative pour une condensation à des températures allant de quelques Kelvins à l'ambiante selon la nature du semi-conducteur de la couche active (devant des températures allant du nano-Kelvin au micro-Kelvin en atomique) [8, 9, 10, 1]. Notons de plus que ces condensats peuvent être créés soit via une excitation non résonante générant un grand nombre de polaritons incohérents, soit via une excitation laser résonante, créant directement le condensat et lui imprimant son profil et sa cohérence de phase.

À cause de la faible durée de vie des polaritons (de l'ordre de quelques pico-secondes), et des interactions répulsives dues à la fraction excitonique, les condensats créés par une excitation non-résonante dans les semi-conducteurs sont, contrairement aux condensats atomiques, des systèmes hors équilibre [11]. En effet, le pompage est indispensable pour alimenter le condensat et maintenir sa population. Ceci se fait par l'intermédiaire d'un réservoir de particules (électrons, trous, excitons, polaritons non condensés), crée suite au pompage, en interaction avec lui même et avec son environnement, notamment, les phonons du réseau cristallin du semi-conducteur. Les interactions des polaritons de cavité avec les différentes particules du système conduisent à des processus de relaxation capables de les transporter du réservoir vers le condensat. Ces processus ne peuvent assurer le gain dans le condensat que si elles se passent pendant un temps plus court que la durée de vie des polaritons. Ainsi, un état stable du condensat apparaît comme un équilibre permanent entre les gains et les pertes.

L'intérêt porté depuis les dernières décennies à la condensation des polaritons revient d'une part, à leurs propriétés d'émission prometteuses d'un effet laser à des puissances plus faibles que celle nécessaires pour avoir le laser photonique ordinaire. D'autre part, à leur contrôlabilité par la géométrie d'excitation dans le cas d'un pompage optique ouvrant la voie à une nouvelle génération de dispositifs opto-polaritoniques [12, 13, 14].

Les condensats sont créés sur des dimensions dans le plan qui sont finies, soit très focalisées (quelques micromètres), soit un peu plus étendues (quelques dizaines de micromètres), et la dynamique spatiale est très im-

INTRODUCTION

portante dans la génération du condensat. L'équilibre permanent doit alors s'établir finalement entre les gains d'une part, et les pertes par émission ainsi que le transport radial d'autre part. La nature hors d'équilibre est donc spatiale autant que temporelle. Ce point a beaucoup moins été exploré théoriquement, en particulier dans le cas de la dynamique à 2D et résolue en temps. *L'objectif de cette thèse est de développer les outils théoriques et numériques pour comprendre et interpréter cette dynamique spatiale et temporelle.*

Théoriquement, la condensation de Bose-Einstein est décrite par plusieurs modèles. Nous allons nous intéresser dans cette thèse au modèle quantique Gross-Pitaevskii généralisé [15, 2]. Ce dernier modèle couple deux équations qui décrivent, dans l'espace réel, l'évolution spatiale et temporelle de la fonction d'onde du condensat et de la densité du réservoir non condensé. Quand la première équation correspond à l'équation de Schrödinger à laquelle se rajoutent essentiellement un terme non linéaire et des termes complexes décrivant les gains et les pertes. La seconde équation est inspirée de l'équation de Boltzmann semi-classique. Elle résume dans un seul terme les détails des différents processus de relaxation explicités dans le modèle d'origine [16, 17].

La question du seuil des populations nécessaires pour avoir un condensat de polaritons est une grande question. Expérimentalement, le seuil *en population initialement créée* peut être reconnu en mesurant la dépendance du signal des polaritons de la puissance de pompage. Théoriquement, alors qu'elle a été très peu abordée dans le cadre du modèle de Boltzmann [17, 18, 10], la question du seuil n'a jamais été étudiée en détails dans le cadre du modèle Gross-Pitaevskii.

En effet, le modèle Gross-Pitaevskii est un modèle riche. Il permet de suivre la dynamique du condensat et d'accéder à plusieurs de ces propriétés cruciales. D'une part, ce modèle permet d'accéder à la contribution des différentes énergies (potentielle, cinétique, etc) dans l'énergie totale du condensat. D'autre part, il permet de comprendre l'effet de stimulation sur la répartition des populations dans le système.

Nous étudions dans cette thèse la dynamique spatiale, à 2D, et temporelle de formation des condensats de polaritons. En se basant sur le modèle Gross-Pitaevskii, nous cherchons dans un premier temps, à travers le cas d'école

INTRODUCTION

d'une microcavité CdTe sous un grand spot de pompage, à comprendre le comportement du condensat en fonction des paramètres d'excitation et de répondre à la question sur le seuil sous différentes configurations. Puis nous essayons d'exploiter nos connaissances pour la simulation des résultats expérimentaux sur une condensation de polaritons d'une microcavité ZnO soumise à une excitation focalisée. Le manuscrit est organisé comme suit :

Dans le premier chapitre nous donnons les outils nécessaires pour la compréhension des polaritons de microcavité. D'abord, nous expliquons le confinement des excitons et des photons et la formation des polaritons dans une microcavité. Ensuite, nous regardons les polaritons en phase de condensation de Bose-Einstein : nous expliquons le mécanisme de leur formation et leurs propriétés d'émission. Ensuite, nous présentons les principaux modèles théoriques qui décrivent la dynamique des condensats, notamment, celui que nous adoptons dans ce travail, le modèle Gross-Pitaevskii. Et, nous expliquons finalement l'influence de la géométrie d'excitation sur la formation d'un condensat.

Dans le second chapitre, nous proposons un schéma numérique basé sur la combinaison de la méthode des différences finies à la méthode Runge-Kutta 4 pour la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii dans le temps, et à deux dimensions dans l'espace. Nous justifions la stabilité et la convergence de notre schéma. Puis nous le validons à travers des tests comparant nos calculs à des résultats existant dans la littérature.

Dans le troisième chapitre, nous étudions les aspects du seuil de la condensation des polaritons dans une microcavité CdTe. Sous excitation continue, en se basant sur notre étude dynamique, nous mettons en évidence la dynamique d'établissement du régime permanent. Nous proposons une nouvelle approche en se basant sur l'évolution de l'énergie propre du condensat en régime permanent, la self-énergie, en fonction de la puissance de pompage. Et nous caractérisons le comportement du condensat aux alentours de ce seuil à travers le calcul du temps d'établissement du régime permanent. Ensuite, nous reprenons l'étude du seuil en modifiant la configuration du pompage. Notamment, en jouant sur la taille du spot de pompage optique, nous repérons, conformément à un résultat expérimental récent, une baisse du seuil de condensation avec l'augmentation de la taille du spot.

Dans le dernier chapitre, nous simulons les résultats expérimentaux de condensation de polaritons d'une microcavité ZnO. Nous analysons les différents régimes de condensation et nous calculons la valeur du seuil. Nous suivons la dynamique temporelle de la condensation et nous soulignons l'importance du régime transitoire. Nous suivons également la dynamique spatiale sous le spot où nous identifions les principaux mécanismes de pertes. Finalement, nous essayons de comprendre l'origine des anisotropies de propagation qui apparaissent dans les expériences.

Finalement, nous récapitulons l'essentiel des résultats dans la conclusion générale où nous discutons aussi les éventuelles perspectives de ce travail.

Chapitre 1

État de l'art expérimental et théorique des polaritons de microcavité

Sommaire

1.1	Polaritons de microcavité	7
1.1.1	Microcavité semiconductrice et modes photoniques	8
1.1.2	L'exciton de microcavité	15
1.1.3	Couplage fort exciton-photon : Le polariton de microcavité	21
1.2	Propriétés d'émission des polaritons de microcavités	25
1.2.1	Le condensat de Bose-Einstein en physique statistique	25
1.2.2	Génération des polaritons	26
1.2.3	Processus de gain et de perte dans un condensat	27
1.2.4	Laser à polaritons versus laser à photons	28
1.3	Modèles théoriques : Boltzmann versus Gross-Pitaevskii	29
1.3.1	Modèle quantique de Gross-Pitaevskii	30
1.3.2	Modèle semi-classique de Boltzmann	32
1.4	Géométries d'excitation optique	33

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

Dans ce premier chapitre, nous fournissons les outils nécessaires à la compréhension des polaritons de microcavité ainsi que leurs propriétés collectives en phase de condensation de Bose-Einstein. Dans une première partie, nous introduisons les polaritons de microcavité en passant par les propriétés de leurs briques de base : les excitons et les photons de microcavité. Puis, dans une seconde partie, nous regardons les polaritons en phase de condensation de Bose-Einstein et nous expliquons les mécanismes qui gouvernent cette phase. Cela nous permettra par la suite de comprendre l'origine des différents signaux émis par la microcavité et les différentes phases qu'ils représentent. Dans la troisième partie, nous présentons le modèle théorique de Gross-Pitaevskii, notamment, sa version généralisée élaborée pour l'étude des condensats de polaritons hors équilibre. Dans ce contexte, nous abordons l'influence de la géométrie du spot d'excitation sur la formation et la manipulation des condensats.

1.1 Polaritons de microcavité

Une microcavité Fabry-Pérot est une structure planaire permettant de confiner une onde électromagnétique et de sélectionner son énergie suivant des modes bien déterminés. Une telle structure est composée de deux miroirs parallèles M_1 et M_2 séparés par un milieu diélectrique d'indice n_c et d'épaisseur L_c de l'ordre du micromètre, d'où le préfixe micro pour cavité. Une microcavité semiconductrice est aussi une microcavité de type Fabry-Pérot à miroirs spécifiques. La structure typique d'une microcavité semiconductrice est schématisée dans la figure (1.1). La structure comporte généralement, comme miroirs, deux empilements périodiques, appelées *miroirs de Bragg*, dont les périodes sont deux couches diélectriques d'indices de réfraction n_a et n_b . Dans la cavité créée, on insère une couche semiconductrice, la couche active dont les excitons se couplent au mode de cavité. Généralement, l'exciton de la microcavité est un exciton 2D confiné dans un puits quantique. Nous allons nous intéresser dans ce travail aux excitons (2D) d'un puits quantique CdTe, puis, aux excitons (3D) d'une microcavité à couche active massive en ZnO :

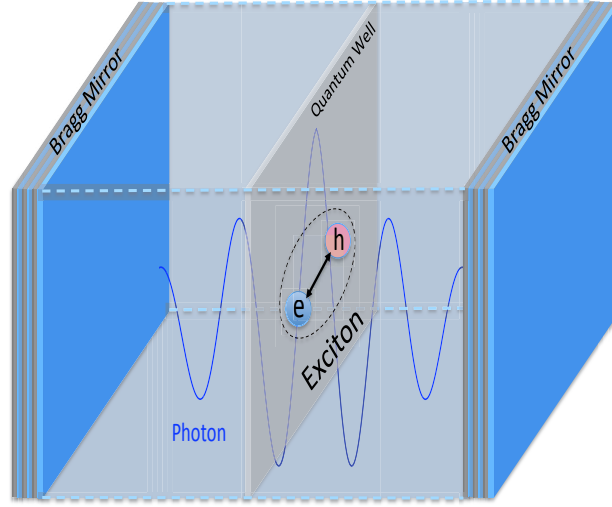


FIGURE 1.1 – Structure typique d’une microcavité semiconductrice.

bien que les paramètres dans chaque système sont différents, la physique des polaritons associés reste la même.

1.1.1 Microcavité semiconductrice et modes photoniques

Cavité Fabry-Pérot

Dans une image simple, nous considérons une cavité Fabry-Pérot où les deux miroirs M_1 et M_2 sont supposés d’épaisseurs très fines ayant chacune deux coefficients en intensités de réflexion et de transmission (R_1, T_1) et (R_2, T_2) respectivement. L’intensité normalisée du champ total transmis par la cavité après une infinité d’allers-retours de l’onde incidente entre les deux miroirs (voir figure (1.2)) est donnée par [19]

$$T_{FP} = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)}{(1 - \sqrt{R_1 R_2})^2} \frac{1}{1 + \frac{4\sqrt{R_1 R_2}}{(1 - \sqrt{R_1 R_2})^2} \sin^2(\frac{\phi}{2})}, \quad (1.1)$$

où ϕ est le déphasage entre deux ondes transmises, dû à la différence de marche δ

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda_c} \delta = \frac{2\pi}{\lambda_c} 2n_c L_c \cos \theta_c, \quad (1.2)$$

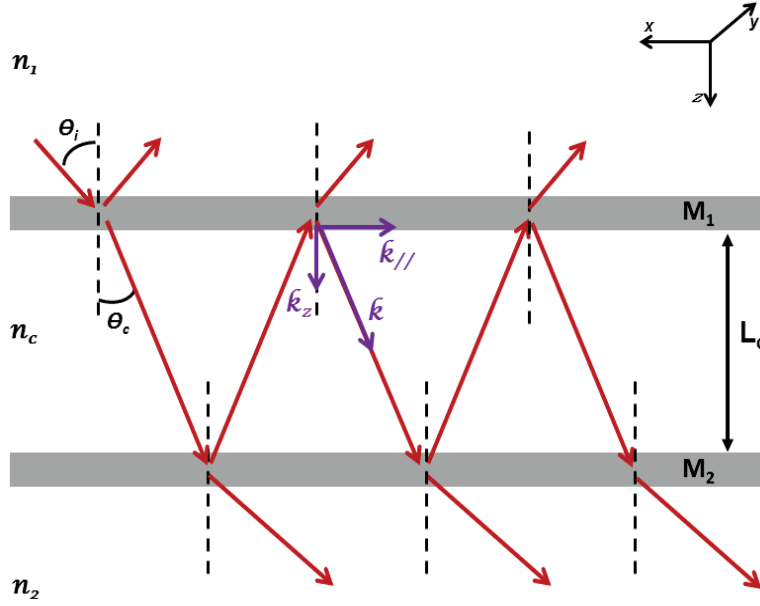


FIGURE 1.2 – Principe d'une cavité Fabry-Pérot.

avec λ_c la longueur d'onde d'utilisation, n_c l'indice (θ_c l'angle) de réfraction à l'intérieur de la cavité et L_c la largeur de la cavité. Le coefficient de transmission de la cavité est relié à celui de réflexion par la relation simple $T_{FP} + R_{FP} = 1$ (en l'absence de pertes). Dans le cas où l'ensemble des ondes transmises par la cavité est en interférence constructive nous obtenons les modes de la cavité. Ces modes correspondent donc à des minima de réflexion et des maxima de transmission (voir figure (1.3)). Ainsi, d'après les deux équations (1.1) et (1.2), la composante suivant z , du vecteur $\vec{k}$ de l'onde incidente, doit remplir la règle de quantification suivante

$$k_z = \frac{p\pi}{L_c}, \quad (1.3)$$

où p est un entier. Par conséquent, les modes de résonance de la cavité apparaissent aux longueurs d'ondes

$$\lambda = p\lambda_c = 2n_c L_c \cos \theta_c. \quad (1.4)$$

Particularités des miroirs de Bragg

Comme expliqué ci-dessus, les microcavités semi-conductrices sont des microcavités de type Fabry-Pérot à deux miroirs de Bragg. Un miroir de Bragg

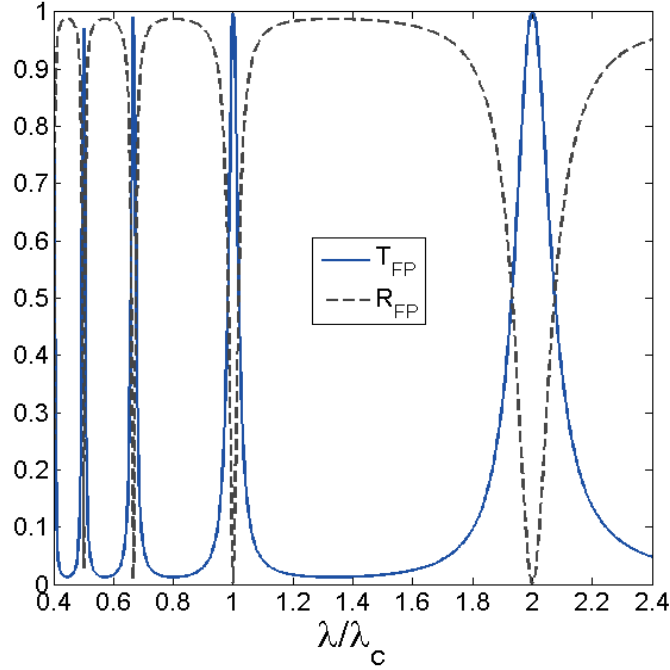


FIGURE 1.3 – Réflectivité R_{FP} et transmission T_{FP} , sous incidence normale, d'une cavité Fabry-Pérot d'épaisseur $L_c = \frac{\lambda_c}{n_c}$ à deux miroirs de coefficients identiques $R_1 = R_2 = 0.8$.

est un miroir interférentiel : des interférences destructives en transmission et constructives en réflexion se produisent à travers les N périodes de couches semi-conductrices d'indices (n_a, n_b) et d'épaisseurs (e_a, e_b) (voir figure (1.4)). La condition d'interférence détermine la condition sur les épaisseurs des couches et nous obtenons sous incidence normale [20]

$$n_a e_a + n_b e_b = p \frac{\lambda_0}{2}, \quad (1.5)$$

où λ_0 est la longueur d'onde incidente. Par conséquent, le signal total réfléchi par le miroir présente un maximum sur une bande spectrale autour de λ_0 (voir figure (1.5)). Cette bande représente la bande des modes photoniques interdits dans la structure. Elle est analogue à la bande interdite d'un semi-conducteur et est appelée la "stop-band". Sa largeur en énergie est fonction du contraste d'indice

$$\Delta_{SB} = \frac{2E_0 |n_a - n_b|}{\pi n_{eff}}, \quad (1.6)$$

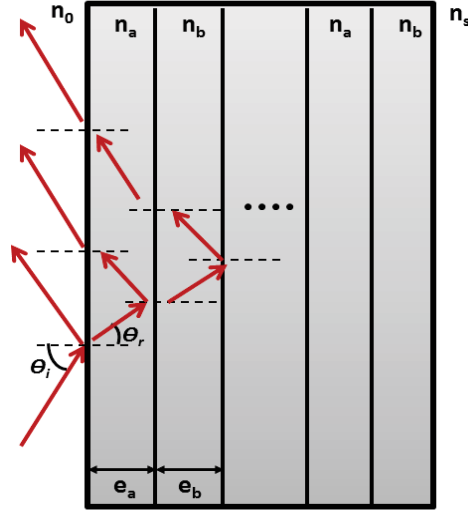


FIGURE 1.4 – Schéma d'un Miroir de Bragg ($n_a < n_b$).

avec

$$E_0 = \frac{hc}{\lambda_0}$$

et

$$n_{eff} \approx \frac{n_a e_a + n_b e_b}{e_a + e_b}.$$

Dans ce cas, différemment du cas d'un miroir simple, la détermination des coefficients de réflexion et de transmission relatifs à un seul miroir de Bragg nécessite un calcul semi-analytique par la méthode des matrices de transfert. Le coefficient de réflexion d'un miroir de Bragg relatif à la fréquence centrale λ_0 est donné sous incidence normale par la relation [21]

$$R(\lambda_0) = \left(\frac{1 - \frac{n_s}{n_0} \left(\frac{n_a}{n_b} \right)^{2N}}{1 + \frac{n_s}{n_0} \left(\frac{n_a}{n_b} \right)^{2N}} \right)^2, \quad (1.7)$$

où n_0 est l'indice du milieu d'incidence et n_s celui du milieu de sortie. D'après les équations (1.5), (1.6) et (1.7), nous dégagons les trois propriétés suivantes pour la réflectivité d'un miroir de Bragg :

- Plus les épaisseurs des couches sont élevées, plus la longueur d'onde centrale de la "stop-band" augmente et cette dernière se décale donc vers les basses énergies.

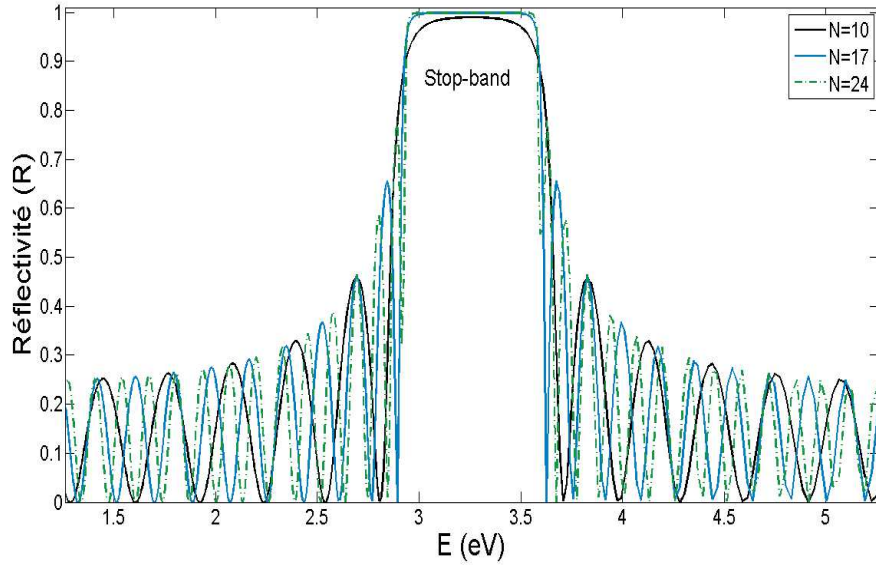


FIGURE 1.5 – Influence du nombre de périodes N sur la réflectivité d'un miroir de Bragg, sous incidence normale pour une période SiO_2/HfO_2 : $n_a = 1.47$, $n_b = 1.99$, $n_0 = n_s = 1$ et $n_a e_a = n_b e_b = \frac{\lambda_0}{4}$, $\lambda_0 = 380nm$.

- Plus le contraste d'indice est élevé, plus la "stop-band" est large.
- Pour $n_a < n_b$, plus le nombre N de paires du miroir est élevé, plus la réflectivité maximale $R(\lambda_0)$ de celui-ci se rapproche de sa valeur maximale 1. Cette propriété est illustrée dans la figure (1.5).

La longueur de pénétration d'une onde incidente dans les couches d'un miroir dépend aussi du contraste d'indice, elle est donnée par

$$L_{DBR} = \frac{\lambda_0}{4} \frac{n_a n_b}{n_0^2 (n_b - n_a)}.$$

Microcavité à miroirs de Bragg

Dans le contexte du couplage fort, l'intérêt de l'utilisation des miroirs de Bragg pour la conception de la cavité Fabry-Pérot réside dans les propriétés de réflexion intéressantes de ces derniers : essentiellement, l'optimisation du maximum de réflectivité en fonction de la longueur d'onde et la sélectivité du meilleur mode de cavité à travers son positionnement dans la stop-band. En effet, c'est de cette réflectivité que dépend une caractéristique importante d'une microcavité qui est son facteur de qualité. Ce dernier facteur est pro-

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

portionnel au nombre moyen d'allers-retours qu'effectue un photon dans la cavité avant de s'en échapper. Il est défini par le rapport entre l'énergie du mode et sa largeur à mi-hauteur et est donné par

$$Q = \frac{E_c}{\delta E_c} = p\pi \frac{\sqrt{\sqrt{R_1 R_2}}}{1 - \sqrt{R_1 R_2}}.$$

lorsque les réflectivités R_1 et R_2 s'approchent de 100%, le facteur de qualité Q augmente fortement. Dans la pratique, il est souvent limité par des facteurs extrinsèques liés à la qualité de fabrication des échantillons. De plus, la connaissance de ce facteur donne accès à un paramètre important du système qui est la durée de vie moyenne d'un photon de microcavité τ_c : ce dernier influe directement sur la durée de vie des polaritons issus du couplage fort avec les excitons. En améliorant la valeur de Q , la valeur de τ_c augmente

$$\tau_c = \frac{\hbar Q}{E_c}.$$

D'autre part, les épaisseurs des couches du miroir de Bragg données par l'expression (1.5) doivent être adaptées à l'épaisseur L_c de la cavité. Ainsi, la longueur d'onde de résonance des miroirs λ_0 doit vérifier $\lambda_0 \simeq \lambda_c$. La largeur spectrale du mode de cavité γ_c est donnée par

$$\gamma_c = \frac{v}{2L_{eff}} \frac{1 - \sqrt{R_1 R_2}}{\sqrt{\sqrt{R_1 R_2}}}, \quad (1.8)$$

où $v = \frac{c}{n_c}$ la vitesse de phase de l'onde confinée et $L_{eff} = L_c + L_{DBR_1} + L_{DBR_2}$ la largeur effective de la couche active. D'après l'équation (1.8), nous constatons que pour un maximum de réflexion, i.e, dans la bande interdite, nous obtenons le mode le plus fin. Un exemple de mode de microcavité à miroirs de Bragg est donné dans la figure (1.6). Ce dernier illustre bien un creux de réflectivité dans la stop-band correspondant au mode de la cavité. Les minimas secondaires plus larges spectralement correspondent aux modes de fuites appelés modes de Bragg. Nous rappelons que le nombre de modes de la cavité est déterminé par son épaisseur (voir equation (1.4)).

Relation de dispersion des modes photoniques

La microcavité planaire permet de sélectionner les photons suivant l'axe des

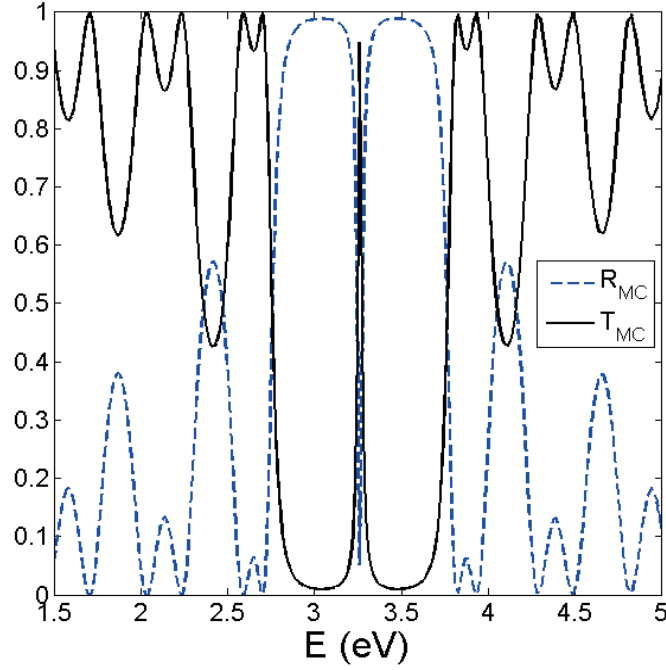


FIGURE 1.6 – Mode nu d’une microcavité ZnO à deux miroirs de Bragg identiques de 5 périodes SiO_2/HfO_2 ($n_a = 1.47 / n_b = 1.99$), sous incidence normale, en l’absence de résonances excitoniques.

z , dans ce cas, la relation de dispersion du mode photonique de résonance se met sous la forme :

$$E_{ph}(k_{ph\parallel}) = \frac{\hbar c}{n_c} k = \frac{\hbar c}{n_c} \sqrt{k_{ph\parallel}^2 + k_z^2}, \quad (1.9)$$

où, sous incidence normale, la composante k_z du vecteur d’onde s’écrit :

$$k_z = \frac{2\pi n_c}{\lambda_c},$$

La relation (1.9) peut s’exprimer également en fonction de l’angle d’incidence comme, $k_{ph\parallel} = k \sin(\theta_c)$ et $n_1 \sin(\theta_i) = n_c \sin(\theta_c)$ (voir figure (1.2)). Une telle expression est notamment utile pour les expériences de photoluminescence résolues en angle. Dans la région des vecteurs d’ondes où $k_{\parallel} \ll k_z$ nous obtenons pour l’expression (1.9) :

$$E_{ph}(k_{ph\parallel}) = E_{ph}(k_{ph\parallel} = 0) \sqrt{1 + \frac{k_{ph\parallel}^2}{k_z^2}} \simeq E_{ph}(k_{ph\parallel} = 0) + \frac{\hbar^2 k_{ph\parallel}^2}{2m_{ph}}$$

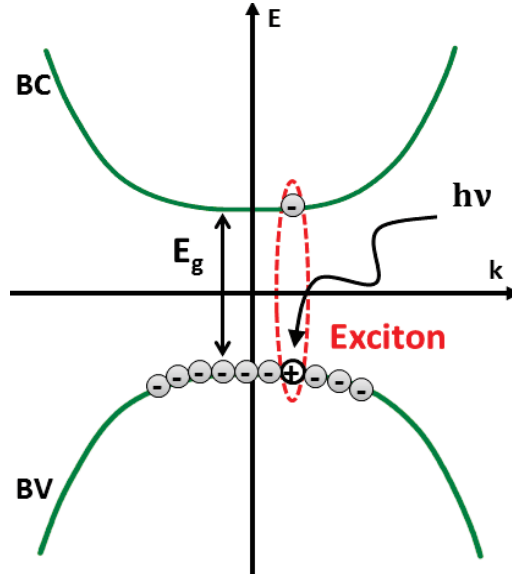


FIGURE 1.7 – Création d'un exciton de semiconducteur suite à une excitation avec un photon d'énergie $h\nu$.

où l'approximation de la masse effective peut être appliquée pour attribuer une masse pour le photon de la microcavité : cette masse effective est très faible, cinq ordres de grandeurs plus faible que celle d'un électron libre ($\sim 10^{-5}m_0$) [1]

$$\frac{1}{m_{ph}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{ph}(k_{ph\parallel} = 0)}{\partial k_{ph\parallel}^2} = \frac{c^2}{n_c^2} \frac{1}{E_{ph}(k_{ph\parallel} = 0)} \quad (1.10)$$

1.1.2 L'exciton de microcavité

Définition

Un exciton est un état lié électron-trou en interaction Coulombienne. Il est formé suite à l'excitation des électrons de la bande de valence d'un semiconducteur. Cette excitation se traduit généralement par l'absorption d'un photon d'énergie supérieure à celle du gap (bande interdite) du semiconducteur E_g et le passage de l'électron vers la bande de conduction. Autrement dit, l'apparition d'un état vacant chargé positivement, le trou, dans la bande de valence (voir figure (1.7)). Nous rappelons que ce travail porte autant sur les polaritons issus d'excitons 2D dans les puits quantiques CdTe, que sur les

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

excitons 3D dans le massif.

Relation de dispersion de l'exciton d'un matériau massif

Avec l'approximation de la masse effective, l'hamiltonien excitonique s'écrit sous la forme

$$H_{exc} = H_e + H_h + V_C, \quad (1.11)$$

où H_e est l'hamiltonien de l'électron donné par

$$H_e = \frac{P_e^2}{2m_e^*} + E_g$$

et H_h celui du trou, donné par

$$H_h = \frac{P_h^2}{2m_h^*}$$

avec $(P_{e,h}^2/2m_{e,h}^*)$ et $m_{e,h}^*$ le terme d'énergie cinétique et la masse effective de l'électron (du trou) respectivement. Le potentiel V_C , représente l'interaction coulombienne

$$V_C = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon |r_e - r_h|}$$

où ε est la constante diélectrique du semiconducteur et $r_{e,h}$ les coordonnées de l'électron (le trou) (e est la charge électrique). Le système électron-trou liés est assimilable à l'atome d'hydrogène, ainsi, une masse réduite μ_{exc} peut lui être attribuée. Finalement, en fonction des coordonnées du centre de masse de l'exciton R_{exc} et celle relatives à la distance r_{exc} , l'hamiltonien (1.11) se réduit à [22]

$$H_{exc} = E_g + \frac{P_{R_{exc}}^2}{2M_{exc}} + \frac{p_{r_{exc}}^2}{2\mu_{exc}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon |r_{exc}|},$$

avec la masse réduite $\mu_{exc} = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ et $M_{exc} = m_e^* + m_h^*$ la masse effective totale des deux particules électron-trou. Et, à 3D, les niveaux d'énergie de l'exciton sont donnés par

$$E_{exc}^n(K_{exc}) = E_g + \frac{\hbar^2 K_{exc}^2}{2M_{exc}} + E_b^n,$$

avec, K_{exc} le vecteur d'onde du centre de masse de l'exciton et E_b^n l'énergie de liaison de l'exciton, pour un état quantique n , donnée par

$$E_b^n = -\frac{R_y^{3D}}{n^2}, \quad (n=\text{est un entier non nul})$$

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

TABLE 1.1 – Paramètres des excitons 3D dans les semiconducteurs GaAs, GaN, ZnO et CdTe [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29].

Semiconducteur	GaAs	GaN	ZnO	CdTe
Rayon de Bohr a_B (nm)	13.6	2.8	1.4	7
Énergie de liaison E_b^{1s} (meV)	4.8	25	60	10.8
Gap à 300K E_g (meV)	1420	3420	3370	1440
Paramètre de maille a (nm)	0.565	0.319	0.325	0.64
Énergie de l'exciton E_{exc}^{1s} (meV)	1515	3487	3374	1596

où, de façon analogue au Rydberg ($R_y = 13.6 \text{ eV}$) de l'atome d'hydrogène, $R_y^{3D} = \mu_{exc} R_y / (m_0 \epsilon^2)$ est le Rydberg effectif de l'exciton correspondant au potentiel Coulombien. La distance moyenne entre l'électron et le trou, la taille d'un exciton, est donnée par son rayon de Bohr a_B :

$$a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu_{exc} e^2}$$

En effet, selon l'ordre de grandeur de l'énergie de liaison et le rayon de Bohr, nous distinguons deux types d'excitons :

- ceux présents généralement dans les semiconducteurs organiques et caractérisés par une énergie de liaison relativement grande (E_b^n de quelques centaines de meV) devant l'énergie du gap E_g (l'exciton est plus stable dans ce cas) et une taille a_B relativement petite, de sorte que le trou et l'électron peuvent être localisés sur la même molécule : ce sont les excitons de Frenkel.
- et, ceux présents généralement dans les semiconducteurs inorganiques et qui possèdent des caractéristiques opposées aux excitons de Frenkel : une énergie de liaison faible (E_b^n de quelques meV) et un rayon de Bohr a_B grand devant le paramètre de maille du réseau cristallin : ce sont les excitons de Wannier-Mott.

Nous donnons, dans le tableau (1.1), une idée sur les caractéristiques des excitons 3D dans les semiconducteurs inorganiques où le couplage fort excitons photons de microcavités est plus étudié. D'après (1.1), pour un couplage fort à températures proches ou égales à l'ambiante, les excitons de ZnO sont parmi les meilleurs candidats : d'une part, l'énergie de liaison est à la fois élevée et

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

inférieure à l'énergie du gap ce qui signifie un exciton plus "robuste", face aux agitations thermiques, et plus stables. D'autre part, la faible valeur du rapport entre le rayon de Bohr de l'exciton et le paramètre de maille, permet d'atteindre de plus fortes densités excitoniques dans ZnO.

L'exciton à travers les propriétés optiques du semiconducteur

Les excitons d'un matériau peuvent être reconnus à travers les propriétés intrinsèques du matériau, notamment comme nous allons l'expliquer ci-dessous, à travers la constante diélectrique. En effet, dans le cadre du modèle de Lorentz, un exciton peut être associé à une fréquence propre d'un oscillateur forcé par une onde électromagnétique $\vec{E} = \vec{E}_m e^{-j\omega t}$ envoyée dans le matériau : ici, chaque exciton est assimilé à un oscillateur harmonique découplé des autres oscillateurs (excitons) présents dans le matériau. L'équation du mouvement du système est donnée par l'équation du second ordre suivante

$$m_0 \ddot{\vec{r}} + m_0 \gamma \dot{\vec{r}} + m_0 \omega_{exc0}^2 \vec{r} = -e \vec{E}, \quad (1.12)$$

où $\vec{r}$ est le déplacement de l'électron par rapport à sa position d'équilibre, $-m_0 \omega_{exc0}^2 \vec{r}$ est la force de rappel liant l'oscillateur électron-trou de pulsation propre ω_{exc0} et $-m_0 \gamma \dot{\vec{r}}$ la force traduisant l'amortissement dans le système. En régime permanent, la solution de (1.12) peut s'écrire sous la forme : $\vec{r} = \vec{r}_m e^{-j\omega t}$ ce qui conduit, en remplaçant dans cette même expression, à

$$\vec{r}_m = \frac{-e}{m_0} \frac{\vec{E}_m}{(\omega_{exc0}^2 - \omega^2 - j\gamma\omega)} \quad (1.13)$$

A travers l'expression du vecteur déplacement $\vec{D}$, nous pourrions déduire la constante diélectrique du milieu,

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_b \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} \quad (1.14)$$

où ε_0 la constante diélectrique statique du milieu, ε_b la constante diélectrique "background" et $\vec{P}$ le vecteur polarisation du milieu induit par les N dipôles (électron-trou) qui s'écrit sous la forme

$$\vec{P} = -eN\vec{r} \quad (1.15)$$

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

Finalement, à partir des trois relations (1.13), (1.14) et (1.15) nous obtenons une relation de dispersion pour la constante diélectrique relative du matériau de cette forme

$$\begin{aligned}\varepsilon_r(\omega) &= \varepsilon_b + \frac{\omega_p^2}{\omega_{exc0}^2 - \omega^2 - j\gamma\omega} \\ &= \varepsilon_b + \frac{(\hbar\omega_p)^2}{E_{exc0}^2 - E^2 - j\hbar\gamma E}.\end{aligned}\tag{1.16}$$

Nous concluons à partir de (1.16) que l'énergie propre de l'oscillateur exciton E_{exc0} est une énergie de résonance du matériau, $\hbar\gamma$ présente l'élargissement de la raie excitonique et $\hbar\omega_p$ présente l'amplitude de cette dernière ($\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{m_0\varepsilon_0}$: pulsation des plasmons). Connaissant la largeur de la raie de résonance, nous pouvons accéder au temps de vie des excitons τ_{exc} . Dans ce cas, nous avons supposé que tous les oscillateurs sont identiques d'énergie E_{exc0} constante, et par conséquent, que la raie excitonique est d'élargissement homogène. La prise en compte d'une distribution réelle, non uniforme, des énergies des oscillateurs excitons, qui tient compte des différentes fluctuations présentes dans le semiconducteur, se traduit par un élargissement inhomogène de la raie spectrale.

Finalement, une description complète de l'exciton nécessite la connaissance de sa "force d'oscillateur". Cette dernière caractérise l'intensité des transitions dipolaires électriques. Par un calcul quantique, la force d'oscillateur est donnée par l'expression suivante (à 3D) [30]

$$f_{osc} = \frac{4\pi\varepsilon_0\sqrt{\varepsilon_b}}{\pi} \frac{m_0c}{e^2} \frac{\omega_p^2}{2\omega_0}.$$

Dans l'expression (1.16), la valeur de f_{osc} est introduite comme terme correctif de l'amplitude de la raie excitonique.

Relation de dispersion de l'exciton confiné dans un puits quantique

Quand un puits quantique est introduit dans la couche active de la microcavité, nous parlons plutôt d'un exciton 2D. D'abord, un puits quantique résulte de l'incorporation d'une couche fine d'un matériau semi-conducteur, entre deux couches de semi-conducteurs, dont la bande interdite est plus étroite

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

que celle des couches environnantes. Dans un puits quantique, le mouvement d'un exciton reste libre suivant un plan de l'espace et subit un confinement suivant la troisième direction. Le vecteur d'onde de l'exciton devient donc bidimensionnel et l'exciton est dit 2D. Les effets de confinement du mouvement suivant une direction de l'espace se traduisent par la quantification de l'énergie suivant celle-ci. Dans un puits quantique de type I, i.e. à gap direct, l'hamiltonien de l'exciton 2D s'écrit :

$$H_{exc} = H_{e\parallel} + H_{e\perp} + H_{h\parallel} + H_{h\perp} + V_C, \quad (1.17)$$

avec

$$\begin{aligned} H_{e\parallel} &= \frac{P_{e\parallel}^2}{2m_{e\parallel}^*} + E_g, \\ H_{e\perp} &= \frac{P_{e\perp}^2}{2m_{e\perp}^*} + V_e(z_e), \\ H_{h\parallel} &= \frac{P_{h\parallel}^2}{2m_{h\parallel}^*}, \\ H_{h\perp} &= \frac{P_{h\perp}^2}{2m_{h\perp}^*} + V_h(z_h) \end{aligned}$$

où V_e , V_h respectivement les profondeurs en énergie des puits confinant l'électron et le trou et V_C est toujours le potentiel d'interaction Coulombienne. En coordonnées relatives et de centre de masse, l'hamiltonien (1.17) s'écrit

$$H_{exc} = E_g + H_e(z_e) + H_h(z_h) + \frac{P_{exc\parallel}^2}{2M_{exc\parallel}} + \frac{p_{exc\parallel}^2}{2\mu_{exc\parallel}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon |r_{exc}|}.$$

Cela conduit finalement, à la relation de dispersion suivante pour l'exciton 2D

$$E_{exc}^n(K_{exc\parallel}) = E_g + E_e^n + E_h^n + \frac{\hbar^2 K_{exc\parallel}^2}{2M_{exc\parallel}} + E_B^n. \quad (1.18)$$

Dans (1.18), E_e^n et E_h^n correspondent respectivement à l'énergie du $n^{\text{ième}}$ niveau confiné dans le puits de l'électron et le trou alors que

$$E_B^n = -R_y^{3D}/(n + \frac{1}{2})^2,$$

représente l'énergie de liaison de l'exciton en 2D pour le même niveau [22].

1.1.3 Couplage fort exciton-photon : Le polariton de microcavité

Définition et dimensionnalité

Par définition, un polariton excitonique est un boson composite issu du "couplage" entre un état excitonique et un état photonique. Et, dans une microcavité, le couplage à l'origine du polariton créé dépend de la dimension de l'exciton. En effet,

- dans le cas où la couche active est massive, le polariton est issu d'un couplage entre un photon 2D de vecteur d'onde $k_{ph\parallel}$ et un exciton 3D (dont le mouvement est libre suivant les trois directions de l'espace) de vecteur d'onde tridimensionnel $\vec{K}_{exc}$ ayant la même composante dans le plan, $K_{exc\parallel} = k_{ph\parallel} = k_{\parallel}$.
- dans le cas où un puits quantique est créé dans la couche active, l'exciton est 2D, de vecteur d'onde bidimensionnel de composante dans le plan $K_{exc\parallel}$ et le couplage ne peut avoir lieu à nouveau que dans le plan grâce à la composante $k_{ph\parallel}$ du photon, quand $K_{exc\parallel} = k_{ph\parallel} = k_{\parallel}$: chaque mode photonique possède la possibilité d'interagir avec un état excitonique.

Dans les deux cas, le polariton créé est 2D [31, 32].

Modèle de deux oscillateurs couplés et relation de dispersion 2D

Nous avons vu ci-dessus qu'un exciton de semi-conducteur d'énergie E_{exc} et de vecteur d'onde, en 2D, $K_{exc\parallel}$, peut être assimilé à un oscillateur harmonique. Il en va de même pour le photon, dans sa microcavité, d'énergie E_{ph} et de vecteur d'onde, dans le plan, $k_{ph\parallel}$. Ainsi, dans un modèle à deux niveaux, où un seul mode photonique et un seul état excitonique sont couplés, le système exciton-photon peut être traité comme un système de deux oscillateurs amortis couplés. Le couplage dans cette figure est assuré par la microcavité. Et, il suffit d'exciter l'un des oscillateurs, ici, l'oscillateur exciton, pour déclencher les vibrations du système. Les modes propres de vibration correspondent aux nouveaux états mixtes lumière-matière, les polaritons (voir figure (1.8)). Dans la base des états $|\Psi_{X,k\parallel}\rangle$ et $|\Psi_{C,k\parallel}\rangle$ de l'exciton et le

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

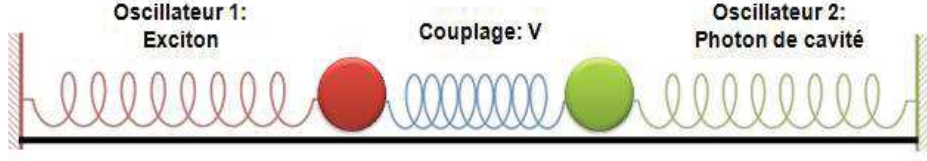


FIGURE 1.8 – Modèle de deux oscillateurs couplés exciton-photon.

photon respectivement, la matrice de couplage s'écrit :

$$H(k_{\parallel}) = \begin{pmatrix} E_{ph}(k_{\parallel}) - j\hbar\gamma_{ph} & \hbar V(k_{\parallel}) \\ \hbar V(k_{\parallel}) & E_{exc}(k_{\parallel}) - j\hbar\gamma_{exc} \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

où $\hbar\gamma_{exc}$ et $\hbar\gamma_{ph}$ représentent les énergies d'amortissement de l'exciton et le photon respectivement, et le terme $\hbar V(k_{\parallel})$ représente l'énergie du couplage, qui s'exprime en 2D en fonction de la force d'oscillateur par unité de surface S comme suit [33, 34]

$$\hbar V(k_{\parallel}) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0\varepsilon_0 n_c^2 L_{eff}}} \frac{f_{osc}}{S}$$

Les valeurs propres de la matrice (1.19), correspondant aux nouveaux modes du système, sont

$$E_{UPB}(k_{\parallel}) = \frac{1}{2}(E_{ph}(k_{\parallel}) + E_{exc}(k_{\parallel})) - \frac{j}{2}(\hbar\gamma_{ph} + \hbar\gamma_{exc}) + \frac{1}{2}\hbar\Omega_R(k_{\parallel}), \quad (1.20)$$

$$E_{LPB}(k_{\parallel}) = \frac{1}{2}(E_{ph}(k_{\parallel}) + E_{exc}(k_{\parallel})) - \frac{j}{2}(\hbar\gamma_{ph} + \hbar\gamma_{exc}) - \frac{1}{2}\hbar\Omega_R(k_{\parallel}), \quad (1.21)$$

les indices UPB et LPB désignent respectivement la branche polaritonique haute (Upper Polariton Branch) et la branche polaritonique basse (Lower Polariton Branch). Les parties réelles dans (1.20) et (1.21) correspondent aux énergies de chaque mode alors que les parties imaginaires correspondent à l'élargissement homogène de la raie spectrale de chacun de ces derniers. L'énergie $\hbar\Omega_R$ correspond à l'écart énergétique entre la (UPB) et la (LPB), Ω_R est appelée le *la pulsation de Rabi* :

$$\hbar\Omega_R(k_{\parallel}) = \sqrt{4(\hbar V)^2 + (-\delta(k_{\parallel}) - j(\hbar\gamma_{ph} - \hbar\gamma_{exc}))^2}, \quad (1.22)$$

avec $\delta(k_{\parallel}) = E_{ph}(k_{\parallel}) - E_{exc}(k_{\parallel})$ le désaccord de cavité ou le "detuning". Afin d'examiner la nature du couplage, nous regardons le système à la résonance

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

quand $E_{ph}(k_{\parallel}) = E_{exc}(k_{\parallel})$, c'est à dire quand le "detuning" δ est nul.

$$\hbar\Omega_R(k_{\parallel}) = \sqrt{4(\hbar V)^2 - (\hbar\gamma_{ph} - \hbar\gamma_{exc})^2},$$

A partir des deux relations (1.20) et (1.21), nous pouvons remarquer qu'effectivement, la dégénérescence des deux modes du système dépend de la nature réelle ou imaginaire de $\hbar\Omega_R$:

- Si $4(\hbar V)^2 < (\hbar\gamma_{ph} - \hbar\gamma_{exc})^2$, le nombre $\hbar\Omega_R$ est purement imaginaire et donc les deux solutions complexes (1.20) et (1.21) ont la partie réelle identique et ne diffèrent que par leurs parties imaginaires : les modes du système ont la même énergie et ne diffèrent que par leurs élargissements spectraux liés aux parties imaginaires. Dans ce cas, on n'observe pas un écart énergétique et le régime de couplage est dit faible.
- Si $4(\hbar V)^2 > (\hbar\gamma_{ph} - \hbar\gamma_{exc})^2$, le nombre $\hbar\Omega_R$ est un nombre réel et donc les deux solutions complexes (1.20) et (1.21) se distinguent énergiquement par un écart caractéristique appelé *le dédoublement de Rabi* : il y a une levée de dégénérescence des états propres du système et le régime de couplage est dit régime de couplage fort.

Les nouveaux états propres du système $|UPB\rangle$ et $|LPB\rangle$ sont des combinaisons linéaires de ceux de l'exciton et le photon, $|\Psi_{X,k_{\parallel}}\rangle$ et $|\Psi_{C,k_{\parallel}}\rangle$, respectivement :

$$|UPB\rangle = X(k_{\parallel})|\Psi_{X,k_{\parallel}}\rangle + C(k_{\parallel})|\Psi_{C,k_{\parallel}}\rangle \quad (1.23)$$

$$|LPB\rangle = X(k_{\parallel})|\Psi_{X,k_{\parallel}}\rangle - C(k_{\parallel})|\Psi_{C,k_{\parallel}}\rangle \quad (1.24)$$

où $|X(k_{\parallel})|^2 + |C(k_{\parallel})|^2 = 1$. Les coefficients $X(k_{\parallel})$ et $C(k_{\parallel})$ sont appelées les coefficients de Hopfield, ils dépendent du désaccord δ et décident des proportions en lumière et en matière de chaque polariton à travers le signe de ce dernier [35]

$$X(k_{\parallel}) = \frac{2\hbar V}{\sqrt{4(\hbar V)^2 + (\delta(k_{\parallel}) + \hbar\Omega_R(k_{\parallel}))^2}}, \quad (1.25)$$

$$C(k_{\parallel}) = \frac{\delta(k_{\parallel}) + \hbar\Omega_R(k_{\parallel})}{\sqrt{4(\hbar V)^2 + (\delta(k_{\parallel}) + \hbar\Omega_R(k_{\parallel}))^2}}. \quad (1.26)$$

En regardant la nature de la branche polaritonique basse sur la courbe de dispersion, nous notons que

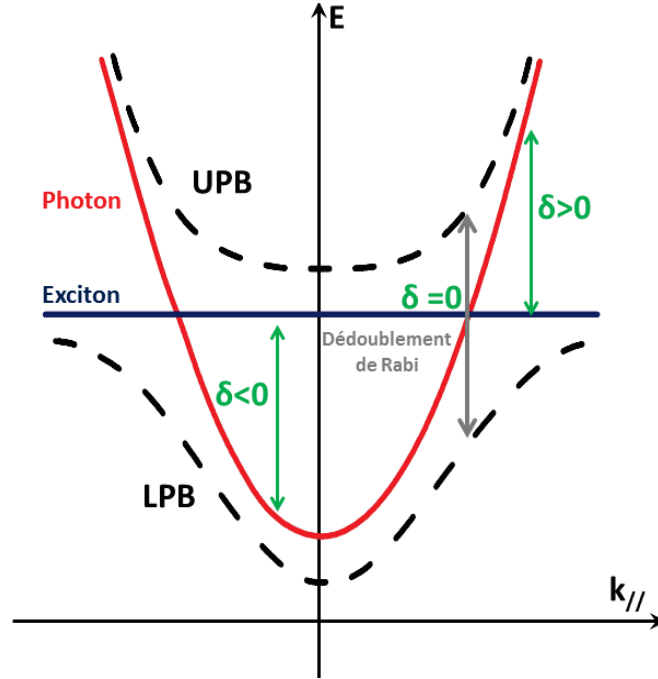


FIGURE 1.9 – Dispersion du polariton haut et polariton bas.

- pour un désaccord $\delta < 0$, le polariton bas est à caractère photonique,
- pour un désaccord $\delta > 0$, le polariton bas est plutôt majoritairement excitonique,
- et pour un désaccord $\delta = 0$, le polariton bas est équilibré en proportions excitonique et photonique (voir figure (1.9)).

Nous notons finalement qu'à faibles vecteurs d'ondes, la courbure de la parabole de dispersion de l'exciton peut être négligée devant celle de la courbe de dispersion du photon étant donné que cette dernière est inversement proportionnelle à la masse du photon qui est de l'ordre $10^{-5}m_0$ (relation (1.10)).

1.2 Propriétés d'émission des polaritons de microcavités

1.2.1 Le condensat de Bose-Einstein en physique statistique

Condensation de Bose-Einstein

Un condensat de Bose-Einstein (B.E) est un état de la matière résultant d'une transition de phase qui se passe à l'échelle quantique. La condensation de (B.E) se produit quand une densité macroscopique de particules bosoniques d'énergies et états quantiques différents "condense" dans un état quantique commun de plus basse énergie. En effet, pour un gaz de particules, à l'échelle de la longueur d'onde de De Broglie λ_{DB} ,

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}},$$

(m masse de la particule, k_B constante de Boltzmann et T température du gaz), les particules du gaz sont traitées de façon quantique, c'est à dire comme des paquets d'ondes. Ainsi, une baisse de la température du gaz, ou de la masse des particules choisies, entraine un allongement, qui va jusqu'au chevauchement et la "condensation" en une onde macroscopique unique, des paquets d'ondes (voir figure (1.10)). A savoir, la température critique pour la condensation T_c est inversement proportionnelle à la masse d'une particule de celui-ci, à 3D, $T_c \propto \frac{n_b}{m}$, où n_b est la densité du gaz bosonique [36]. Les particules concernées par cette transition sont évidemment les bosons comme ils n'obéissent pas au principe d'exclusion de Pauli. Nous notons que les conditions pour la condensation de (B.E) varient en fonction de la dimension du système [37]. A basses températures, les condensats atomiques nécessitent des températures allant de quelques nK à quelques μK pour atteindre la dégénérescence quantique et donc des techniques de refroidissement complexes.

Condensation des polaritons

Dans les semi-conducteurs, les polaritons issus du couplage fort excitons-photons, présentent une alternative prometteuse d'une condensation de (B.E)

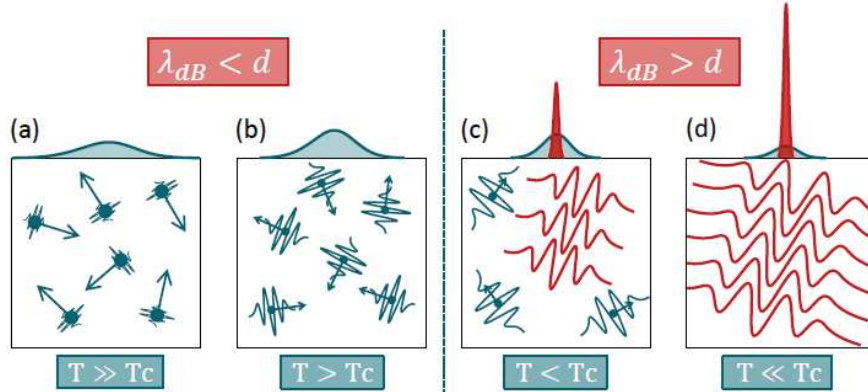


FIGURE 1.10 – Condensation de Bose-Einstein à basse température [14] : à hautes températures ($T \gg T_c$), les atomes se comportent comme des particules individuelle distantes de d . En baissant la température, tout en restant en dessous de la température critique de la condensation, ($T > T_c$), la nature ondulatoire commence à apparaître. Une fois la température critique est dépassée, ($T < T_c$), la condensation commence (en dessus des cadres : bosons condensés : pic rouge, bosons non condensés : Gaussienne bleue).

à des températures allant de quelques K à l'ambiante. Ceci vient essentiellement de la masse faible d'un polariton qui est huit ordres de grandeurs plus faible qu'un boson atomique. Le prix à payer dans ce cas est la durée de vie limitée de ces bosons composites : quelques pico-secondes devant une durée de vie de l'ordre de la seconde pour les atomes dans un piège [1].

1.2.2 Génération des polaritons

Les polaritons de cavité sont généralement excités soit optiquement, à travers un spot laser, soit électriquement à travers l'injection des porteurs. Une excitation optique peut être soit :

- non-résonnante, où l'énergie du laser d'excitation est supérieure à celle des polaritons bas. Cette excitation est dite incohérente : elle permet de distinguer toute cohérence du signal émis par les polaritons de la cavité de la cohérence du laser utilisé pour l'excitation.
- résonnante, où l'énergie du laser d'excitation correspond, à un vecteur d'onde donné, à l'énergie du polariton bas. Dans ce cas l'excitation est

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

dite cohérente, comme la cohérence du laser est cédée à la population des polaritons qui se crée.

D'autre part, une injection électrique consiste en l'injection des électrons et des trous dans la couche active de la microcavité à travers le dopage des miroirs semiconducteurs de Bragg. A température ambiante, une approche développée d'injection électrique a été démontrée dans des microcavités GaN [38], ce résultat étant controversé à ce jour.

1.2.3 Processus de gain et de perte dans un condensat

Les condensats polaritoniques, contrairement aux condensats atomiques, sont des systèmes hors d'équilibre thermique gouvernés par des processus de relaxation et de recombinaison. Généralement, les polaritons sont créés dans la microcavité grâce à un pompage optique non résonnant (incohérent) avec la branche polaritonique basse (LPB). Le *gain* dans le condensat se fait donc soit directement par la pompe, soit, grâce à l'environnement complexe généré par celle-ci appelé réservoir, qui rassemble les particules chaudes : les électrons, les trous, les excitons et les autres polaritons, lors des processus de relaxation thermalisant la LPB : dans le cas d'une excitation incohérente, la relaxation des polaritons à grands vecteurs d'ondes est stimulée par l'état final. Les principaux mécanismes de relaxation qui participent à la thermalisation du système sont [3, 16]

- La relaxation via les phonons : participe au refroidissement du système.
 - La relaxation via l'interaction polariton-polariton : ce processus est notamment favorisé par le choix du detuning comme ce dernier affecte les coefficients de Hopfield du polariton. En effet, comme déjà expliqué par la figure (1.9), un detuning positif conduit à un polariton à caractère excitonique. Ce dernier favorise l'interaction polariton-polariton. Ainsi, à hautes puissances, i.e., à fortes densités, ce processus de relaxation s'active (voir figure (1.11)). Il est moins efficace à désaccord négatif.
 - La relaxation par interaction des polaritons avec le réservoir qui est très efficace, et n'existe que dans le cas de l'excitation non-résonante.
- Par ailleurs, les *pertes* en polaritons sont essentiellement dues aux faibles

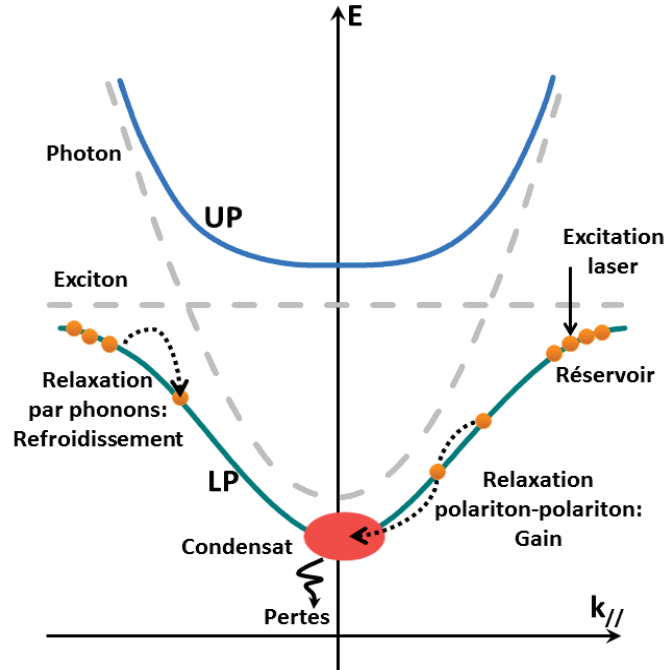


FIGURE 1.11 – Processus de gain et de perte dans un condensat de polaritons.

durées de vie de ces derniers. Ainsi, un état stationnaire du système apparaît comme une figure idéale où l'équilibre thermique est maintenu, i.e., dans le condensat, les gains et les pertes se sont compensés.

1.2.4 Laser à polaritons versus laser à photons

Plusieurs mécanismes de photoluminescence sont présents dans une microcavité semi-conductrice. On distingue : en régime de couplage fort, le signal émis par les polaritons de la branche basse en plus du signal cohérent issu du condensat qui est à l'origine du laser à polaritons. Puis, quand la densité de porteurs atteint la densité de Mott, les excitons deviennent fragiles, et s'ionisent en électrons et trous et le couplage devient faible, nous reconnaissons le laser à photons. Sur la courbe de photoluminescence en fonction de la puissance de pompage, les deux régimes d'émission laser se distinguent par l'apparition de deux seuils principaux (voir figure (1.12)) : un premier seuil à basses puissances relatif à la condensation des polaritons et donc le début de l'émission d'un signal non-linéaire dont la cohérence indique la présence du

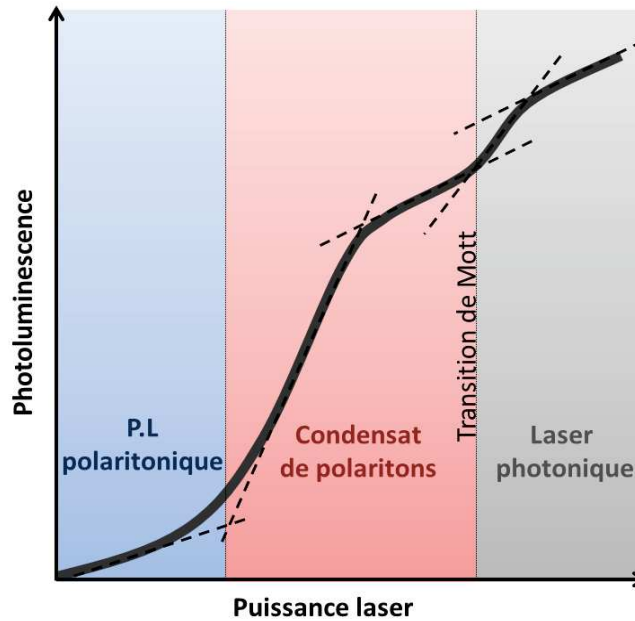


FIGURE 1.12 – Dépendance de la photoluminescence de la puissance de pompage (allure en échelle logarithmique) : frontière entre les différents régime d’émission.

laser à polaritons. Puis, un second seuil, à hautes puissances, relatif au laser à photons. La différence entre le laser à polaritons et le laser traditionnel est fondamentale : quand l’amplification de l’émission nécessite une inversion de population pour le dernier, elle dépend du taux de relaxation des porteurs vers l’état fondamental, pour le laser à polaritons, qui doit compenser les pertes.

1.3 Modèles théoriques : Boltzmann versus Gross-Pitaevskii

Théoriquement, la condensation de Bose-Einstein est interprétée dans le cadre de deux modèles très différents :

- le modèle semi-classique de Boltzmann décrit, dans une approche issue de la physique statistique, la condition d’équilibre thermodynamique entre le réservoir de particules non condensées et le condensat.

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

- le modèle de Gross-Pitaevskii ne traite pas l'aspect statistique, et décrit la formation du condensat dans un contexte hors d'équilibre. Le réservoir joue le rôle d'une source de gain, et les mécanismes de relaxation et les aspects thermodynamiques sont traités par des termes ad hoc.

Dans ce travail, nous avons adopté ce dernier modèle pour simuler les différents aspects dynamiques de la condensation des polaritons de microcavité.

1.3.1 Modèle quantique de Gross-Pitaevskii

L'équation de Gross-Pitaevskii standard

L'équation de Gross-Pitaevskii (G.P) se présente comme l'équation fondamentale qui décrit, en seconde quantification, dans le cadre de la théorie de champ moyen, la dynamique de la fonction d'onde macroscopique Ψ qui décrit le comportement collectif de N particules en interactions. Ces interactions sont vues par chaque particule comme un potentiel moyen de toutes les interactions dans le système, et, sont représentées par le terme non-linéaire de l'équation de G.P. Dans le contexte des condensats atomiques qui sont en équilibre thermique, l'équation de G.P prend sa forme standard qui correspond à l'équation linéaire de Shrödinger à laquelle se rajoute le terme non linéaire décrit ci-dessus [39].

En seconde quantification, l'hamiltonien de N particules en interaction, confinées dans un potentiel externe V_{ext} s'écrit

$$\hat{H} = \int dr \hat{\Psi}^\dagger(r) H_0 \hat{\Psi}(r) + \frac{1}{2} \int dr dr' \hat{\Psi}^\dagger(r) \hat{\Psi}^\dagger(r') V(r-r') \hat{\Psi}(r) \hat{\Psi}(r')$$

où

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta + V_{ext},$$

(m^* étant la masse du Boson). L'interaction binaire est décrite par le potentiel $V(r-r')$. Les opérateurs $\hat{\Psi}^\dagger(r)$ et $\hat{\Psi}(r)$ sont les opérateurs champ des bosons, ils créent et annihilent les bosons à une position donnée r respectivement. Et, la version standard de l'équation de G.P se met finalement sous la forme suivante [40]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V_{ext}(r) + g |\Psi(r, t)|^2 \right) \Psi(r, t) \quad (1.27)$$

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

où g est la constante relative aux interactions.

Gross-Pitaevskii : le modèle généralisé

Comme déjà expliqué dans ce chapitre, les condensats de polaritons sont le plus souvent hors équilibre. L'équilibre thermique n'est atteint que si le système atteint un régime stationnaire par une balance entre les gains et les pertes. Pour tenir compte de ces effets, un modèle généralisé qui consiste en deux equations couplées a été introduit dans [15]. Le modèle décrit, d'une part, la dynamique de la fonction d'onde du condensat par une equation G.P dissipative et, d'autre part, il tient compte de la dynamique du réservoir des excitons et des polaritons non condensés créé suite au pompage optique incohérent à travers une seconde équation, dans l'espace réel :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \left\{ E_{LPB} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + g_R n_R(r, t) + \hbar \mathcal{G} P(r, t) + V_{ext}(r) \right. \\ \left. + g |\Psi(r, t)|^2 + i \frac{\hbar}{2} [R n_R(r, t) - \gamma_c] \right\} \Psi(r, t),$$

$$\frac{\partial n_R(r, t)}{\partial t} = P(r, t) - \gamma_R n_R(r, t) - R n_R(r, t) |\Psi(r, t)|^2,$$

tout le terme entre accolades dans la première équation est noté $H_{G.P}$, les constantes g et g_R présentent les interactions binaires polariton du condensat / polariton du condensat et polariton du réservoir / polariton du condensat respectivement. La constante $\mathcal{G}$ décrit le potentiel créé par le spot de pompage P . La relaxation stimulée des polaritons depuis le réservoir vers le condensat assurée par les processus de diffusion (principalement polariton-polariton et polariton-phonon) est incluse dans le terme, linéairement dépendant de la densité des particules du réservoir, $R n_R$. Les pertes dues à la durée de vie finie des polaritons du condensat et du réservoir sont représentées par les taux γ_c et γ_R respectivement et V_{ext} est un potentiel extérieur de confinement du condensat [2]. La fonction d'onde $\Psi(r, t)$ vérifie la condition de normalisation suivante

$$\iint |\Psi(r, t)|^2 dx dy = N_c(t), \quad (1.28)$$

avec $N_c(t)$ la population du condensat intégrée spatialement. L'énergie E_{LPB} correspond à l'énergie initiale d'un polariton. Et, l'énergie totale du conden-

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

sat est donnée par :

$$E_c = \hbar\omega_c = E_{LPB} + E_{Blueshift},$$

avec $E_{Blueshift}$ l'énergie du blueshift par les N_c particules :

$$E_{Blueshift} = \frac{\langle \Psi | (H_{G.P} - E_{LPB}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Les solutions du système de ces deux équations couplées ont souvent été cherchées sous forme stationnaire dans le temps : Ψ et n_R prennent la forme [15, 41]

$$\begin{aligned}\Psi(r, t) &= \Psi_0(r) e^{-i\omega_c t} = \sqrt{\rho(r)} e^{(\phi(r) - i\omega_c t)} \\ n_R(r, t) &= n_R(r)\end{aligned}$$

où $\rho(r)$ et $\phi(r)$ sont la densité locale et la phase locale de la fonction d'onde du condensat respectivement et ω_c la fréquence du condensat. Cependant, plusieurs travaux expérimentaux récents, résolus dans l'espace et dans le temps [42] montrent le besoin d'une étude dynamique du problème. Récemment, dans [43], une résolution dynamique basée sur les deux équations du modèle G.P généralisé a été menée en coordonnées polaires. Mais, ce choix de système de coordonnées ne permet pas de traiter les anisotropies dans le condensat. D'où notre choix de résoudre plutôt le système à deux dimensions en coordonnées cartésiennes.

1.3.2 Modèle semi-classique de Boltzmann

Habituellement, la dynamique d'un condensat est étudiée à l'aide du modèle semi-classique de Boltzmann valable dans l'espace réciproque. Ce modèle décrit la distributions des polaritons dans l'ensemble de la branche polaritonique, le long de leur courbe de dispersion, et ne se restreint pas à l'étude du seul condensat. Il permet donc, contrairement au modèle Gross-Pitaevskii, d'accéder aux détails des différents processus de relaxation responsables du gain en polaritons et la contribution de chacun d'entre eux dans la dynamique du condensat. Bien que nous n'entrons pas dans les détails de ce modèle dans notre travail, nous soulignons son intérêt dans la théorie

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

des condensats et nous renvoyons le lecteurs vers les références suivantes [16, 17, 18, 44, 1]. Nous notons d'ailleurs que, dans deux travaux récents, une théorie sophistiquée qui réunit les deux modèles a été élaborée [45, 46]

1.4 Géométries d'excitation optique

Dans ce paragraphe, nous allons souligner l'intérêt du choix de la géométrie et la taille d'excitation optique dans la formation et la manipulation des condensats de polaritons. D'abord, nous avons expliqué ci-dessus qu'une excitation optique crée localement un nuage de particules non condensées : le réservoir. Ainsi, à cause de leur fraction excitonique, les polaritons du condensat entrent en interaction répulsive avec les particules du réservoir. Ces interactions sont notamment favorisées à hautes puissance, i.e à fortes densités. Et, elle conduisent à l'apparition d'un potentiel de "dé-piégeage", vu généralement comme une colline de potentiel, qui expulse le condensat loin du lieu d'excitation. Ainsi, l'énergie potentielle du condensat se transforme en une énergie cinétique. Au sein de ce potentiel, les interactions répulsives entre les polaritons du condensat lui même participent à son expansion spatiale. Dans l'équation de Gross-Pitaevskii généralisée, le potentiel de dé-piégeage est représenté par les termes suivants :

$$V_{dp} = g_R n_R(r, t) + \hbar \mathcal{G} P(r, t) + g |\Psi(r, t)|^2.$$

Ces propriétés cinétiques ont été exploitées pour la réalisation de nouveaux dispositifs opto-polaritoniques comme les transistors à condensats de polaritons par exemple [12].

Généralement, un spot unique de profil spatial Gaussien est utilisé pour exciter un condensat. Récemment, les propriétés d'une condensation sous d'autres géométries d'excitation, notamment une excitation étendue [14, 47] et une excitation annulaire [13], ont été étudiées. Sous une excitation de profil Gaussien, l'étude menée dans [15], en accord avec les travaux expérimentaux présentés dans [11, 48], a démontré une sensibilité fondamentale du profil du condensat à la taille du spot.

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

Flux de polaritons au sein du condensat

On définit le vecteur d'onde local du condensat par $k_c(r) = \nabla_r \phi(r)$. Ce dernier caractérise l'accélération des polaritons du condensats quand ils sont expulsés loin du centre du spot. Sous un grand spot de $20 \mu m$, comme le montre la figure (1.13), la vitesse du condensat augmente de façon radiale (d) de la valeur zéro au centre à une valeur maximale de $k_c \sim \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* \hbar \omega_c}$. Ce dernier résultat confirme l'existence d'un flux sortant de polaritons. Dans l'espace réciproque, nous remarquons que la fonction d'onde s'étend de façon symétrique par rapport à l'origine des vecteurs d'ondes $k = 0$. D'autre part, sous un spot focalisé de $2 \mu m$, la vitesse du condensat augmente rapidement, toujours de façon radiale, avant que le régime balistique ne s'établisse (h). Dans ce cas, le condensat occupe dans l'espace des vecteur d'ondes l'anneau de rayon k_c avec un minimum autour de $k = 0$ (f).

Comportement asymptotique à grande distance

Loin de la région d'excitation, la densité du condensat devient très faible et il est supposé décorrélié des interactions avec le réservoir. L'équation de Gross-Pitaevskii se réduit donc à l'équation suivante

$$\frac{\hbar}{2m^*} \nabla_r^2 \Psi + \left(\omega_c - \omega_{LPB} + i \frac{\gamma_c}{2} \right) \Psi = 0$$

Et, en coordonnées polaires, le comportement asymptotique de la fonction d'onde peut être décrit analytiquement, dans l'espace réel, par une fonction de Hankel

$$\Psi(r \rightarrow 0) \propto \frac{1}{\sqrt{r}} \exp(-k_{pen} r), \quad k_{pen} = \frac{\gamma_c m^*}{2\hbar k_c}$$

Conclusion

A travers ce chapitre nous avons abordé différents aspects théoriques et expérimentaux des polaritons de microcavité. Nous allons consacrer le deuxième chapitre à l'exploitation numérique du modèle Gross-Pitaevskii généralisé, complet, à deux dimensions dans l'espace. Cette étude numérique

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

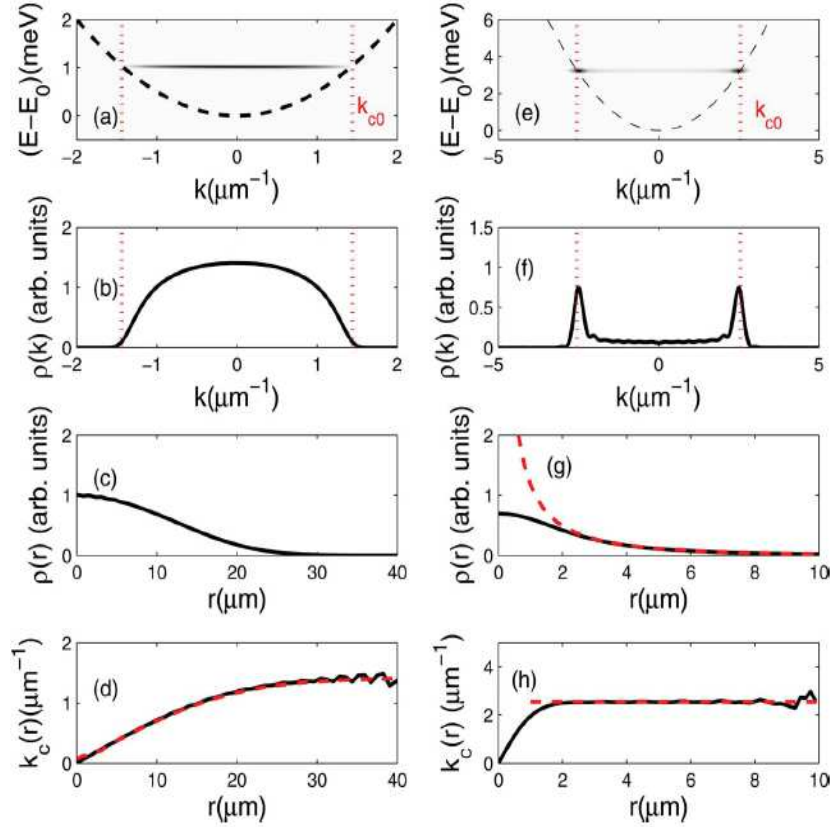


FIGURE 1.13 – Résultats de simulations en régime stationnaire, en utilisant le modèle G.P généralisé, d'un condensat sous un spot de profil Gaussien de, 20 μm (colonne de gauche), puis 2 μm (colonne de droite), à $P = 2P_{th}$ et $P = 8P_{th}$ respectivement. Paramètres : $g_R = 0$; $\mathcal{G} = 0.0175 \mu m^2$; $g = 0.015 meV \mu m^2$; $\hbar R = 0.05 meV \mu m^2$; $\hbar \gamma_c = 0.5 meV$; $\hbar \gamma_R = 2 meV$; $V_{ext} = 0$, [15].

CHAPITRE 1. ÉTAT DE L'ART EXPÉRIMENTAL ET THÉORIQUE DES POLARITONS DE MICROCAVITÉ

sera ultérieurement exploitée dans l'étude des aspects dynamiques des condensats polaritoniques, puis dans la reproductions de résultats obtenus expérimentalement dans des microcavités ZnO.

Chapitre 2

Implémentation numérique du modèle basé sur l'équation de Gross-Pitaevskii

Sommaire

2.1	Stratégies numériques pour l'équation de Gross-Pitaevskii	38
2.2	Schéma numérique et détails de l'implémentation	40
2.3	Étude de la stabilité et de la convergence du schéma	44
2.4	Validation du code de calcul	48

Nous proposons dans ce chapitre une approche numérique explicite pour la résolution des deux équations couplées du modèle Gross-Pitaevskii (G.P) généralisé à deux dimensions. Cette approche est basée sur la méthode des différences finies (DF) centrées appliquée aux variables spatiales combinée à la méthode Runge-Kutta 4 (RK4) appliquée à la variable temporelle. Nous détaillons l'implémentation numérique de notre approche. Afin d'examiner son efficacité, nous présentons en premier lieu les résultats d'un ensemble d'expériences numériques justifiant la stabilité temporelle et la convergence spatiale de nos calculs. Puis, nous illustrons la validation du modèle numérique par la comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature.

2.1 Stratégies numériques pour l'équation de Gross-Pitaevskii

L'équation de GP est une équation différentielle non linéaire difficile à résoudre analytiquement d'où le recours aux méthodes numériques. Dans ce cadre, de nombreux travaux ont étudié la résolution numérique de l'équation de G.P [49, 50, 51, 52, 53, 54]. Dans ce qui suit, nous donnerons une idée sur une méthode numérique parmi les plus connues dans ce cadre. Pour d'autres méthodes et pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à cet article de revue [55] où un recensement détaillé des différentes approches a été effectué. Prenons la version standard de l'équation de G.P dynamique unidimensionnelle (l'équation ci-dessous est présentée sous forme adimensionnelle) :

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(x) + g |\Psi(x, t)|^2 \right) \Psi(x, t). \quad (2.1)$$

Nous rappelons que, dans le cadre de la simulation des condensats de Bose-Einstein, V_{ext} est un potentiel extérieur de confinement et que le terme non-linéaire $g |\Psi|^2$ décrit les interactions binaires entre les bosons.

Méthode *Crank-Nicolson/différences finies* (CNDF) :

Pour la résolution de l'équation (2.1), la méthode implicite (CNDF) se sert de la méthode d'Euler (voir annexe (A)), pour discrétiser la variable temporelle, et de la méthode des DF centrées pour discrétiser les variables spatiales. En utilisant cette dernière méthode, à une dimension, l'opérateur Laplacien s'écrit sous la forme :

$$(\Delta \Psi)^j = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tilde{x}^2} \right)^j = \left(\frac{\Psi^{j-1} - 2\Psi^j + \Psi^{j+1}}{\tilde{h}_x^2} \right), \quad (2.2)$$

Ainsi, entièrement discrétisée par CNDF, l'équation (2.1) acquiert la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tilde{h}_t} [\Psi_{n+1}^j - \Psi_n^j] &= \frac{i}{4} [(\Delta \Psi)_{n+1}^j + (\Delta \Psi)_n^j] - i V_{ext}^j \Psi_{n+\frac{1}{2}}^j \\ &\quad - i g |\Psi_{n+\frac{1}{2}}^j|^2 \Psi_{n+\frac{1}{2}}^j, \end{aligned} \quad (2.3)$$

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

où

$$\Psi_{n+\frac{1}{2}}^j = \frac{1}{2} (\Psi_n^j + \Psi_{n+1}^j),$$

avec $\tilde{h}_x$ ($j : 1 \rightarrow n_j$) et $\tilde{h}_t$ (n) les pas (compteurs) sur les variables spatiale et temporelle respectivement. De cette façon, plutôt qu'une seule équation continue, nous obtenons un système d'équations associée chacune à un point de discrétisation dans l'espace, que l'on résout dans le temps. L'équation (2.3) peut se mettre sous la forme suivante

$$a\Psi_{n+1}^{j-1} + b^j\Psi_{n+1}^j + c\Psi_{n+1}^{j+1} = d^j \quad (2.4)$$

où

$$\begin{aligned} a &= c = -i\tilde{h}_t/4\tilde{h}_x^2, \\ b^j &= 1 + i\tilde{h}_t/2\tilde{h}_x^2 + \left(i\tilde{h}_t/2\right) V_{ext}^j + \left(ig\tilde{h}_t/8\right) |\Psi_{n+1}^j + \Psi_n^j|^2, \\ d^j &= \left(i\tilde{h}_t/4\right) (\Delta\Psi)_n^j + \left[1 - \left(i\tilde{h}_t/2\right) V_{ext}^j - \left(ig\tilde{h}_t/8\right) |\Psi_{n+1}^j + \Psi_n^j|^2\right] \Psi_n^j. \end{aligned}$$

Le problème s'écrit finalement sous la forme d'un système linéaire tridiagonal (soluble par des méthodes simples comme la méthode d'élimination de Gauss par exemple)

$$\begin{pmatrix} b^1 + \beta_1 & c & & & \\ a & b^2 & c & & \\ & a & b^3 & c & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a & b^{n_j} + \beta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \\ [\Psi] \\ \\ \end{pmatrix}_{n+1} = \begin{pmatrix} d^1 \\ \\ \vdots \\ d^{n_j} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

où $[\Psi] = [\Psi^j]$ et les constantes β_1 et β_2 tiennent compte des conditions aux limites. L'écriture matricielle (2.5) est une écriture implicite qu'on peut traiter par des méthodes de type prédiction correction par exemple :

- Étape prédiction : l'approximation $|\Psi_{n+1/2}^j|^2 \sim |\Psi_n^j|^2$, permet d'avoir une première prédiction $[\Psi]_{n+1}^*$ de la valeur de $[\Psi]_{n+1}$.
- Étape correction : la prédiction $[\Psi]_{n+1}^*$ peut être améliorée en considérant la correction $\Psi_{n+1/2}^{j*} \sim \frac{\Psi_{n+1}^{j*} + \Psi_n^j}{2}$.

De façon générale, nous remarquons que, pour le traitement numérique du problème G.P, on privilégie les techniques implicites pour la résolution

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

temporelle. Ce choix est justifié par le fait que ces techniques de calcul sont inconditionnellement stables. Cependant, ces dernières souffrent de leur difficulté d'implémentation et leur coût élevé en temps de calcul et stockage mémoire.

Dans ce travail, nous adoptons plutôt une technique explicite simple à implémenter et satisfaisante dans le contexte de nos simulations. Ces méthodes ont l'inconvénient d'être conditionnellement stables ce qui impose des contraintes sur le choix des pas de temps et d'espace. Ce choix a été fait dans d'autres travaux, comme dans [56], où il est affirmé que les méthodes explicites sont les plus adéquates pour étudier les problèmes à dynamique riche et rapide.

2.2 Schéma numérique et détails de l'implémentation

Comme expliqué ci-dessus, nous proposons de combiner les algorithmes DF et RK4 pour la résolution des deux équations couplées du modèle G.P généralisé, dans le temps, et à deux dimensions dans l'espace. Nous partons donc des expressions (voir chapitre 1) :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + g_R n_R(x, y, t) + \hbar \mathcal{G}P(x, y, t) + V_{ext}(x, y) + g |\Psi(x, y, t)|^2 + i\frac{\hbar}{2} [Rn_R(x, y, t) - \gamma_c] \right\} \Psi(x, y, t), \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial n_R(x, y, t)}{\partial t} = P(x, y, t) - \gamma_R n_R(x, y, t) - Rn_R(x, y, t) |\Psi(x, y, t)|^2. \quad (2.7)$$

Adimensionnement

Avant de commencer le calcul numérique, il est intéressant, voire primordial, d'adimensionner les équations à résoudre. Selon [41], il est commode d'adimensionner les équations couplées de $\Psi(x, y, t)$ et $n_R(x, y, t)$ par rapport à l'unité de longueur $\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \gamma}}$ et l'unité de temps $\frac{1}{\gamma}$ qui correspond à l'unité

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

d'énergie $\hbar\gamma$. Ainsi, adimensionné, le système ci-dessus s'écrit

$$i \frac{\partial \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} \right) + \tilde{g}_R n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) + \tilde{\mathcal{G}} P(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \right. \\ \left. + V_{ext}(\tilde{x}, \tilde{y}) + \tilde{g} \left| \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \right|^2 + \frac{i}{2} \left[\tilde{R} n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) - \tilde{\gamma}_c \right] \right\} \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}), \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = P(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) - \tilde{\gamma}_R n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) - \tilde{R} n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \left| \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \right|^2, \quad (2.9)$$

avec les paramètres adimensionnés suivants :

$$\tilde{x} = \frac{x}{\xi}, \quad \tilde{y} = \frac{y}{\xi}, \quad \tilde{t} = \gamma t, \quad \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \xi \Psi(x, y, t), \quad n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \xi^2 n_R(x, y, t), \\ \tilde{g}_R = \frac{g_R}{\hbar \gamma \xi^2}, \quad \tilde{\mathcal{G}} = \frac{\mathcal{G}}{\xi^2}, \quad \tilde{g} = \frac{g}{\hbar \gamma \xi^2}, \quad \tilde{R} = \frac{R}{\gamma \xi^2}, \quad \tilde{\gamma}_c = \frac{\gamma_c}{\gamma}, \quad \tilde{\gamma}_R = \frac{\gamma_R}{\gamma}, \quad P(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \frac{\xi^2}{\gamma} P(x, y, t) \text{ et } V_{ext}(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{1}{\hbar \gamma} V_{ext}(x, y).$$

Implémentation

Pour la résolution spatiale, nous considérons la fenêtre de calcul schématisée dans la figure (2.1). Nous désignons à partir de maintenant par j ($1 : n_j - 1$) et l ($1 : n_l - 1$) les compteurs pour les variables $\tilde{x}$ et $\tilde{y}$ respectivement comme le montre la même figure. En utilisant la version 2D du Laplacien discrétisé par DF centrées (2.2), totalement discrétisées, les deux équations couplées (2.8) et (2.9) s'écrivent sous la forme suivante

$$\frac{\partial \Psi^{j,l}}{\partial \tilde{t}} = \tilde{h}_1 (\Psi^{j-1,l} + \Psi^{j+1,l}) + \tilde{h}_2 (\Psi^{j,l-1} + \Psi^{j,l+1}) + \left[-2 (\tilde{h}_1 + \tilde{h}_2) \right. \\ \left. - i \tilde{g}_R n_R^{j,l} - i \tilde{\mathcal{G}} P^{j,l} - i V_{ext}^{j,l} - i \tilde{g} \left| \Psi^{j,l} \right|^2 + \frac{1}{2} \tilde{R} n_R^{j,l} - \frac{1}{2} \tilde{\gamma}_c \right] \Psi^{j,l}, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial n_R^{j,l}}{\partial \tilde{t}} = P^{j,l} - \left(\tilde{\gamma}_R + \tilde{R} \left| \Psi^{j,l} \right|^2 \right) n_R^{j,l}, \quad (2.11)$$

où $\tilde{h}_1 = \frac{i}{2\tilde{h}_x^2}$ et $\tilde{h}_2 = \frac{i}{2\tilde{h}_y^2}$. $\tilde{h}_x$ et $\tilde{h}_y$ représentant les pas spatiaux.

Par conséquent, nous obtenons pour Ψ ainsi que pour n_R un système d'équations différentielles couplées associée chacune à un nœud (j, l) de la grille spatiale que nous désignerons par k ($1 : n_k$) dans ce qui suit. Cela conduit finalement, en combinant les équations (2.10) et (2.11), à l'écriture matricielle

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

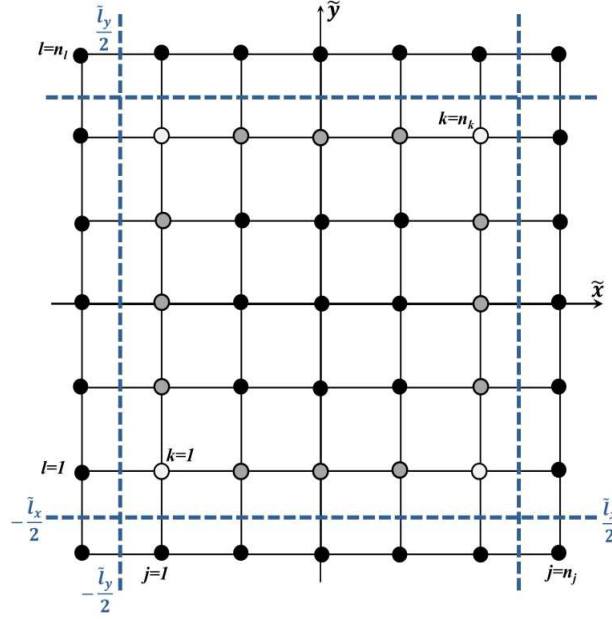


FIGURE 2.1 – Grille de discrétisation spatiale.

suivante :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} [\Psi] \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} [n_R] \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} M_\Psi & 0 \\ 0 & M_{n_R} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} [\Psi] \\ [n_R] \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ [P] \end{pmatrix},$$

où les vecteurs colonnes sont donnés par : $[\Psi] = [\Psi^k]$, $[n_R] = [n_R^{k+n_k}]$ et $[P] = [P^k]$. La matrice A est composée de deux sous matrices : une sous matrice symétrique pentadiagonale M_Ψ (les astérisques indiquent les éléments

2.3 Étude de la stabilité et de la convergence du schéma

La stabilité temporelle et la convergence spatiale sont des conditions indispensables à remplir pour pouvoir exploiter un schéma numérique. Nous allons donc discuter ces deux aspects de notre approche dans cette section.

Stabilité temporelle

Alors qu'un schéma implicite est inconditionnellement stable, une condition de stabilité reliant le pas spatial et le pas temporel doit être respectée dans le cas d'un schéma explicite. Pour un pas spatial donné, cela fixe une valeur maximale pour le pas temporel, qui une fois dépassée, des instabilités numériques commencent à apparaître. Des analyses de stabilité de la méthode des DF combinée à la méthode RK4 pour la résolution de l'équation de G.P standard ont été menées dans [52] où la dépendance aux conditions aux limites a été discutée. En effet, un critère de stabilité a été établi pour l'équation de G.P linéarisée où la non-linéarité ($|\Psi|^2$) a été traitée comme une constante. Ce dernier s'est avéré comparable au critère de stabilité linéaire correspondant à l'équation de Schrödinger quand $V_{ext} = 0$. Dans notre cas, et d'après [52], à deux dimensions, le critère de stabilité linéaire est donnée par $\tilde{h}_t < \tilde{h}_x^2 / \sqrt{2}$ (dans tous nos calculs nous avons pris $\tilde{h}_x = \tilde{h}_y$). En partant de ce résultat comme estimation initiale, nous avons pu repérer l'intervalle de stabilité pour nos calculs.

Pour donner une idée sur le comportement de notre résolution, nous allons considérer le problème stationnaire traité dans [15] où un condensat de microcavité est supposé soumis à une excitation de profil Gaussien continue dans le temps et en absence d'un potentiel extérieur $V_{ext} = 0$. Le système des deux équations (2.8) et (2.9) est par la suite résolu en choisissant comme distributions spatiales initiales pour Ψ et pour n_R :

$$\Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0) = \frac{\sqrt{N_c}}{\tilde{\sigma}_p \sqrt{\pi}} \exp \left\{ -(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) / 2\tilde{\sigma}_p^2 \right\}, \quad (2.12)$$

$$n_R(\tilde{x}, \tilde{y}, 0) = \frac{\tilde{P}_0}{\tilde{\gamma}_R} \exp \left\{ -(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) / 2\tilde{\sigma}_p^2 \right\}, \quad (2.13)$$

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

avec $\tilde{P}_0$ et $\tilde{\sigma}_p$ la puissance de pompage et la largeur de la Gaussienne adimensionnées respectivement. Dans ce contexte, nous présenterons des résultats sur l'évolution temporelle d'une grandeur physique pertinente et d'un grand intérêt expérimental qui est l'énergie du blueshift. Cette dernière est obtenue numériquement à partir de l'équation de G.P à travers des intégrations spatiales pour chaque pas de temps. Pour tester la stabilité temporelle, nous avons fixé dans un premier temps le pas spatial en fixant le nombre de nœuds de la grille dans la fenêtre de calcul, puis nous avons fait varier la valeur du pas temporel. La figure (2.2a) montre comment pour les valeurs de $\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2$ supérieures à la limite estimée de $1/\sqrt{2}$, les résultats divergent très rapidement. En diminuant ce rapport à des valeurs inférieures à $1/\sqrt{2}$, nous commençons à atteindre le régime de stabilité des simulations : pour $\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2 = 0.597$ la stabilité s'étend sur un intervalle de 75 ps environ. Cela montre que le vrai critère de stabilité est inférieur à celui estimé. En baissant encore le facteur $\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2$, la stabilité s'étend sur de plus longues durées. En gardant ce comportement à l'esprit, nous avons adopté la stratégie numérique suivante : en pré-définissant la durée de simulation souhaitée pour une grille spatiale donnée, nous utilisons un critère de stabilité un ordre de grandeur plus bas que celui estimé pour la même durée. Cela nous a permis d'être toujours en zone de stabilité, et, d'économiser en temps de calcul notamment pour nos simulations de courtes durées.

Convergence spatiale

Maintenant, afin de tester la convergence spatiale, nous avons varié le nombre de points de discrétisation, et, nous avons fixé le pas temporel à une valeur assurant la stabilité pour chaque grille. Nous relevons, comme le montre la figure (2.2b), des fluctuations pour les grilles les moins denses ((100×100) et (200×200)). Le zoom dans la figure (2.2b) montre que, en augmentant progressivement le nombre de points de la grille, i.e., en diminuant le pas spatiale, les résultats convergent vers la "même" valeur.

Pour souligner quantitativement le comportement de cette convergence, nous présentons dans le tableau (2.1), un résumé de nos résultats sur l'évolution de la valeur du blueshift en fonction du nombre de points de discrétisation suivant les directions x et y de l'espace ($n_j + 1 = n_l + 1$). Le pas temporel

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

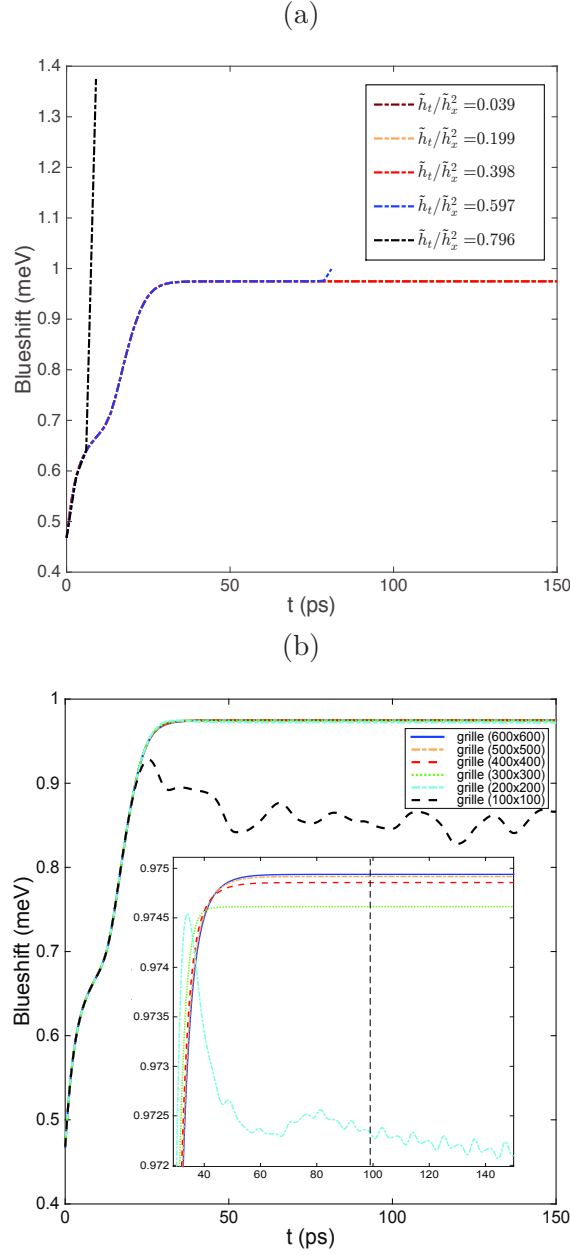


FIGURE 2.2 – Blueshift par particule du condensat : (a) Stabilité en fonction du pas temporel pour une grille de 400×400 nœuds. (b) Convergence en fonction du pas spatial pour un pas temporel de $\tilde{h}_t = 3.10^{-4}$. Paramètres : $m^* = 7.44 \times 10^{-5} m_0$ (m_0 est la masse de l'électron libre); $g_R = 0$; $\mathcal{G} = 0.0175 \mu m^2$; $g = 0.015 meV \mu m^2$; $\hbar R = 0.05 meV \mu m^2$; $\hbar \gamma_c = 0.5 meV$; $\hbar \gamma_R = 2 meV$; $V_{ext} = 0$; $\sigma_p = 20 \mu m$; $P_0 = P = 60.790 \mu m^{-2} ps^{-1}$ [15] and $N_c^{(t=0)} = 1$.

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

TABLE 2.1 – Convergence du blueshift à $t = 99$ ps, pour plusieurs valeurs du pas spatial, et deux valeurs du pas temporel respectant le critère de stabilité dans tous les cas. La puissance de pompage est $P = 60.790 \mu m^{-2} ps^{-1}$.

Points de discrétisation	Pas spatial ($\tilde{h}_x = \tilde{h}_y$)	Facteur de stabilité ($\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2$)	Blueshift (meV)
$\tilde{h}_t = 3 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0074	0.84568
200	0.1005	0.0297	0.97233
300	0.0669	0.0671	0.97461
400	0.0501	0.1194	0.97485
500	0.0401	0.1868	0.97491
600	0.0334	0.2691	0.97493
$\tilde{h}_t = 6 \times 10^{-4}$			
200	0.1005	0.0594	0.97233
300	0.0669	0.1341	0.97461
400	0.0501	0.2388	0.97485
500	0.0401	0.3735	0.97491

prend deux valeurs dans le tableau $\tilde{h}_t = \{3 \times 10^{-4}, 6 \times 10^{-4}\}$ et le nombre de points a été choisi de façon que le critère de stabilité soit toujours respecté. Selon nos calculs, pour $\tilde{h}_t = 3 \times 10^{-4}$, le second chiffre après la virgule se stabilise dès que le nombre de points de la grille atteint (200×200) , alors que (460×460) points sont nécessaires pour stabiliser le quatrième chiffre après la virgule. Ici, il s'avère qu'une fois qu'il commence, le processus de convergence ne dépend pas effectivement de la valeur du pas temporel. Cette affirmation est illustrée dans le tableau pour $\tilde{h}_t = 6 \times 10^{-4}$ qui correspond à un facteur de stabilité deux fois plus grand. Ce dernier comportement permet de réduire les coûts en temps de calcul et de stockage des données dans la mesure où la relaxation du pas temporel est permise. De plus, un des paramètres les plus influents sur le comportement général du processus de convergence est le paramètre de pompage, qui, en augmentant, augmente tout le terme non-linéaire de l'équation de Gross-Pitaevskii. Pour vérifier cette idée, nous avons effectué des tests de convergence pour les trois valeurs ascendantes suivantes

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

TABLE 2.2 – Nombre de points de discrétisation pour une convergence en 1/1000 du blueshift calculé, pour trois puissances de pompage et $t = 99$ ps.

Puissance de pompage ($\mu m^{-2} ps^{-1}$)	Pas temporel ($\tilde{h}_t$)	Points de discrétisation	Blueshift (meV)
$P_1 = 25.835$	3×10^{-4}	100	0.306
	6×10^{-4}	100	0.306
$P_2 = 60.790$	3×10^{-4}	240	0.974
	6×10^{-4}	240	0.974
$P_3 = 85.106$	3×10^{-4}	490	1.503
	6×10^{-4}	490	1.503

du pompage : $P_1 = 25.835 \mu m^{-2} ps^{-1}$, $P_2 = 60.790 \mu m^{-2} ps^{-1}$ et $P_3 = 85.106 \mu m^{-2} ps^{-1}$, où nous avons cherché le nombre de points de discrétisation assurant la convergence à trois chiffres de précision. Les résultats sont résumés dans le tableau (2.2). A travers ce dernier nous remarquons qu'une augmentation de la valeur de la puissance de pompage décélère le processus de convergence. Cela signifie que, afin de maintenir la même précision des calculs tout en augmentant la non-linéarité, il faut augmenter le nombre de points de discrétisation. Ici encore, le pas temporel joue exactement le même rôle sur le processus de convergence. Les détails du calcul de convergence pour les trois puissances sont fournis dans l'annexe (B).

2.4 Validation du code de calcul

Afin d'examiner la validité de nos calculs, nous présenterons dans ce qui suit des comparaisons avec des résultats numériques existants dans la littérature. Les tests considérés sont les suivants :

- L'étude du passage du régime transitoire au régime permanent d'un condensat hors équilibre piégé dans un potentiel harmonique [53].
- L'étude d'un condensat de polaritons d'une microcavité semi-conductrice sous excitation de profil Gaussien et continue dans le temps [15].

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

Condensation dans un potentiel harmonique

Dans ce premier test, nous considérons la situation étudiée dans [53] concernant un condensat dans un potentiel harmonique où l'équation de G.P dissipative a été exprimée comme suit

$$i \frac{\partial \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \left\{ -\Delta + V_{ext}(\tilde{x}, \tilde{y}) + \tilde{g} \mid \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \mid^2 + \frac{i}{2} \left(\tilde{P} - \tilde{\gamma}_c - \tilde{r} \mid \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \mid^2 \right) \right\} \Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}), \quad (2.14)$$

$V_{ext}(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{1}{2} (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2)$ est le potentiel harmonique bidimensionnel. En effet, une telle écriture de l'équation de G.P suppose, différemment du modèle des équations couplées décrit dans le chapitre précédent, qu'une population permanente de polaritons est directement pompée dans le condensat. La déplétion de cette population à travers des processus de diffusion polaritons-polaritons, émanant des interactions répulsives causées par la fraction excitonique, est vue comme une saturation de gain : ce terme empêche la divergence des calculs numériques. Afin de comparer directement nos résultats avec ceux trouvés avec un schéma FDTD (Finite-Difference Time-Domain) généralisé dans ce travail, nous avons utilisé exactement les mêmes paramètres et la même distribution initiale : $\Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0)$ présente la solution du premier état excité d'une particule piégée dans un potentiel harmonique bidimensionnel quand l'hamiltonien est réduit à celui de l'équation de Schrödinger

$$\Psi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\tilde{x} + i\tilde{y}) \exp \left\{ -(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) \right\}.$$

Nos résultats sont présentés dans la figure (2.3). Ils sont en très bon accord avec ceux reproduits avec les données extraites de la figure 2.c de [53].

Ce test présente une validation partielle pour notre résolution numérique. En effet, bien qu'il introduise les termes de gain et de perte et qu'il reproduise la dynamique de la fonction d'onde, cet exemple ignore l'existence d'un réservoir évoluant de façon spatio-temporelle à travers des processus de diffusion.

Condensation sous un grand spot Gaussien

Pour aller plus loin dans notre validation, nous avons effectué un second

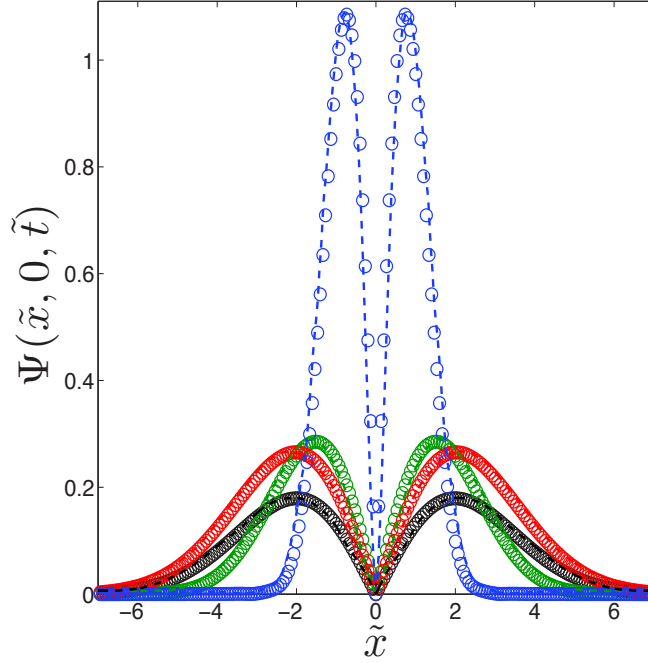


FIGURE 2.3 – Évolution jusqu'à l'état permanent de la fonction d'onde d'un condensat hors équilibre piégé dans un potentiel harmonique. Les cercles indiquent les résultats de notre schéma numérique alors que les tirets indiquent ceux reproduits avec les données extraites de [53] pour : $\tilde{t} = 20$ (bleu), $\tilde{t} = 10$ (rouge), $\tilde{t} = 5$ (vert) and $\tilde{t} = 1$ (noir). Les calculs ont été effectués avec une grille 599×599 nœuds dans un domaine $\tilde{l}_x = \tilde{l}_y = 40$ et avec un pas spatial $\tilde{h}_t = 0.001$. Paramètres : $\tilde{g} = 1.0$, $\tilde{P} = 0.2$, $\tilde{\gamma}_c = \tilde{\gamma} = 0.1$.

test où nous avons considéré le condensat de polaritons d'une microcavité II-VI démontré dans [11] et modélisé en régime stationnaire en utilisant les deux équations couplées du modèle G.P généralisé dans [15]. Ici, le pompage a été choisi comme un grand spot de profil Gaussien dans l'espace, de largeur ($\sigma_p = 20\mu m$) et continu dans le temps. Dans nos simulations, nous avons essayé de reproduire les solutions stationnaires en faisant évoluer nos calculs dynamiques jusqu'au régime permanent correspondant. Nous avons, de manière analogue à [15], effectué nos calculs en absence d'un potentiel extérieur ($V_{ext} = 0$) et avec les mêmes paramètres. Comme distribution initiale, nous avons choisi d'attribuer un profil Gaussien de même largeur que le spot d'excitation à la fonction d'onde et au réservoir : les expressions sont les

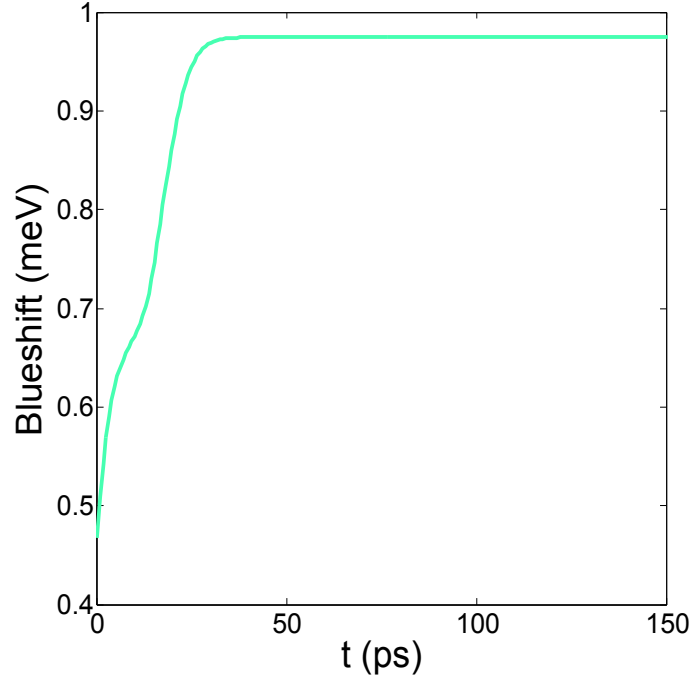


FIGURE 2.4 – Evolution jusqu’au régime permanent du blueshift par particule dans le condensat. Paramètres : $m^* = 7.44 \times 10^{-5} m_0$; $g_R = 0$; $\mathcal{G} = 0.0175 \mu m^2$; $g = 0.015 meV \mu m^2$; $\hbar R = 0.05 meV \mu m^2$; $\hbar \gamma_c = 0.5 meV$; $\hbar \gamma_R = 2 meV$; $V_{ext} = 0$; $\sigma_p = 20 \mu m$; $P_0 = P = 60.790 \mu m^{-2} ps^{-1}$ [15] and $N_c^{(t=0)} = 1$.

mêmes que dans les équations (2.12) et (2.13). Nous soulignons que le régime stationnaire du condensat est insensible à ce choix de distribution initiale.

Nous commençons par représenter l’évolution temporelle du blueshift par particule sur la figure (2.4). Nous remarquons le passage du condensat par un régime transitoire rapide avant que la dynamique du système n’atteigne un régime permanent où le blueshift calculé vaut $0.97 meV$ ce qui est en accord quantitatif avec la valeur expérimentale [11] et celle prédite théoriquement au régime stationnaire correspondant [15]. Sur la figure (2.5), nous représentons la variation suivant l’axe des y du vecteur d’onde local k_c du condensat défini comme le gradient de la phase de la fonction d’onde. Ce dernier caractérise l’accélération du condensat quand il est éjecté depuis le centre du spot laser. En comparaison avec le résultat trouvé dans [15], nos calculs révèlent une propagation légèrement moins rapide loin du spot d’excitation. Nous remar-

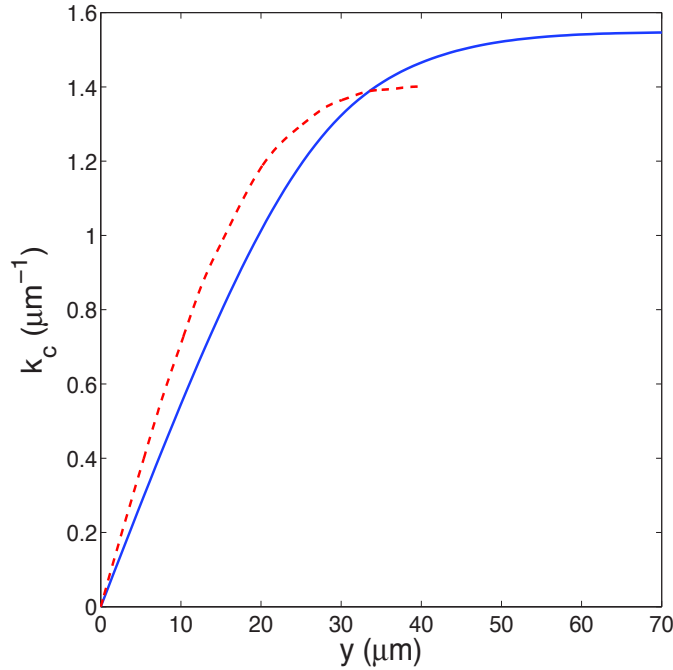


FIGURE 2.5 – Vecteur d’onde local du condensat au régime permanent : comparaison entre notre résultat (trait continue) et le résultat trouvé dans [15] (tirets).

quons en plus que le régime balistique s’établit un peu plus loin avec un vecteur d’onde comparable. Cette différence est probablement due à une légère différence dans la valeur de la masse de polariton utilisée. L’établissement des propriétés stationnaires à partir de l’évolution des calculs dynamiques jusqu’au régime permanent correspondant représente une seconde validation partielle de notre schéma numérique.

Conclusion

Nous avons exposé, en détails, notre travail numérique pour la résolution complète des équations de Gross-Pitaevskii. Nous avons justifié la stabilité et la convergence de nos calculs. Nous avons justifié également la validité de nos calculs. Cet effort numérique a été fourni et exploité pour la modélisation des propriétés des condensats de Bose-Einstein des polaritons excitoniques des microcavités semi-conductrices. Les chapitres suivants dévoilerons les princi-

CHAPITRE 2. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE BASÉ SUR L'ÉQUATION DE G.P

paux résultats que nous avons trouvés dans ce contexte.

Chapitre 3

Seuil de condensation et stationnarité

Sommaire

3.1	État de l'art	55
3.2	Étude d'un cas d'école sous excitation continue en grand spot	57
3.2.1	Comportement aux alentours du seuil de condensation	57
3.2.2	Nouvelle définition du seuil de condensation dans les simulations	59
3.2.3	Temps d'établissement du régime permanent	63
3.3	Effet de la taille du spot sur le seuil de condensation	64
3.3.1	Microcavité CdTe	65
3.3.2	Microcavité ZnO	68
3.3.3	État de l'art des instabilités	70
3.4	Seuil de condensation sous excitation impulsionnelle	72

Le comportement autour du seuil de condensation de Bose-Einstein est une question importante, pourtant, jusqu'aujourd'hui encore sans réponse claire et définitive. Nous soulignons dans ce chapitre le comportement du condensat de polaritons aux alentours proches du seuil de condensation. Et,

nous proposons une définition de ce seuil, sous excitation continue, à travers la self énergie qui dérive du terme non linéaire dans l'équation de Gross-Pitaevskii. Ensuite, nous regardons le comportement du seuil en fonction de la taille du spot de pompage, dans le cas d'école de la microcavité à puits quantiques CdTe. Dans ce contexte, nous discutons des instabilités dans nos résultats avec les paramètres de la condensation dans la microcavité ZnO à couche massive. Finalement, nous reprenons la réflexion sur le seuil à travers des calculs sous excitation impulsionnelle.

3.1 État de l'art

Le seuil de condensation sous excitation non-résonante, via un réservoir, est une grandeur expérimentale bien connue pour chaque système polaritonique étudié : dans chacun d'entre eux, on mesure l'intensité d'émission des polaritons non-condensés puis celle du condensat en fonction de la densité de puissance de l'excitation non-résonante, pour déterminer la densité de puissance au seuil. Modulo quelques hypothèses sur la génération non résonante des excitons dans le réservoir, celle-ci est ensuite traduite en une densité critique d'excitons dans le réservoir au seuil de condensation.

D'un point de vue théorique, dans les deux modèles abordés au premier chapitre, Boltzmann et Gross-Pitaevskii, le seuil, en densité de particules présentes dans le réservoir en régime stationnaire, est bien défini dans le cas d'une excitation homogène dans le plan (systèmes 2D).

- Dans le modèle de Boltzmann [18, 10] : notamment, une comparaison des densités au seuil dans différents matériaux a été effectuée dans [44].
- Dans le modèle de Gross-Pitaevskii, le seuil est donné par la relation analytique $Rn_R^{th} = \gamma_c$.

Notons que le modèle de Boltzmann peut être prédictif sur la valeur du seuil, déterminée sur la base de la connaissance de l'ensemble des taux de relaxation et de recombinaison des états excitoniques. Dans le cas du modèle G.P, le paramètre effectif R de relaxation entre le réservoir et la branche basse polaritonique est, au contraire, ajusté pour reproduire les seuils mesurés expérimentalement. Cependant, sous un spot laser, qu'il soit focalisé (1 – 3

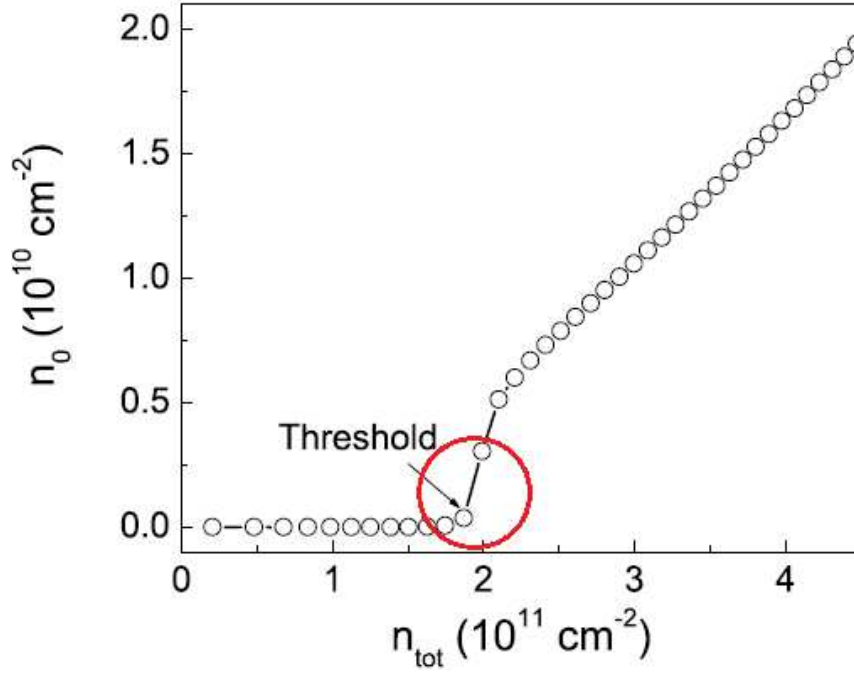


FIGURE 3.1 – Investigation du seuil en régime permanent selon des calculs avec le modèle de Boltzmann de l'évolution de la densité de polaritons dans le condensat en fonction de celle de ceux du réservoir [17].

μm) ou étendu ($20 \mu\text{m}$), la détermination du seuil est plus compliquée.

La détermination du seuil est rarement abordée dans la littérature ([15, 57, 41]). Certaines simulations numériques montrent des comportements surprenants au seuil. Dans la référence [17], où des calculs sous une excitation continue, pour une microcavité CdTe ont été menés, le seuil a été considéré comme, à peu près, la densité de polaritons présents dans le réservoir en régime permanent pour laquelle apparaît une densité non nulle de polaritons dans le condensat (voir figure (3.1)). Cependant, une telle définition n'est pas vraiment claire et précise. D'une part, puisqu'un tel point est vraiment difficile à identifier sur la courbe utilisée. De plus, l'évolution de la densité de polaritons dans le condensat en fonction de la densité de particule dans le réservoir, montre un comportement différent de la caractéristique habituelle d'un laser, avec un saut de la densité de polaritons au seuil. Cela soulève une question sur la façon avec laquelle ont été déterminés les résultats dans la

région du seuil.

3.2 Étude d'un cas d'école sous excitation continue en grand spot

Pour étudier la détermination du seuil de condensation dans le cadre du modèle GP, nous allons prendre l'exemple d'un condensat sous un spot relativement étendu.

3.2.1 Comportement aux alentours du seuil de condensation

Nous considérons une excitation de profil spatial Gaussien, continue dans le temps, démarrant à $t=0$. La taille du spot est fixée à $\sigma_p = 20 \mu m$ et, les paramètres sont de nouveau, ceux d'une microcavité CdTe [15] (déjà utilisés dans le deuxième chapitre pour la validation du schéma numérique dans le paragraphe "Condensation sous un grand spot Gaussien"). Nous rappelons que, dans notre résolution dynamique de l'équation de Gross-Pitaevskii, nous avons considéré comme Gaussiennes, les distributions spatiales à $t = 0$, de Ψ et de nR

$$\Psi(x, y, 0) = \frac{\sqrt{N_c}}{\sigma_p \sqrt{\pi}} \exp \left\{ - (x^2 + y^2) / 2\sigma_p^2 \right\},$$

$$n_R(x, y, 0) = \frac{P_0}{\gamma_R} \exp \left\{ - (x^2 + y^2) / 2\sigma_p^2 \right\}.$$

Nous commençons notre étude du seuil par l'examen de l'évolution cinétique de la population N_c dans le condensat, en fonction de la puissance de pompage. Lorsque la puissance augmente, nous pouvons remarquer trois comportements à partir de nos résultats représentés sur la figure (3.2) :

- avant le seuil de condensation (a), la population du condensat connaît un faible pic transitoire vers $50 ps$ avant de décliner totalement au régime permanent.
- après le seuil de condensation (c), le nombre de polaritons dans le condensat commence à augmenter avec le temps, puis sature au régime permanent.

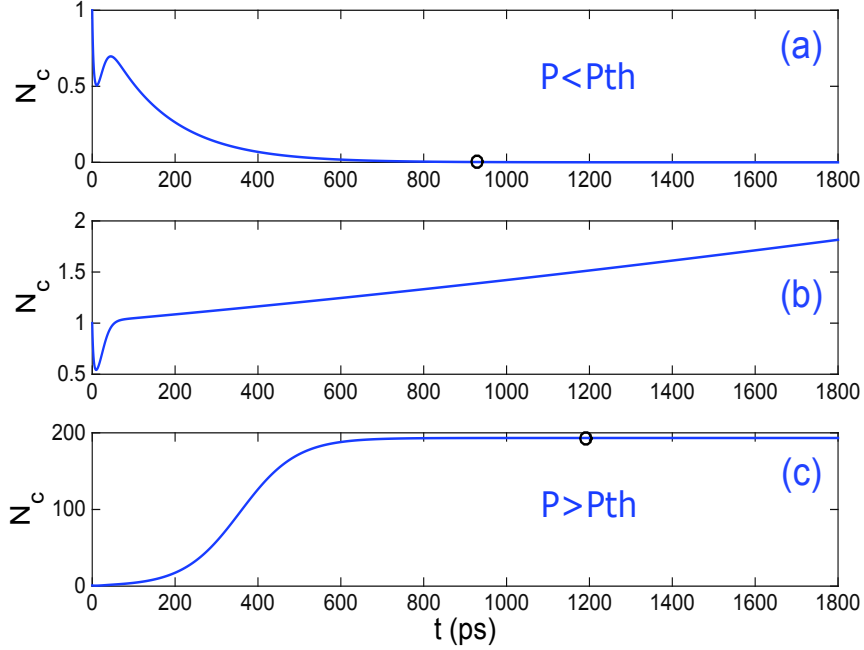


FIGURE 3.2 – Évolution temporelle de la population N_c des polaritons dans le condensat. La puissance de pompage augmente de $P < P^{th}$ (a), à $P > P^{th}$ (c). Aux alentours proches du seuil (b), N_c diverge. Les cercles indiquent le début du régime permanent. Paramètres : $m^* = 7.44 \times 10^{-5} m_0$; $g_R = 0$; $\mathcal{G} = 0.0175 \mu m^2$; $g = 0.015 meV \mu m^2$; $\hbar R = 0.05 meV \mu m^2$; $\hbar\gamma_c = 0.5 meV$; $\hbar\gamma_R = 2 meV$; $V_{ext} = 0$; $\sigma_p = 20 \mu m$ [15] et $N_c^{(t=0)} = 1$.

— dans le régime intermédiaire (b), nous remarquons qu’aucun régime permanent n’est observé au bout de notre intervalle de calcul de 1800 ps , mais, au contraire, N_c diverge.

Notons que le temps d’établissement du régime permanent dans les cas (a) et (c) est de plusieurs centaines de ps , donc très long devant les temps de vie du réservoir et des polaritons. Ce temps est indiqué par un cercle sur la courbe. Il sera discuté dans la section (3.2.3). En particulier, de nombreuses expériences sont réalisées sous excitation de longue durée, typiquement $0.3-1 ns$, dans des matériaux à grand gap (GaN,ZnO), ce qui est souvent interprété comme une condition d’excitation quasi-continue [9, 10, 58, 59, 60, 61, 62, 63]. Nous discuterons cette hypothèse et l’établissement d’un régime stationnaire sous excitation ”quasi-continue” dans le cas d’une microcavité ZnO, dans le

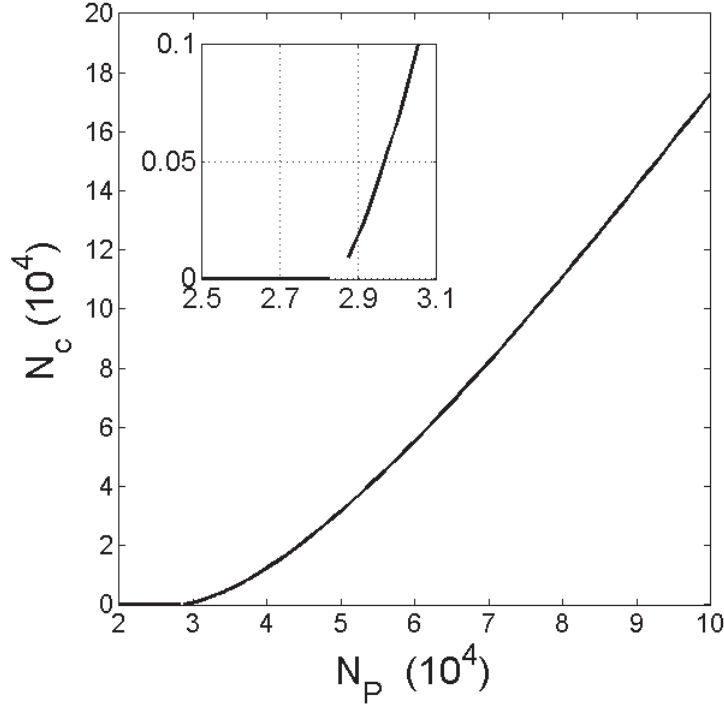


FIGURE 3.3 – Évolution, en régime permanent, de la population du condensat N_c en fonction de la population initialement créée suite au pompage N_P . Le zoom à gauche est pris aux alentours proches du seuil.

quatrième chapitre.

3.2.2 Nouvelle définition du seuil de condensation dans les simulations

Nous adoptons ici un raisonnement similaire à celui dans [17] : nous traçons, une fois le régime permanent établi, l'évolution de la population de polaritons dans le condensat N_c en fonction de la population initialement créée suite au pompage N_P , et qui décline après une durée de $1/\gamma_R$ ($\iint P(x, y) dx dy = \gamma_R N_P$). Dans ce cas, nous ne pouvons toujours rien conclure sur le point de passage d'un régime avant le seuil, où le condensat est vide, à un régime après le seuil, où N_c augmente progressivement en augmentant la puissance (voir figure (3.3)) : la divergence aux alentours du seuil, dans la limite de notre temps de calcul de 1800 *ps*, s'étend sur l'intervalle

CHAPITRE 3. SEUIL DE CONDENSATION ET STATIONNARITÉ

étroit montré par le zoom sur la figure). Par conséquent, pour la recherche du seuil de condensation, nous avons essayé une autre approche. Nous notons que dans ces résultats, la population N_P correspond à la population dans le réservoir $N_R^{(t=0)} = \iint n_R(x, y, 0) dx dy$, à $t=0$.

En effet, dans l'étude des condensats, il est important de comprendre les contributions partielles des différentes énergies dans l'énergie propre totale du condensat, le blueshift :

- l'énergie cinétique $\langle \Psi | \frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta | \Psi \rangle$ qui reflète la distribution du condensat dans l'espace des impulsions.
- l'énergie potentielle $\langle \Psi | (g_R n_R + \hbar \mathcal{G} P + V_{ext}) | \Psi \rangle$ issue des différentes interactions des particules du système en plus d'un éventuel confinement.
- la self énergie $\langle \Psi | g | \Psi |^2 | \Psi \rangle$ qui est la signature du condensat lui-même.

Notons aussi qu'il est intéressant de suivre l'évolution du terme de dissipation $i \frac{\hbar}{2} \langle \Psi | (R n_R - \gamma_c) | \Psi \rangle$ qui renseigne sur les gains et les pertes dans le condensat. Sur la figure (3.4), nous examinons l'évolution en fonction du temps de chacune des énergies décrites ci-dessus par particules, pour deux puissances, l'une avant le seuil et l'autre après le seuil.

- avant le seuil ($P = 0.76 P^{th}$), figure (3.4a), nous remarquons que les pertes dépassent le gain. Ceci contrarie la formation du condensat et la self énergie demeure nulle.
- après le seuil ($P = 1.76 P^{th}$), figure (3.4b), le système ressent l'effet d'un pic de gain qui apparaît vers 7.5 ps, avant qu'il atteigne son régime permanent où les gains et les pertes se compensent (clamping du gain). Notons le retard du pic de la self-énergie (apparaît vers 18 ps) qui est le signe de la formation du condensat.

Sur la figure (3.5), nous traçons, une fois le régime permanent établi, l'évolution des différentes énergies par particule avec la puissance de pompage. Nous remarquons que, pendant tout le régime avant le seuil, l'augmentation de la puissance de pompage prend son rôle pour la compensation des pertes mais, cela reste toujours inefficace pour la création d'un condensat. Nous remarquons également, que, dans ce cas, toutes les fonctions des énergies

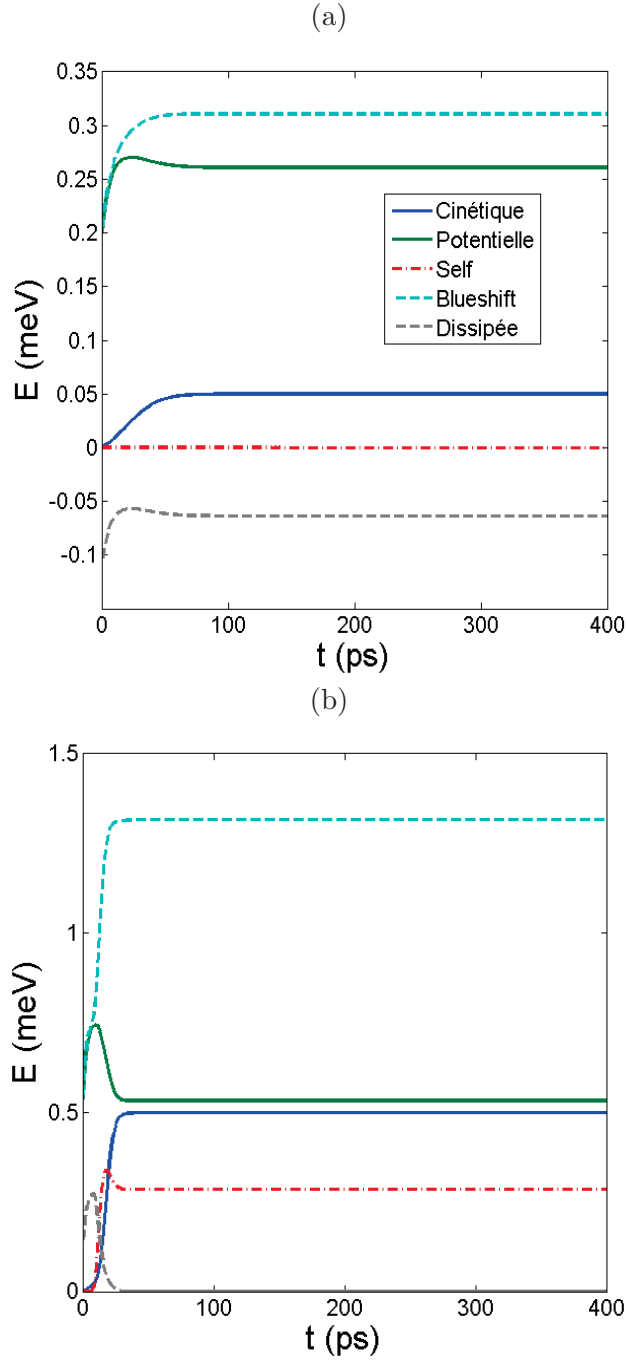


FIGURE 3.4 – Évolution temporelle jusqu’au régime permanent des différentes énergies par particule dans le condensat pour deux puissances de pompage : une avant le seuil, à $P = 0.76 P^{th}$ ($N_P = 2.1677 \times 10^4$), graphe (a), et une après à $P = 1.76 P^{th}$ ($N_P = 5.7805 \times 10^4$), graphe (b). La légende est la même pour les deux figures.

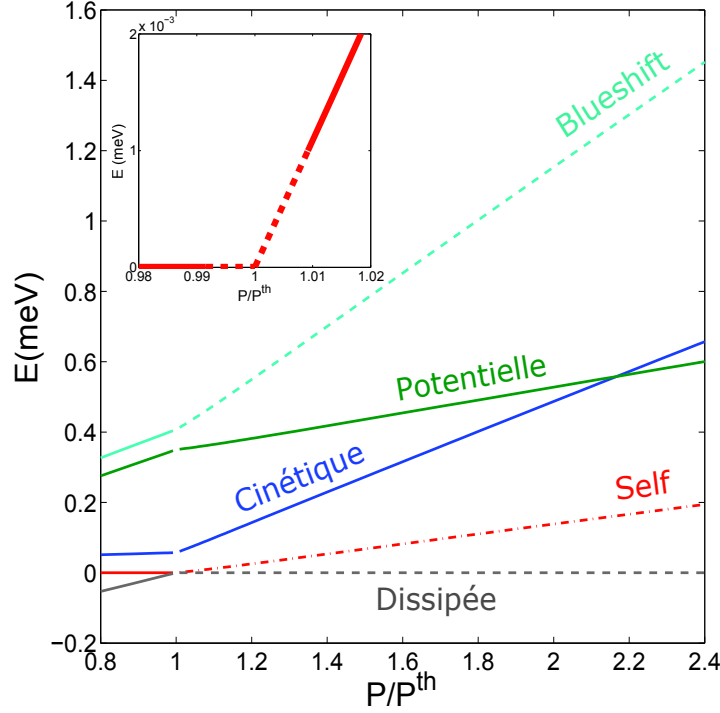


FIGURE 3.5 – Évolution des différentes énergies par particule dans le condensat en fonction de la puissance de pompage une fois le régime permanent établi. Le zoom en haut à gauche présente la self énergie par particules aux alentours proches du seuil. Le seuil correspond à $N_P = 2.8515 \times 10^4$.

possèdent une singularité du premier ordre, i.e, une discontinuité de la dérivée première. En effet, le comportement linéaire de la self énergie après le seuil peut être démontré analytiquement en tenant compte des deux équations suivantes valables en régime stationnaire :

$$P(x, y) = \gamma_R n_R(x, y) + R n_R(x, y) | \Psi(x, y) |^2, \quad (3.1)$$

$$\langle R n_R \rangle = \langle \gamma_c \rangle. \quad (3.2)$$

Sachant que $P(x, y) = P_0 f(x, y)$ ($f(x, y)$ étant le profil spatial du pompage), et en écrivant $\Psi(x, y) = \sqrt{N_c} \Psi_0(x, y)$, ce qui suppose que le profil spatial $\Psi_0(x, y)$ de la fonction d'onde au régime stationnaire est insensible à la puis-

sance de pompage, l'expression de la self énergie notée E_s peut s'écrire

$$\begin{aligned} E_s &= \iint \frac{g}{2} |\Psi(x, y)|^4 dx dy \\ &= \frac{g N_c P_0}{2 \gamma_c} \iint f(x, y) |\Psi_0(x, y)|^2 dx dy - \frac{g \gamma_R N_c}{2 R}. \end{aligned}$$

Ainsi, après le seuil, la self énergie par particule varie linéairement en fonction de la puissance de pompage. Par conséquent, nous définissons le seuil de condensation dans notre approche, par le point où la self énergie connaît sa singularité ce qui correspond au déclenchement de la non-linéarité. La discontinuité de la dérivée est un critère plus précis pour la détermination du seuil que sur la base de la figure (3.3). Par conséquent, nous considérons que nous avons proposé une approche satisfaisante pour la détermination du seuil qui raccorde l'apparition d'une population non nulle de polaritons au déclenchement des effets non linéaires signatures du condensat.

3.2.3 Temps d'établissement du régime permanent

Après avoir défini le seuil avec l'approche décrite dans le paragraphe précédent, nous allons le caractériser à travers la poursuite du temps d'établissement du régime permanent noté t_{ss} en augmentant la puissance de pompage. Ce temps est défini comme l'instant auquel la variation de la population dans le condensat est de 10^{-5} près. Dans l'exemple donné sur la figure (3.2), juste après le seuil, il est de l'ordre de 1 ns et est indiqué par un cercle sur les évolutions temporelles. Les résultats sont présentés sur la figure (3.6). Nous soulignons d'abord la singularité au niveau du seuil P^{th} où on détermine une asymptote au temps t_{ss} qui tend vers l'infini de part et d'autre de celle-ci. Et, nous notons l'asymétrie de ce comportement asymptotique qui s'avère plus adjacent pour les puissances avant le seuil. Par conséquent, si nous considérons deux points de la courbe, d'abscisses symétriques par rapport au seuil, par exemple $P/P^{th} = 0.95$ et $P/P^{th} = 1.05$, l'établissement du régime permanent sera plus rapide pour les puissances avant le seuil. Ceci confirme encore une fois qu'expérimentalement, dans le cas d'une excitation quasi-continue, la région des puissances autour du seuil est une région difficile à traiter et à exploiter.

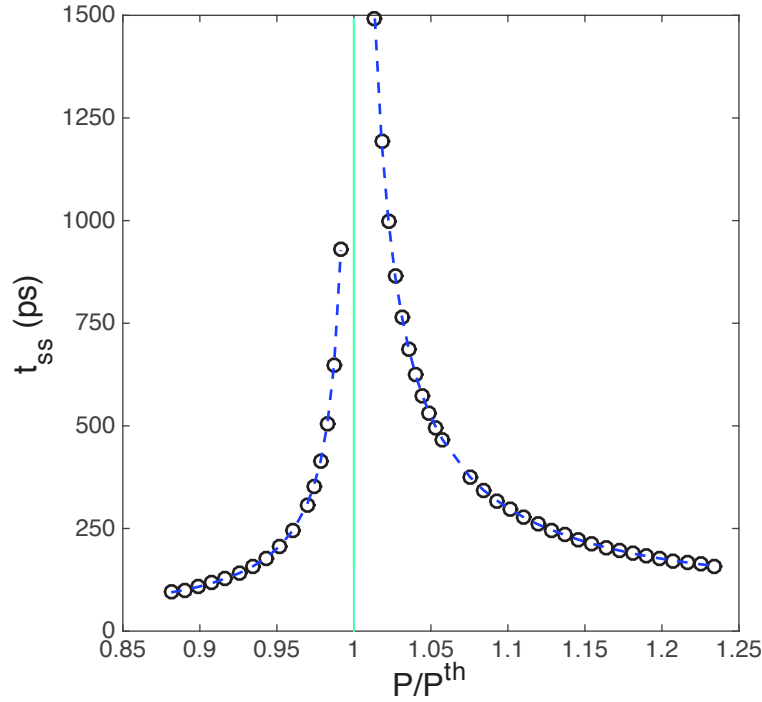


FIGURE 3.6 – Temps d’établissement du régime permanent en fonction de la puissance de pompage normalisée par rapport au seuil : les cercles indiquent les points calculés alors que les courbes en tirets sont obtenus par interpolation.

3.3 Effet de la taille du spot sur le seuil de condensation

L’effet de la taille du spot sur le régime de condensation a été identifié très tôt, en distinguant le régime de forte focalisation du laser d’excitation (« tightly focused excitation ») et le régime des grands spots [15]. L’effet de la forme précise du spot, Gaussienne ou top-hat, a aussi été explorée expérimentalement [7]. Les effets de propagation dans le plan jouent un rôle majeur dans le cas de l’excitation focalisée [48, 58]. Cependant, à notre connaissance, il n’existe pas d’étude exhaustive de l’évolution du seuil de condensation en fonction de la taille du spot dans les microcavités GaAs et CdTe. Ce n’est que très récemment qu’une telle étude a été menée, dans le cas des microcavités GaN et ZnO. Dans cette partie, nous gardons le profil

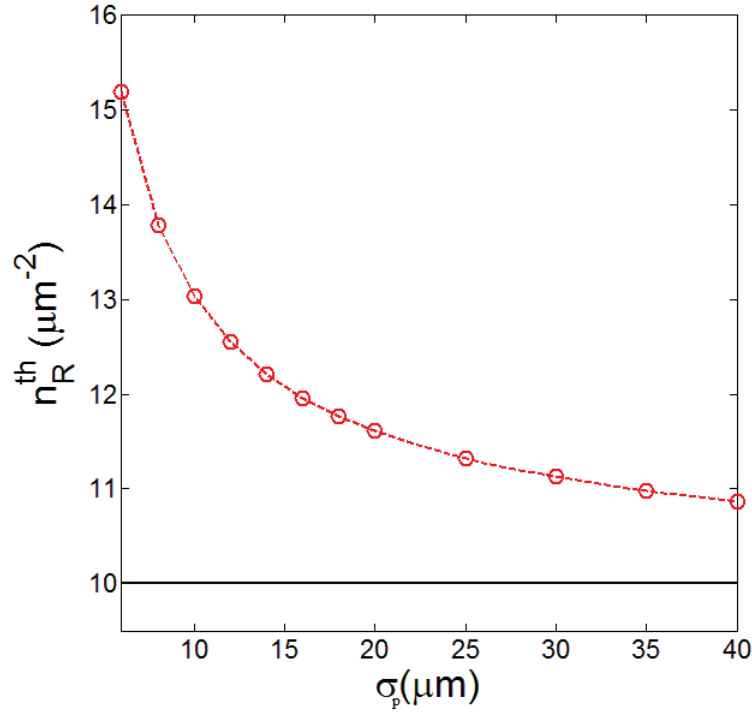


FIGURE 3.7 – Évolution, en régime permanent, de la densité seuil créée suite au pompage avec l’augmentation de la largeur σ_p du spot d’excitation Gaussien. Les cercles indiquent les points calculés. La courbe horizontale indique la valeur du seuil 2D pour un spot infini.

spatial de l’excitation laser Gaussien et nous jouons sur sa taille σ_p . Nous poursuivons le travail avec une excitation continue dans le temps afin de pouvoir calculer le seuil pour chaque cas.

3.3.1 Microcavité CdTe

Pour un intervalle de $\sigma_p = [6, 40] \mu\text{m}$, nous représentons le calcul du seuil pour une microcavité CdTe sur la figure (3.7). Visiblement, le seuil de condensation en densité de particules créée par le pompage baisse en augmentant la taille du spot d’excitation. Cependant, il reste toujours supérieur au seuil 2D estimé pour une excitation infinie.

En effet, ce résultat est en accord avec le résultat expérimental récent [63] qui montre l’évolution du seuil de condensation sous excitation quasi

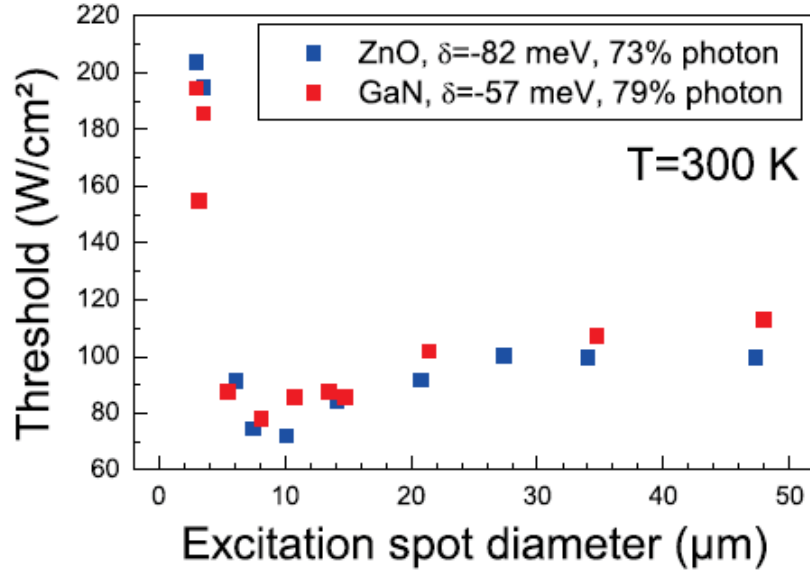


FIGURE 3.8 – Mesures expérimentales du seuil de condensation en fonction du diamètre du spot d’excitation de durée 400 *ps* pour deux microcavités ZnO et GaN [63]

continue, une impulsion laser de durée 400 *ps*, pour deux microcavités à matériaux à grands gaps, ZnO et GaN, en fonction de la taille du spot d’excitation (voir figure (3.8)). Nous notons que, pour ce résultat, la ré-augmentation du seuil au delà d’un diamètre de 10 μm est attribuée à la présence d’un désordre dans la structure, donnée que nous négligeons dans nos calculs. Expérimentalement, chaque valeur du seuil est calculée en moyennant sur les résultats de 10 mesures. De façon analogue, nous soulignons les contraintes numériques dans ce genre de simulations et le soin particulier qu’elles nécessitent. D’abord, la localisation de l’intervalle du seuil passe, pour chaque valeur de σ_p , par des simulations en fonction de la puissance de pompage. Notons que chaque simulation nécessite l’établissement du régime permanent, et donc, un intervalle temporel de calcul relativement long vue la divergence expliquée ci-dessus aux alentours du seuil. Ceci se combine à une contrainte de stabilité numérique par rapport au pas spatial : en essayant d’adopter un pas relaxé pour les grands diamètres, des fluctuations dans les résultats apparaissent. De plus, pour poursuivre l’étude en fonction de la

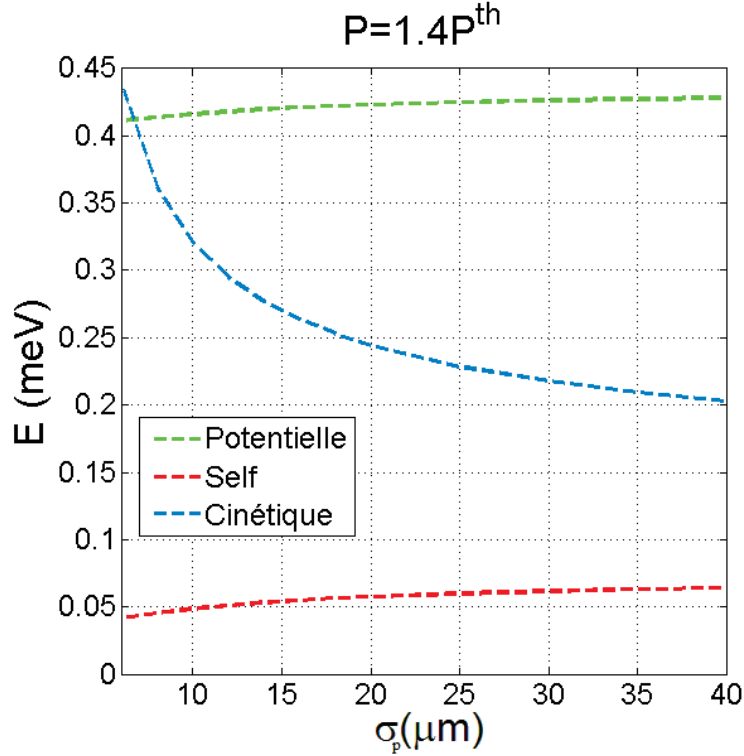


FIGURE 3.9 – Évolution, en régime permanent, de l'énergie cinétique, l'énergie potentielle et la self énergie par particule du condensat en fonction du diamètre du spot de pompage pour une puissance $P = 1.4P^{th}$.

taille du spot, une fois déterminé le seuil pour chaque taille du spot, nous reprenons les simulations pour une puissance de pompage fixée relativement loin du seuil pour assurer l'établissement du régime permanent.

Nous représentons sur la figure (3.9), pour une puissance $P = 1.4P^{th}$, l'évolution de l'énergie cinétique, l'énergie potentielle et la self énergie du condensat en fonction du diamètre du spot. En effet, avec un petit diamètre, $\sigma_p = 6 \mu m$ dans ce cas, la forte densité de particules créée sous le spot induit l'apparition du condensat au cœur d'un potentiel répulsif qui l'expulse loin du lieu d'excitation. Ce dernier fait explique le maximum d'énergie cinétique observé en régime permanent dans la courbe ; signe de la "fuite" permanente des polaritons de la région d'excitation et la propagation du condensat. En augmentant le diamètre du spot, la baisse du seuil s'accompagne d'une baisse de l'énergie cinétique du condensat. Dans ce cas, ce dernier est de plus en plus

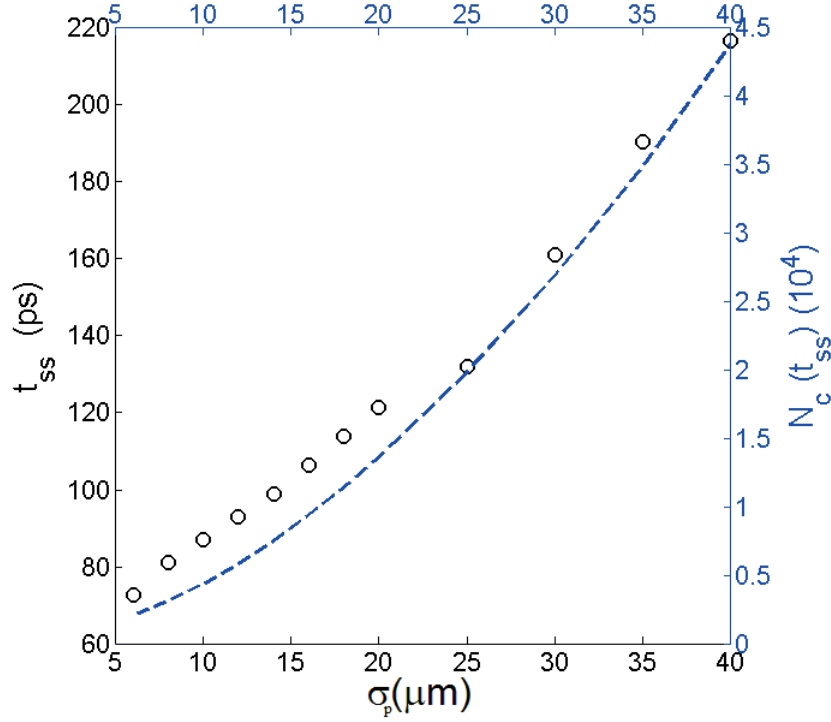


FIGURE 3.10 – Évolution, en régime permanent, de la population N_c du condensat (tirets) et du temps d'établissement du régime permanent t_{ss} (cercles) en fonction du diamètre du spot de pompage.

décorrélé des interactions avec le réservoir de particules non condensées. Nous remarquons une légère augmentation de la non-linéarité et la condensation est renforcée.

La courbe en tirets bleues dans la figure (3.10), montre la croissance de la population du condensat en fonction de σ_p pour la même puissance de pompage. Nous remarquons aussi, à partir de la même figure, que ceci affecte le temps d'établissement du régime permanent qui croît également avec la croissance du diamètre du spot.

3.3.2 Microcavité ZnO

Nous avons déjà souligné un intérêt particulier à la condensation des polaritons ZnO, justifié par les expériences en cours au L2C. Afin d'explorer l'effet de la taille du spot d'excitation sur le seuil de condensation en ZnO,

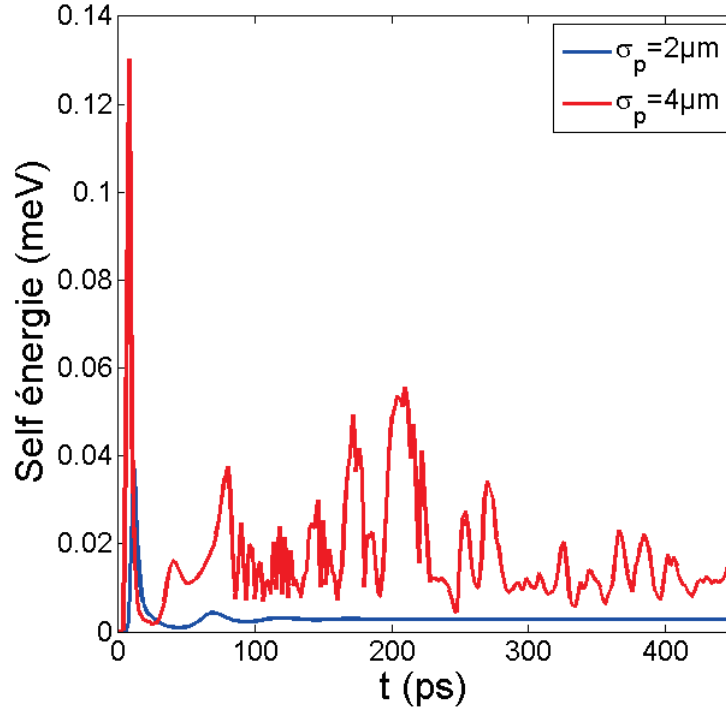


FIGURE 3.11 – Évolution temporelle de la self énergie d'un condensat ZnO pour deux valeurs de la taille du spot : $\sigma_p = \{2, 4\} \mu m$. Paramètres : $m^* = 7.1 \times 10^{-5} m_0$; $g_R = 5 \times 10^{-6} meV \mu m^2$; $\mathcal{G} = 0$; $g = 2.209 \times 10^{-6} meV \mu m^2$; $\hbar R = 3.3 \times 10^{-6} meV \mu m^2$; $\hbar \gamma_c = 0.35 meV$; $\hbar \gamma_R = 0.016 meV$; $V_{ext} = 0$; $N_c^{(t=0)} = 1$ et $N_P = N_R^{(t=0)} = 8.042 \times 10^7$.

nous avons suivi, exactement, la même démarche que précédemment avec CdTe. La figure (3.11) montre l'évolution temporelle de la self énergie d'un condensat ZnO pour deux valeurs ascendantes de la taille du spot Gaussien de pompage σ_p . Pour $\sigma_p = 2 \mu m$, nous constatons l'établissement du régime permanent après une courte phase transitoire. En augmentant la valeur à $\sigma_p = 4 \mu m$, aucun régime permanent ne s'établit dans la limite de notre intervalle de calcul (450 ps), au contraire, des instabilités temporelles s'installent. En conséquence, en faisant varier la puissance de pompage, nous ne pouvons pas déterminer le seuil de condensation pour les σ_p dépassant la limite supérieure d'un intervalle étroit de valeurs. Sur la figure (3.12), nous représentons le profil du module de la fonction d'onde du condensat ZnO

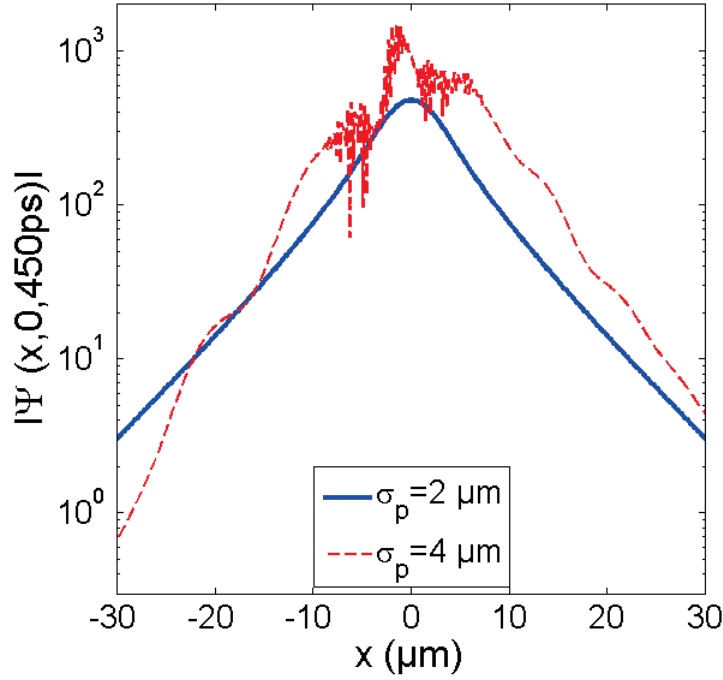


FIGURE 3.12 – Module de la fonction d’onde du condensat ZnO suivant l’axe des x pour deux valeurs de la taille du spot : $\sigma_p = \{2, 4\} \mu m$, à $t = 450 ps$.

suivant une direction de l’espace. Nous remarquons qu’à $t = 450 ps$ où le régime permanent s’établit pour $\sigma_p = 2 \mu m$, des instabilités spatiales accompagnent les instabilités temporelles déjà mentionnées pour $\sigma_p = 4 \mu m$. Sachant que pour toutes nos simulations nous avons bien veillé à ce que le critère de stabilité numérique soit respecté, nous avons tendance à conclure que les instabilités repérées dans les simulations sont plutôt des instabilités physiques relatives aux paramètres du condensat ZnO.

3.3.3 État de l’art des instabilités

En effet, l’instabilité physique dans les condensats a été le sujet de quelques travaux récents [64, 65]. La figure (3.13) montre les résultats d’une étude 1D dans le cadre du modèle Gross-Pitaevskii [64], en régime stationnaire et sous une excitation homogène dans l’espace. Ces résultats montrent que, selon essentiellement les paramètres de pompage et des durées de vies dans le condensat (désignée ici γ au lieu de γ_c) et dans le réservoir, deux régions

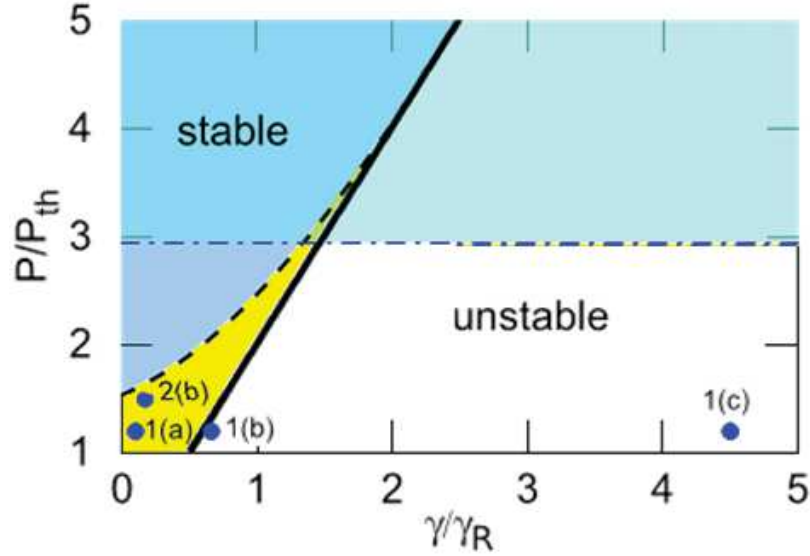


FIGURE 3.13 – Limites de stabilité du régime stationnaire d’un condensat 1D soumis à une excitation homogène spatialement, selon les paramètres de puissance de pompage et des durées de vies dans le condensat et dans le réservoir[64].

de stabilité et d’instabilité peuvent être distinguées. A deux dimensions, la figure (3.14) montre les résultats d’une étude extrêmement récente, toujours dans le cadre du modèle Gross-Pitaevskii. Dans ce cadre, une comparaison entre des calculs théoriques et des résultats expérimentaux, intégrés dans le temps, a été effectuée : le pompage dans cette situation a été considéré impulsif de profil spatial Gaussien. À travers cette comparaison, une instabilité relative à la taille du spot de pompage a été confirmée : semblablement à ce que nous observons dans nos expériences numériques avec les paramètres des polaritons ZnO (figures (3.11) et (3.12)), les instabilités se prononcent en augmentant la taille du spot. À partir de ces deux études, nous pouvons conclure que l’exploration de la condensation des polaritons ZnO exige un effort supplémentaire : les régions de stabilité et d’instabilité selon les différents paramètres, pour chaque taille du spot, doivent être d’abord définies.

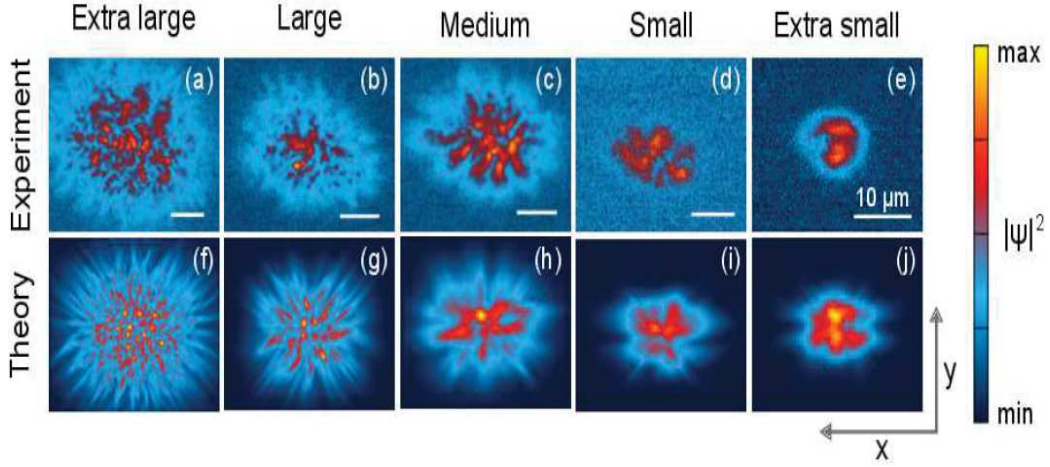


FIGURE 3.14 – Densité du champ des polaritons : comparaison entre des calculs théoriques G.P (de (f) à (j)) et des résultats expérimentaux (de (a) à (e)), intégrés dans le temps [65] : la diminution progressive de la taille du spot Gaussien prononce les instabilités dans le condensat.

3.4 Seuil de condensation sous excitation impulsionnelle

Le pompage non-résonant du réservoir par une impulsion ultra-courte (plus courte que la durée de vie du réservoir) est aussi très utilisée dans les expériences. Elle peut être facilement traitée dans le cadre de notre modèle dynamique. Nous considérons de nouveau le même condensat CdTe, soumis à une excitation impulsionnelle de $t_p = 1.5 \text{ ps}$, toujours de profil spatial Gaussien

$$P = P_0 \times \exp \left\{ - (x^2 + y^2) / 2\sigma_p^2 \right\} \times \exp \left\{ -2\ln 2 (t - 2t_p)^2 / t_p^2 \right\}$$

Nous présentons sur la figure (3.15) l'évolution de la population N_c (normalisée) du condensat suite au pompage, pour deux puissances après le seuil. Nous remarquons d'abord que le condensat apparaît après un léger retard par rapport à l'impulsion appliquée. Ce retard baisse en augmentant la puissance de pompage. Nous observons un pic de population qui décline rapidement et disparaît définitivement. Nous avons examiné, comme précédemment, l'évolution de (N_c) avec la population initialement créée par le pompage (N_P)

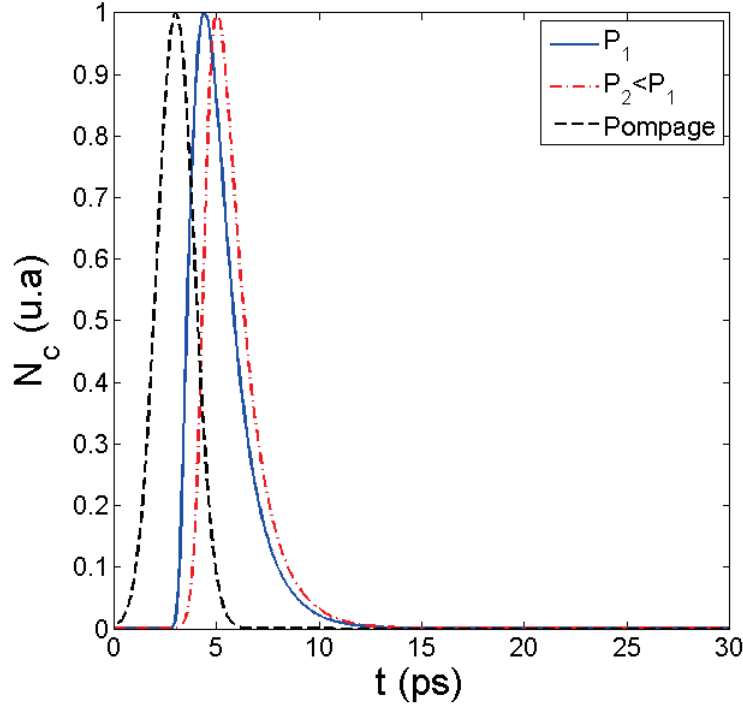


FIGURE 3.15 – Évolution, en fonction du temps, de la population N_c (normalisée) des polaritons dans le condensat suite à une impulsion de pompage de $t_p = 1.5$ ps. Les puissances de pompage correspondantes sont choisies après le seuil tel que $P^{th} < P_2 < P_1$. La courbe en tirets noirs correspond à l'impulsion d'excitation.

où chaque particule est supposée toujours de durée de vie $1/\gamma_R$. Différemment du cas de l'excitation continue nous avons ici : $N_P = \alpha N_R^{(t=0)}$ où $\alpha > 1$, $\alpha = \frac{1}{\gamma t_p} \sqrt{\frac{2 \ln 2}{\pi}}$, $1/\gamma$ étant l'unité de temps, voir section (2.2). Nos résultats sont présentés sur la courbe (3.16) où chaque valeur de N_c a été déterminée avec une intégration sur tout l'intervalle temporel de calcul. Dans ce cas, nous n'avons aucun moyen clair pour saisir le seuil, cependant, nous pouvons remarquer d'après la courbe que nous franchissons le seuil de condensation avec une population initiale 100 fois plus grande. Cette augmentation du seuil est due aux pertes dans le condensat non compensées par le réservoir : nous remarquons sur la figure (3.17) un régime de gain rapide responsable de la création du condensat, puis le système finit en déficit de particules à

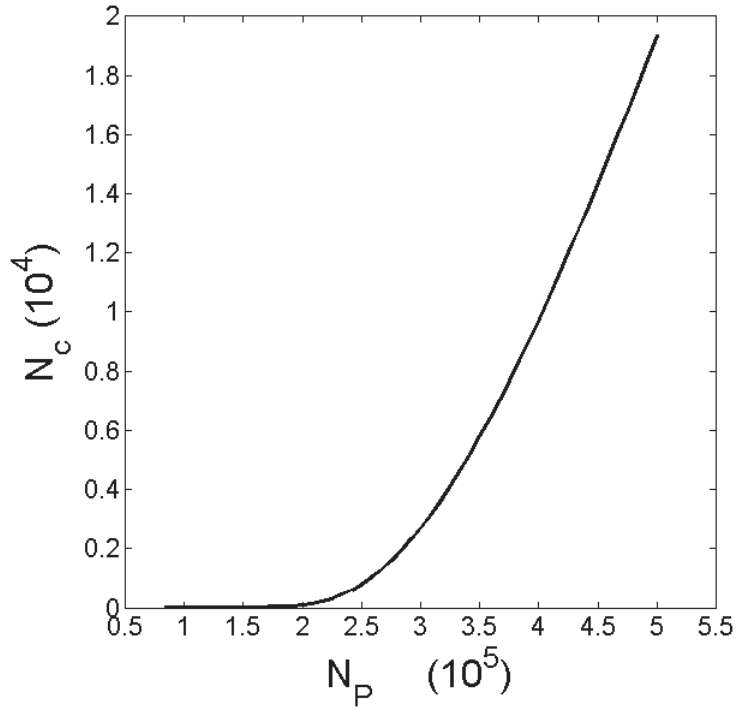


FIGURE 3.16 – Moyenne temporelle de la population dans le condensat en fonction de la population initialement créée suite à impulsion laser de 1.5 ps.

cause de l'extinction du réservoir.

Conclusion

Nous avons proposé dans ce chapitre une nouvelle approche pour l'étude du seuil de condensation. Sous excitation continue, nous avons déterminé le seuil à travers la discontinuité de la dérivée première de la self énergie qui signifie une transition de phase du premier ordre. Puis nous l'avons caractérisé par la poursuite du temps d'établissement du régime permanent en fonction de la puissance de pompage, où nous avons souligné le comportement asymptotique de ce dernier autour de $P = P^{th}$. Sous excitation impulsionnelle, nous avons souligné l'augmentation du seuil de condensation à cause d'un régime de gain, efficace, mais qui décline rapidement à cause de la courte durée de l'impulsion. Finalement, nous avons montré comment se comporte, sous excitation continue, le seuil de condensation des polaritons CdTe en fonc-

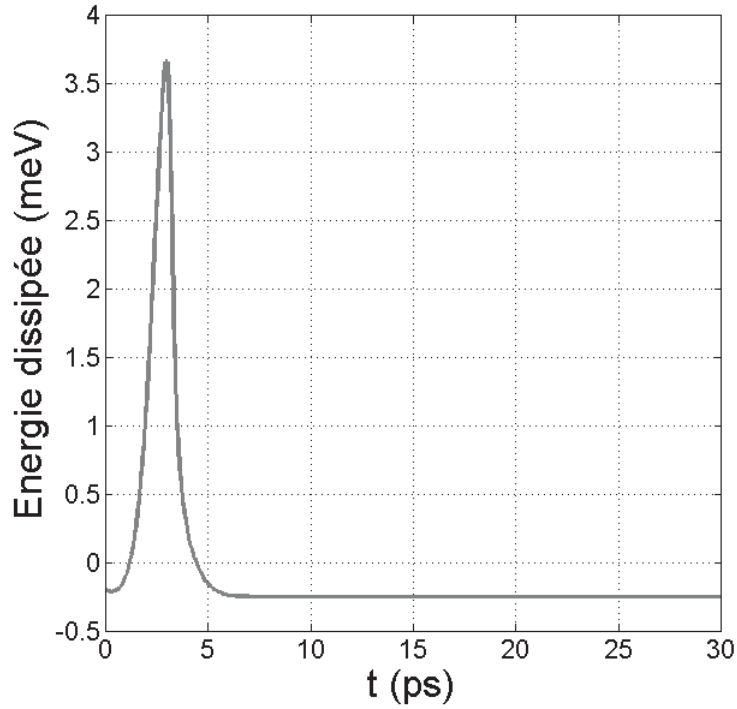


FIGURE 3.17 – Pic de gain sous excitation impulsionnelle pour la puissance $P^1 > P^{th}$.

tion de la taille du spot de pompage. Dans ce contexte, nous avons souligné une baisse du seuil pour une augmentation de la taille signée par une baisse de l'énergie cinétique du condensat de plus en plus décorrélée des répulsions avec le réservoir des particules non condensées. Pour les polaritons ZnO, nous avons relevé dans nos simulations numériques, des instabilités hors le critère d'instabilité numérique. Selon d'autres études théoriques dans le cadre du modèle Gross-Pitaevskii, ces instabilités sont des instabilités physiques dans les condensats reliées aux différents paramètre du système.

Chapitre 4

Modélisation dynamique d'un condensat d'une microcavité ZnO

Sommaire

4.1	Mise en évidence de la condensation dans une microcavité ZnO	77
4.1.1	Microcavité ZnO et modes polaritoniques	77
4.1.2	Spécificités du pompage optique	78
4.1.3	Choix de l'expérience modélisée	78
4.2	Modélisation Gross-Pitaevskii	82
4.2.1	Paramètres	82
4.2.2	Étude des différents régimes de condensation	83
4.2.3	Étude des différents mécanismes de formation du condensat	87
4.2.4	Étude de la dynamique temporelle du condensat	88
4.2.5	Comparaison avec l'expérience : spectre intégré dans le temps	90
4.2.6	Dynamique spatiale sous le spot	91
4.2.7	Investigation des instabilités spatiales et temporelles	94

Dans ce chapitre, nous faisons une étude dynamique complète d'un condensat de polaritons d'une microcavité ZnO sous excitation, non résonante, foca-

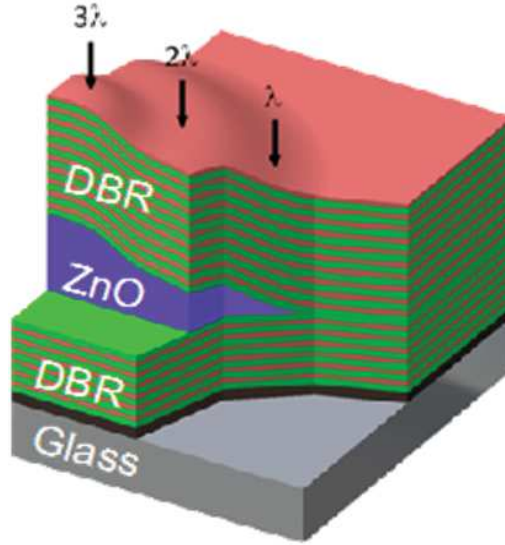


FIGURE 4.1 – Microcavité ZnO. Les miroirs de Bragg sont formés d'une période HfO_2/SiO_2 : 6.5 périodes en bas et 10 périodes en haut. L'épaisseur de la cavité varie de $\lambda/2$ à 5λ ($\lambda = 380 \text{ nm}$) [66].

lisée. Nous étudions les différents régimes de condensation et nous calculons, avec l'approche présentée dans le chapitre précédent, la valeur du seuil. A travers l'analyse de la dynamique temporelle du condensat, nous soulignons l'importance du régime transitoire dans la formation du condensat. Et, à travers l'analyse de la dynamique spatiale, nous expliquons le comportement du condensat sous le spot d'excitation. Finalement, nous essayons de comprendre l'origine des anisotropies de propagation apparaissant dans les expériences en augmentant la puissance de pompage.

4.1 Mise en évidence de la condensation dans une microcavité ZnO

4.1.1 Microcavité ZnO et modes polaritoniques

Nous présentons ici les résultats d'une étude expérimentale antérieure, menée au L2C, dans le cadre de la thèse de R.Hahe [67], de la condensa-

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

tion des polaritons dans une microcavité ZnO. Cette étude a mis en évidence le rôle majeur joué par la dynamique spatiale et la propagation des polaritons dans la formation du condensat. Elle a ainsi motivé l'étude théorique présentée dans ce chapitre. La microcavité étudiée est représentée dans la figure (4.1) : l'épaisseur de la cavité varie de $\lambda/2$ à 5λ ($\lambda = 380 \text{ nm}$). En effet, le gradient d'épaisseur affecte le detuning δ et permet de jouer sur les fractions en exciton et en photon d'un mode polaritonique donné comme expliqué dans le premier chapitre [10]. La couche active est en ZnO massif, i.e, l'exciton de la cavité est (3D). Dans cet échantillon, sous excitation non résonante, une condensation à des températures qui atteignent 300 K a été observée [66].

4.1.2 Spécificités du pompage optique

Comme nous l'avons expliqué au premier chapitre, le choix du pompage optique affecte directement la dynamique spatiale et temporelle du condensat. Ici, la microcavité ZnO a été excitée avec

- spatialement, un spot Gaussien focalisé, comme dans la grande majorité des expériences menées sur les polaritons GaAs, CdTe, et plus récemment ZnO et GaN.
- temporellement, avec des impulsions de "longue durée" (400 ps) à un faible taux de répétition (quelques kHz). Ce type d'excitation est souvent qualifié de "quasi-continue", car la durée des impulsions est longue devant le temps de vie des polaritons et du réservoir. Cette durée est cependant comparable, notamment loin du seuil, à la dynamique de condensation comme démontré ici. Une vraie excitation continue est utilisée dans les microcavités GaAs et CdTe. Cependant, dans ZnO et GaN, les expériences sont presque toujours menées sous ce type de laser "quasi-continu" [9, 10, 58, 59, 60, 61, 63, 62].

4.1.3 Choix de l'expérience modélisée

Nous choisissons ici de modéliser l'expérience présentée dans les figures (4.2), (4.3) et (4.4). D'abord, nous remarquons à travers le spectre de photoluminescence représenté dans la figure (4.2) la présence de plusieurs branches

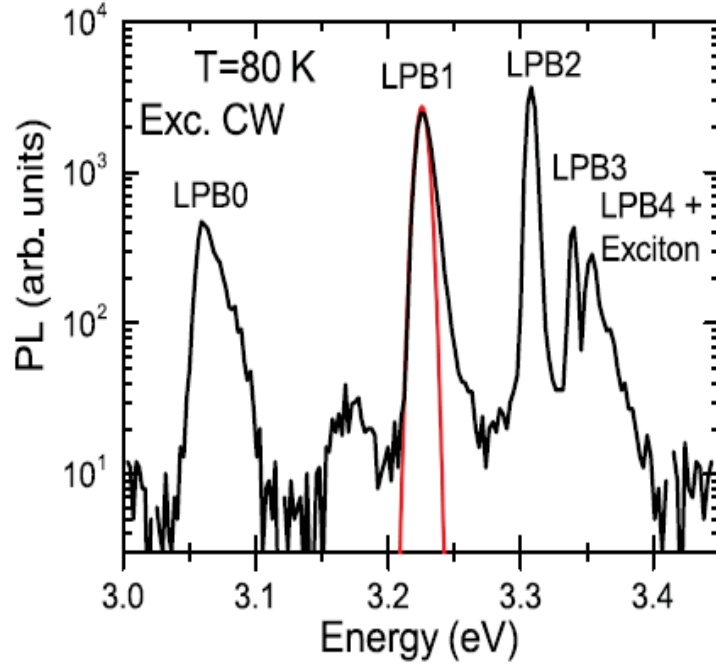


FIGURE 4.2 – Modes polaritoniques présents dans la microcavité, le spectre est enregistré à 80K [58].

polaritoniques basses en plus de la raie excitonique (le spectre a été enregistré à 80 K). Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser à la condensation de la branche LPB_1 d'énergie $E_{LPB_1} = 3.187 \text{ eV}$, à 300 K.

La figure (4.3) montre le spectre de photoluminescence mesuré à 300 K [58]. Le spectre a été enregistré pour trois puissances de pompage, une avant le seuil de condensation, et deux après. Pour $P \simeq P^{th}$ le blueshift de l'énergie de la branche LPB_1 , signature de la répulsion réservoir-condensat, mesure 4 meV . En augmentant la puissance à $P = 1.8 P^{th}$ la valeur a augmenté à 12 meV . D'autre part, nous notons que les polaritons de la branche LPB_0 sont les polaritons très photoniques de plus basse énergie, qui ne condensent pas.

La figure (4.4) montre les images 2D en espace réel du laser d'excitation, de la branche LPB_0 non condensée et du condensat dans la branche LPB_1 [58]. Au niveau du spot d'excitation, nous remarquons la présence d'une anisotropie due en fait aux conditions expérimentales. Le nuage de polaritons non condensés (LPB_0 , graphe (b) de la figure (4.4)) est de profil étendu (de largeur à mi-hauteur de l'ordre de $5 \mu\text{m}$ suivant y) en raison de la propagation

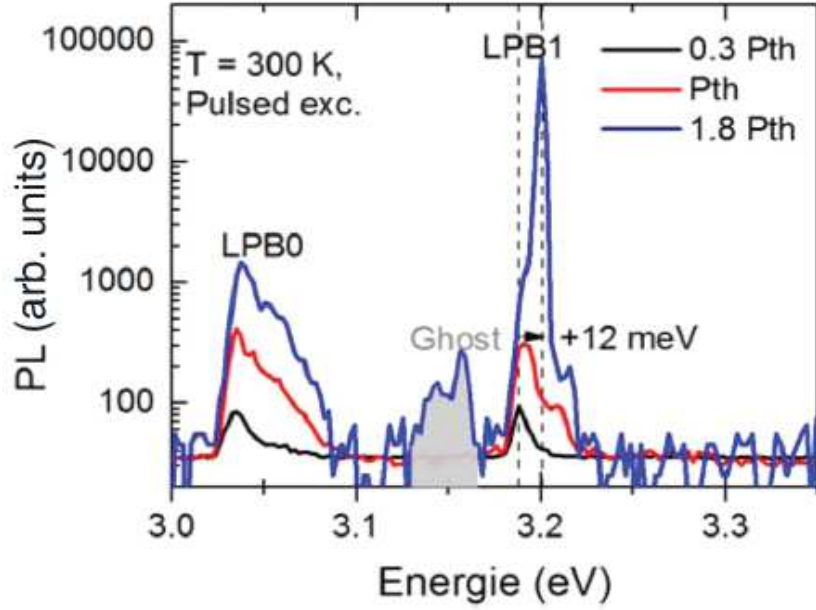


FIGURE 4.3 – Spectre de photoluminescence relatif à la condensation de la branche LPB_1 mesuré à 300 K. Les mesures correspondent à trois puissances de pompage : $P = 0.3 P^{th}$, $P \simeq P^{th}$ et $P = 1.8 P^{th}$. Le blueshift mesuré pour les puissances après le seuil de condensation vaut 4 meV et 12 meV respectivement [58].

ballistique des polaritons qui le composent, et il est décalé d'environ $3 \mu m$ en raison du gradient d'épaisseur de la microcavité ; le comportement de la branche LPB_0 ne sera pas discuté dans la présente étude.

Au niveau du condensat, les effets d'anisotropie de propagation sont observés en augmentant la puissance de pompage (voir la coupe suivant y, graphe (c) dans la figure (4.4)) : ils sont absents pour $P \simeq P^{th}$ (courbe en pointillés) et présents pour $P = 1.7 P^{th}$ (courbe continue). Ces effets sont, soit des effets intrinsèques dus à une augmentation de la non linéarité, soit la conséquence de l'anisotropie du spot d'excitation qui affecte à son tour le profil du réservoir. Étant formé sous excitation focalisée, une propagation sur une distance qui atteint les $10 - 20 \mu m$ loin du centre d'excitation a été observée dans le condensat obtenu. Nous notons dans ce contexte que, des distances de propagations plus importantes, allant jusqu'aux $200 \mu m$ ont été observées dans une étude sur une microcavité GaAs, qui présente un facteur

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

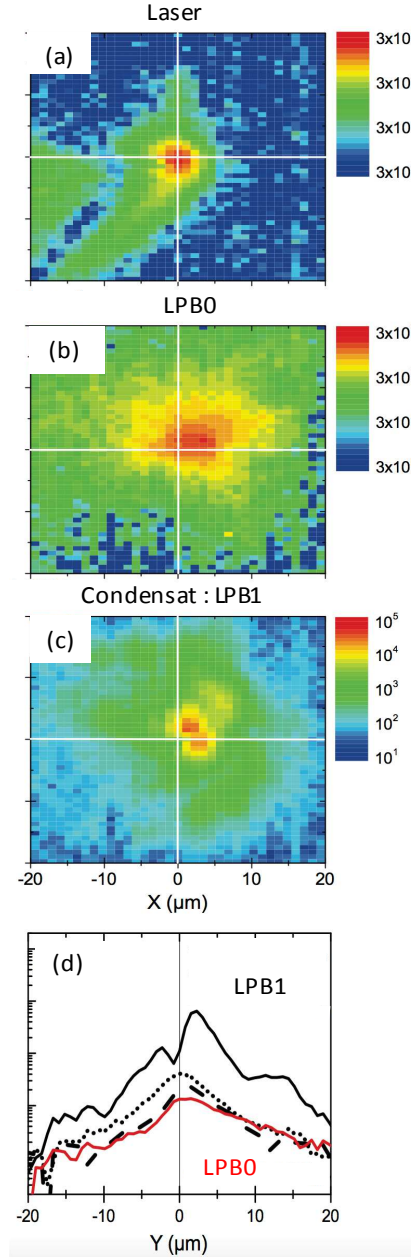


FIGURE 4.4 – (a-c) Images 2D en espace réel du laser d'excitation, de la branche LPB1 non condensée et du condensat LPB1, à $P = 1.7 P^{th}$, respectivement, à $T=300$ K. (d) Coupes suivant la direction y : les courbes noires correspondent au condensat à $P = 0.3 P^{th}$ (tirets), $P = P^{th}$ (pointillés) et $P = 1.7 P^{th}$ (trait continu). La courbe rouge correspond à la branche LPB0 à $P = 1.7 P^{th}$ [58].

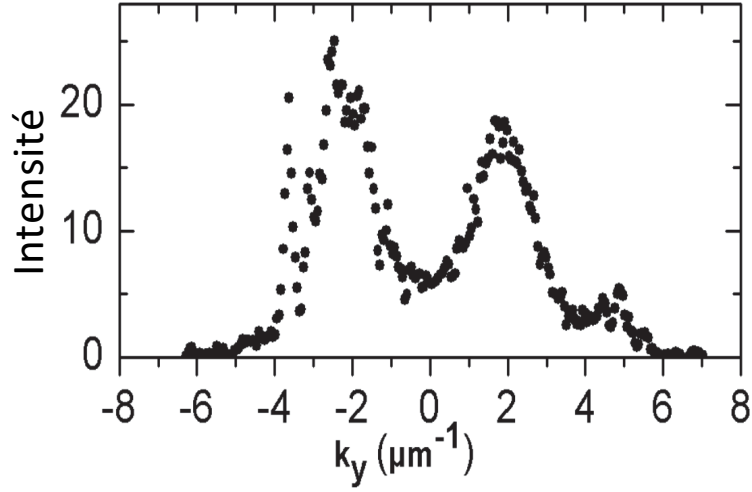


FIGURE 4.5 – Profil d'émission du condensat dans l'espace réciproque suivant k_y pour $P = 1.7 P^{th}$, à $T=300$ K [58].

de qualité record augmentant la durée de vie des polaritons, et donc leur distance de propagation [68].

Dans l'espace réciproque, comme le montre la coupe suivant k_y représentée dans la figure (4.5), l'émission est caractérisée par un minimum autour du centre et deux maxima aux vecteurs d'ondes $k_y = \pm 2 \mu m$, pour $P = 1.7 P^{th}$. Ce profil est en fait la signature du caractère balistique de propagation comme on l'a expliqué dans le chapitre 1, section (1.4).

4.2 Modélisation Gross-Pitaevskii

4.2.1 Paramètres

Dans ce qui suit, nous présentons les résultats d'une étude dynamique du condensat décrit dans la section précédente dans le cadre du modèle Gross-Pitaevskii. Dans nos simulations, nous considérons un spot de pompage continu dans le temps de profil spatial Gaussien de largeur $\sigma_p = 2.04 \mu m$. Ainsi que dans le chapitre 3, nous continuons à considérer qu'à $t=0$, la fonction d'onde du condensat $\Psi(x, y, 0)$ et la densité du réservoir $n_R(x, y, 0)$ sont des Gaussiennes de même largeur que la Gaussienne du spot de pompage, et qu'il n'y a pas de potentiel extérieur $V_{ext} = 0$.

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

Les paramètres de simulation sont soit

- mesurés expérimentalement : la durée de vie dans le réservoir γ_R , la durée de vie dans le condensat γ_c et la masse effective du polariton m_{LPB1}^* .
- déduits des relations analytiques : la constante g quantifiant les interactions dans le condensat, la constante g_R quantifiant les interactions avec le réservoir et la constante R caractérisant la relaxation depuis le réservoir vers le condensat. Ces derniers paramètres peuvent être déterminés selon l'approche proposée dans [58]. D'abord, la constante g_R peut être déterminée à travers la valeur du blueshift "mesurée au seuil" et la densité dans le réservoir correspondante selon la relation $g_R n_R^{th} = E_c - E_{LPB}$. La constante g est donnée par la relation $g = x^2 \times g_{XX}$, où x correspond à la variation de l'énergie de la branche polaritonique par rapport à la variation de l'énergie de l'exciton $x = \partial E_{LPB} / \partial E_X$ et g_{XX} la constante d'interactions excitons-excitons donnée par la valeur $g_{XX} = 1.0 \times 10^{-5} \text{ meV} \mu\text{m}^{-2}$. Finalement, la constante R peut être calculée à travers l'approximation suivante au seuil $R n_R^{th} = \gamma_c$. Dans cette approche, la valeur de n_R^{th} est donnée en (2D) plutôt par la valeur théorique, déduite d'un modèle cinétique de condensation, $n_R^{th} = 5 \times 10^4 \mu\text{m}^{-2}$ pour ZnO [10].

Le choix des paramètres est encore assez ouvert pour les excitons et les polaritons ZnO : ces derniers doivent être considérés comme ayant une incertitude d'un facteur de 2 à 5. Cependant, ce choix est compatible avec toutes les mesures effectuées sur la microcavité ZnO étudiée, comme discuté dans [58].

4.2.2 Étude des différents régimes de condensation

Population du condensat-population du réservoir

Dans ce paragraphe, nous allons examiner l'effet de la puissance de pompage sur les populations dans le réservoir et dans le condensat. En effet, dans le cas simple où le condensat est excité avec un spot 2D homogène, nous avons, jusqu'au seuil, une augmentation linéaire du gain en fonction de la puissance de pompage : $P = \gamma_R n_R$, en régime stationnaire. Puis, de façon

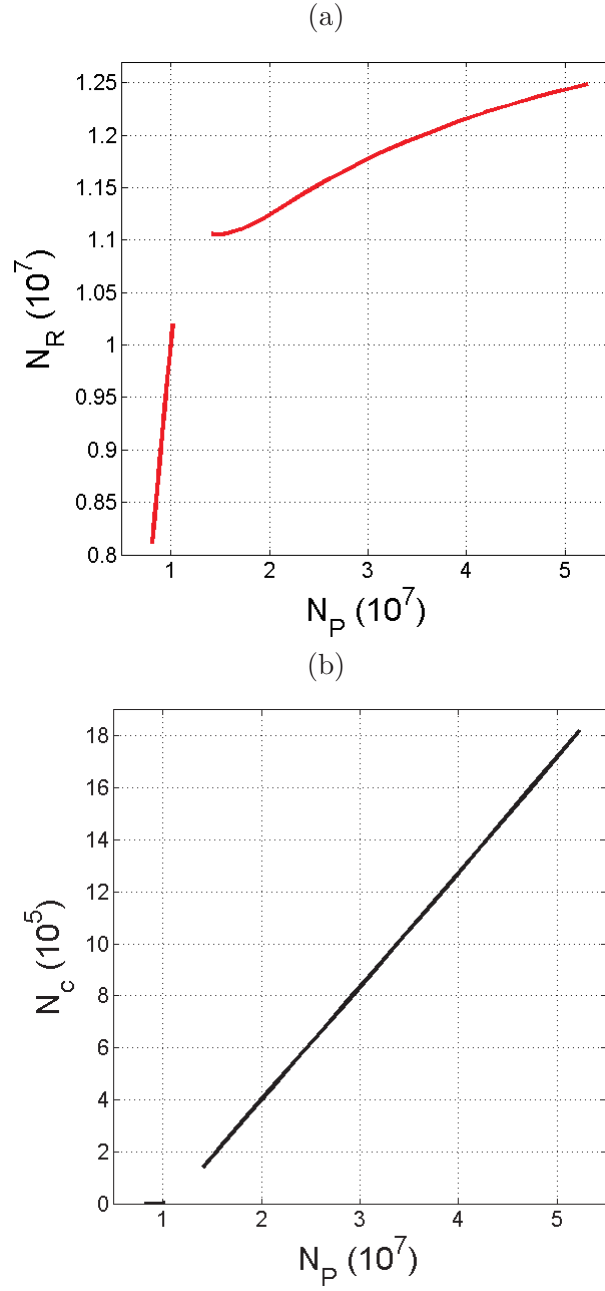


FIGURE 4.6 – Évolution, en régime permanent, de la population N_R (a) et N_c (b), du réservoir et du condensat respectivement, en fonction de la population initialement créée suite au pompage. Paramètres : $m_{LPB1}^* = 7.1 \times 10^{-5} m_0$, $g_R = 5 \times 10^{-6} \text{ meV } \mu\text{m}^2$, $g = 2.209 \times 10^{-6} \text{ meV } \mu\text{m}^2$, $\mathcal{G} = 0$, $\hbar R = 3.3 \times 10^{-6} \text{ meV } \mu\text{m}^2$, $\hbar\gamma_R = 0.016 \text{ meV}$, $\hbar\gamma_c = 0.35 \text{ meV}$, $N_c^{(t=0)} = 1$, et $N_R^{(t=0)} = N_P^{(t=0)} = 2.0918 \times 10^7$.

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

analogue aux lasers conventionnels, un clamping du gain à partir du seuil : $n_R = n_R^{th} = \gamma_c/R$. Dans ce cas, avant le seuil, la densité $|\Psi|^2$ du condensat est nulle, mais après le seuil, elle évolue linéairement avec la puissance de pompage

$$|\Psi|^2 = \frac{P - P^{th}}{\gamma_c}.$$

Pour le condensat ZnO que nous étudions, afin de suivre le comportement du condensat et du réservoir en augmentant la puissance de pompage, nous traçons sur la figure (4.6), l'évolution, en régime permanent, de la population ($N_c = \iint |\Psi(x, y, tss)|^2 dx dy$) et ($N_R = \iint n_R(x, y, tss) dx dy$), du condensat et du réservoir respectivement, en fonction de la population initialement créée suite au pompage ($\gamma_R N_P = \iint P(x, y) dx dy$). Nous remarquons que,

- dans le réservoir, avant le seuil, la population N_R évolue linéairement avec le pompage, après le seuil, cette population tend à saturer : le clamping du gain n'est pas immédiat dans ce cas.
- dans le condensat, avant le seuil, la population est nulle, après le seuil cette dernière tend à évoluer linéairement avec le pompage. En effet, après le seuil, et en tenant compte des relations (4.1) et (4.2) valables en régime stationnaire

$$P(x, y) = \gamma_R n_R(x, y) + R n_R(x, y) |\Psi(x, y)|^2, \quad (4.1)$$

$$\langle R n_R \rangle = \langle \gamma_c \rangle, \quad (4.2)$$

Nous pouvons déduire la relation suivante entre les différentes populations

$$\gamma_R N_P = \gamma_R N_R + \gamma_c N_c.$$

Calcul du seuil

En suivant la même approche présentée dans le troisième chapitre, nous avons cherché le seuil de condensation correspondant aux paramètres de l'expérience présentée dans la section (4.1). Le seuil en densité de particules initialement créées par le pompage (dans nos calculs, cette densité correspond également à celle initialement présente dans le réservoir), déterminé

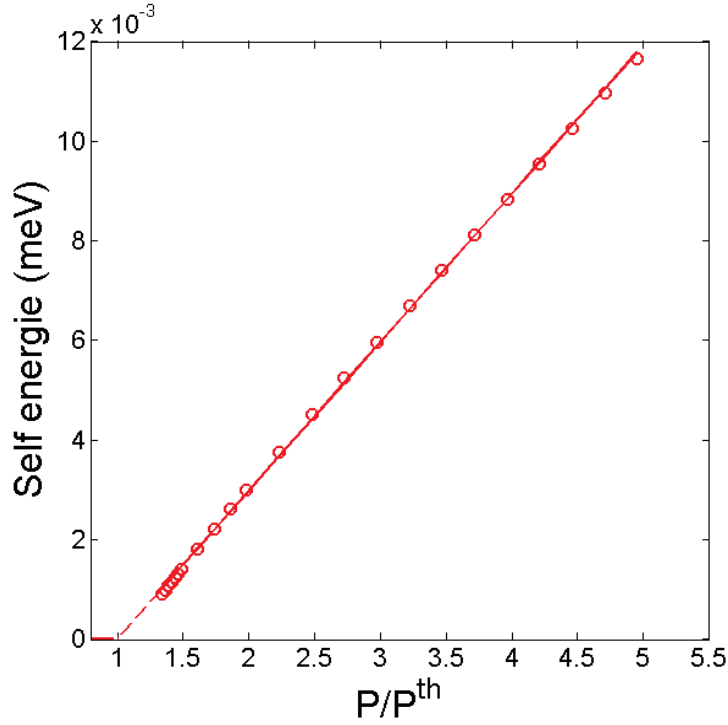


FIGURE 4.7 – Évolution de la self énergie par particules dans le condensat, en régime permanent, en fonction de la puissance de pompage normalisée par rapport au seuil. Les cercles indiquent les points calculés, et la courbe continue est obtenue par un fit linéaire.

à travers l'extrapolation de la self énergie (figure (4.7)), est de l'ordre de $4.03 \times 10^5 \mu m^{-2}$, qui correspond à environ 1/2 de la valeur expérimentale. Nous pouvons noter que les valeurs de self-énergie sont très faibles (quelques μeV), ce qui est lié à la faible valeur de g et au faible rayon de Bohr des excitons ZnO.

Temps d'établissement du régime permanent

De façon analogue à l'étude menée pour CdTe présentée dans le chapitre précédent (voir figure (3.6)), nous examinons dans le figure (4.8), l'évolution du temps d'établissement du régime permanent en fonction de la puissance de pompage pour la microcavité ZnO étudiée. Nous remarquons que, dans ce cas, la plage de puissances pour laquelle le temps t_{ss} diverge est plus large. Cette dernière s'étend de $0.96 P^{th}$ à $1.33 P^{th}$. D'autre part, nous remarquons

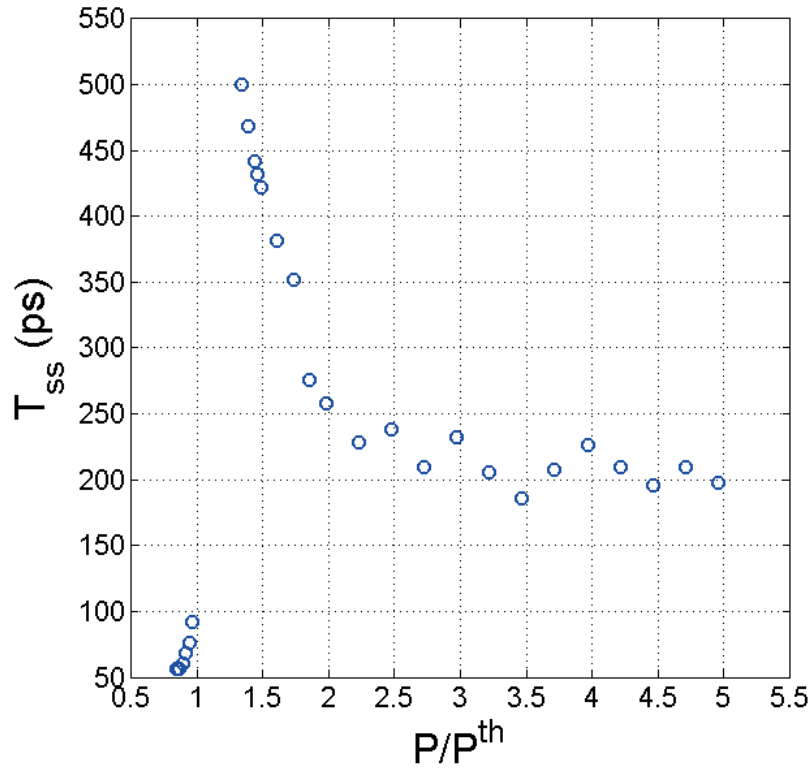


FIGURE 4.8 – Temps d'établissement du régime permanent en fonction de la puissance de pompage normalisée par rapport au seuil.

que le profil autour du seuil est plus asymétrique et que l'établissement du régime permanent tend à se stabiliser loin du seuil à une valeur moyenne plus élevée que dans CdTe, de l'ordre de 200 ps.

4.2.3 Étude des différents mécanismes de formation du condensat

Afin de comprendre les différents mécanismes de formation du condensat sous spot focalisé dans la microcavité ZnO, nous présentons dans la figure (4.9) l'évolution des différentes énergies par particules dans le condensat en fonction de la puissance de pompage, en régime permanent. En effet,

- dans l'étude menée pour la microcavité CdTe dans le troisième chapitre (voir figure (3.5)), la répulsion du condensat est renforcée en augmentant le pompage, et renforce en conséquence, progressivement,

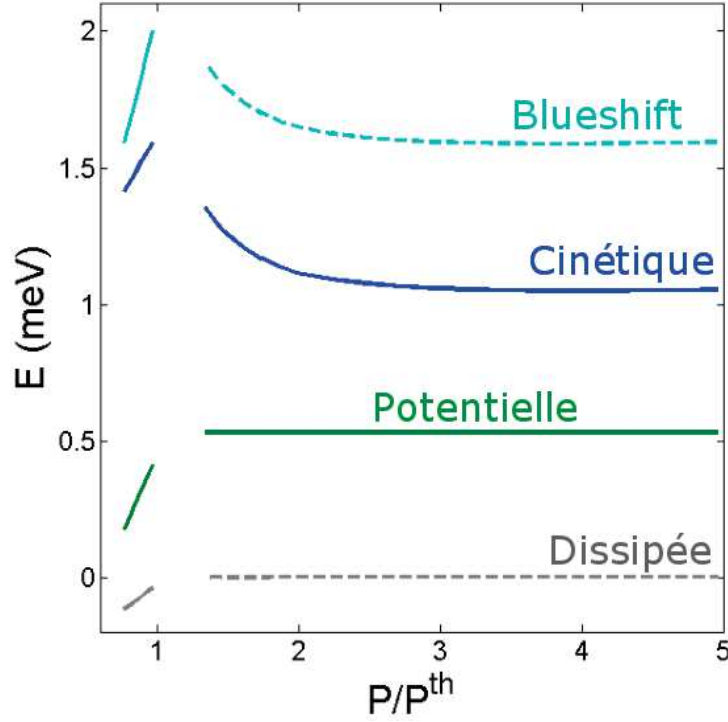


FIGURE 4.9 – Évolution des différentes contributions à l'énergie par particule dans le condensat en fonction de la puissance de pompage, une fois le régime permanent établi.

la propagation du condensat.

- dans le cas de la microcavité ZnO, le paramètre g_R d'interaction avec le réservoir est très faible. Par conséquent, l'énergie potentielle, principal moteur de la propagation du condensat, reste insensible à l'augmentation de la puissance laser, ce qui entraîne la baisse de l'énergie cinétique, et du blueshift.

4.2.4 Étude de la dynamique temporelle du condensat

Nous avons expliqué au début de ce chapitre, qu'une excitation de 400 ps est considérée comme excitation quasi-continue. Cependant, à travers le calcul de t_{ss} que nous avons présenté (voir figure (4.8)), nous avons souligné la "lenteur" du temps d'établissement du régime permanent dans la microcavité ZnO. Par conséquent, pour une expérience qui dure seulement 400 ps,

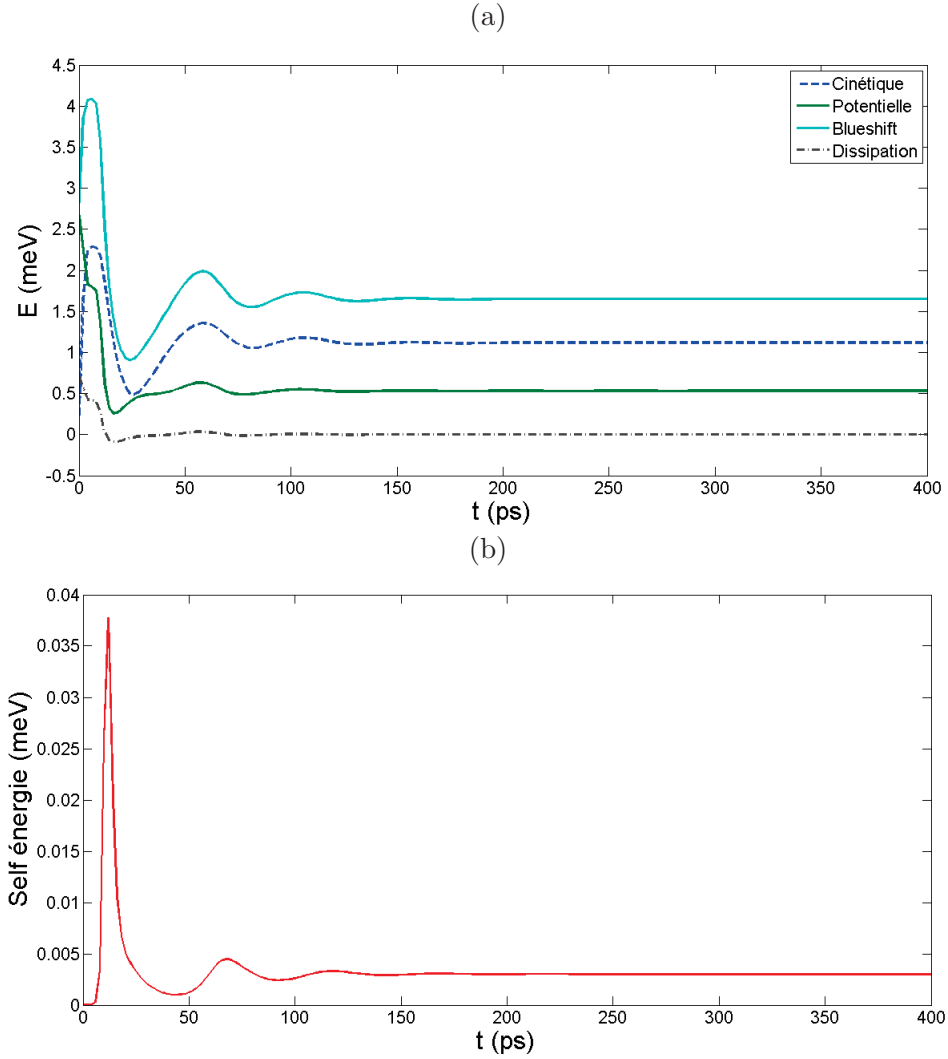


FIGURE 4.10 – Évolution temporelle, jusqu'au régime permanent, du blueshift, et des différentes énergies par particules dans le condensat, à $P = 1.98 P^{th}$ selon la valeur calculée du seuil.

le régime transitoire est aussi important que le régime permanent. Dans la figure (4.10), nous examinons l'évolution temporelle, jusqu'au régime permanent, du blueshift, et des différentes énergies par particules dans le condensat, à $P = 1.98 P^{th}$ selon la valeur calculée du seuil. Nous remarquons que le régime transitoire, qui s'étend sur les 150 premières pico-secondes environ, est marqué par des oscillations amorties. De telle oscillations n'existent

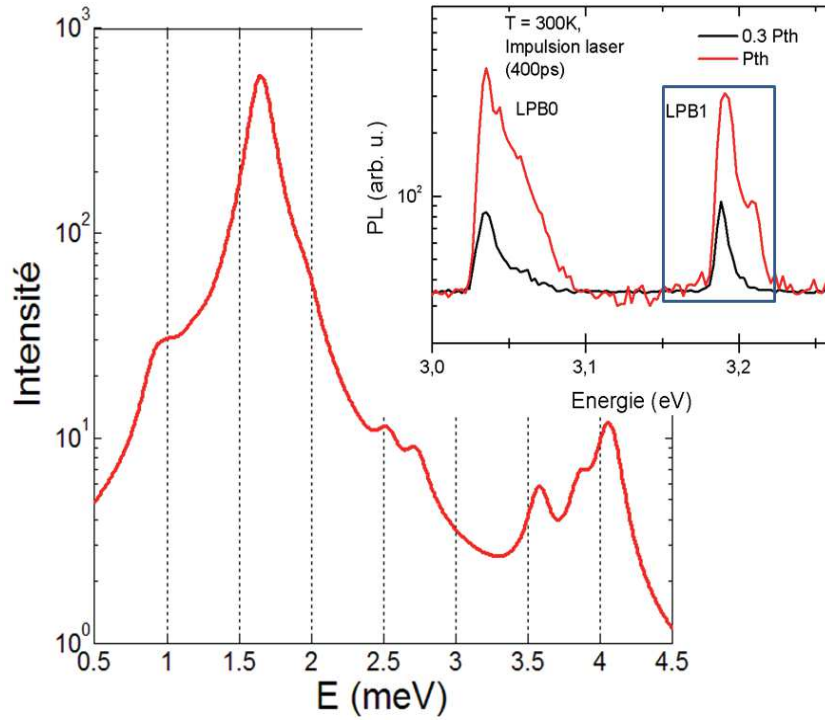


FIGURE 4.11 – Spectre simulé de l'énergie du blueshift. Le zoom est extrait de la figure (4.3) correspondante au spectre expérimental.

pas dans CdTe (voir figure 3.4). En effet, le modèle Gross-Pitaevskii est un modèle robuste pour caractériser le régime permanent. La dynamique précise d'établissement de ce régime, et les oscillations qui y mènent dépendent des paramètres de gain (R) et de saturation dans ce modèle, et, des paramètres additionnels d'amortissement pourraient être pertinents et introduits de manière ad hoc. La nature des oscillations ici mises en évidence devra être étudiée de manière plus approfondie, et éventuellement étudiée expérimentalement par des études résolues en temps.

4.2.5 Comparaison avec l'expérience : spectre intégré dans le temps

Afin de nous comparer aux mesures expérimentales, nous avons calculé le spectre d'énergie (blueshift) intégré dans le temps, les résultats sont représentés dans la figure (4.11). Ce spectre a été obtenu par la sommation de toutes

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

les Lorentziennes de largeur $\hbar\gamma_c = 0.35 \text{ meV}$, centrées sur les valeurs de $E_{\text{Blueshift}}(t)$ de la figure (4.10a). En effet, le spectre expérimental représenté dans la figure (4.3) a été enregistré avec une caméra CCD, qui intègre tout le signal émis par le condensat au cours du temps, sans résolution temporelle. Ainsi, le spectre intégré dans le temps que nous obtenons par le calcul, est ce qui se rapproche le plus de la mesure expérimentale. En effet, le spectre expérimental montre, à $P \simeq P^{th}$ (valeur mesurée), un pic principal (de 4meV) et un pic secondaire, de blueshift. Le même comportement est repéré dans le spectre simulé, cependant, comme discuté au paragraphe (4.2.4), en tenant compte de plus d'amortissement dans le système, la position des pics pourrait être modifiées.

4.2.6 Dynamique spatiale sous le spot

Pour avoir une plus ample connaissance des mécanismes de formation du condensat, il est important d'analyser la dynamique locale sous le spot. En effet, en partant de la première équation de Gross-Pitaevskii généralisée, nous pouvons écrire l'équation de continué suivante pour les différentes populations sous la surface du spot (S_P)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \iint_{S_P} |\Psi(t)|^2 dxdy &= \iint_{S_P} Rn_R(t) |\Psi(t)|^2 dxdy - \iint_{S_P} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t) dxdy \\ &\quad - \gamma_c \iint_{S_P} |\Psi(t)|^2 dxdy, \end{aligned} \quad (4.3)$$

où $\vec{j}$ le courant de probabilité quantique donnée par l'expression

$$\vec{j} = \frac{-i\hbar}{2m^*} [\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*]$$

Le théorème de divergence permet d'écrire le terme faisant intervenir $\vec{j}$ comme une intégrale de flux à travers le contour du spot C_P , et donc de mettre l'équation (4.3) sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \iint_{S_P} |\Psi(t)|^2 dxdy &= \iint_{S_P} Rn_R(t) |\Psi(t)|^2 dxdy - \oint_{C_P} \vec{j}(t) \cdot \vec{dl} \\ &\quad - \gamma_c \iint_{S_P} |\Psi(t)|^2 dxdy. \end{aligned} \quad (4.4)$$

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

L'équation (4.4) peut s'interpréter comme suit : tout gain en population du condensat dans la région du spot vient de la relaxation depuis le réservoir proportionnelle au taux de relaxation R . Et, toutes pertes locales en populations du condensat sont soit des pertes dues aux recombinaisons non radiatives au taux γ_c , soit des pertes par flux sortant à travers le contour du spot. Comme nous intégrons sur le contour du spot qui est par définition la seule source de production des polaritons, il n'existe aucun gain par flux entrant. En intégrant la deuxième équation de Gross-Pitaevskii sous la surface du spot, nous pouvons écrire

$$\iint_{S_P} R n_R(t) |\Psi(t)|^2 dx dy = \gamma_R N_P - \gamma_R N_R(t) - \frac{d}{dt} N_R(t). \quad (4.5)$$

Nous obtenons finalement en termes de population du condensat N_c , du réservoir N_R en plus de la population créée par le pompage N_P , sous le spot, la relation suivante

$$\frac{d}{dt} N_c(t) = \gamma_R N_P - \gamma_R N_R(t) - \frac{d}{dt} N_R(t) - \Phi(t) - \gamma_c N_c(t), \quad (4.6)$$

qui se réduit en régime permanent à la relation

$$\gamma_R N_P = \gamma_R N_R + \Phi + \gamma_c N_c, \quad (4.7)$$

où Φ le flux de polaritons à travers le contour du spot qu'on peut voir comme la population de polaritons mobiles du condensat avec un taux γ_c : $\Phi = \gamma_c N_c^{mob}$. Les résultats de l'étude de la dynamique de condensation sous le spot sont donnés dans la figure (4.12). Dans le temps, le régime transitoire est caractérisé par un pic intense de flux. En régime permanent, nous avons trouvé que, 41% de la population initialement créée par le pompage directement sous le spot est dans le réservoir. Pour le reste qui condense, environ 76% de la population fuit de la région du spot. Le flux de polaritons vers l'extérieur du condensat domine donc les pertes radiatives du condensat, et doit être compensé par un plus fort pompage du réservoir dans le cas d'une condensation 2D.

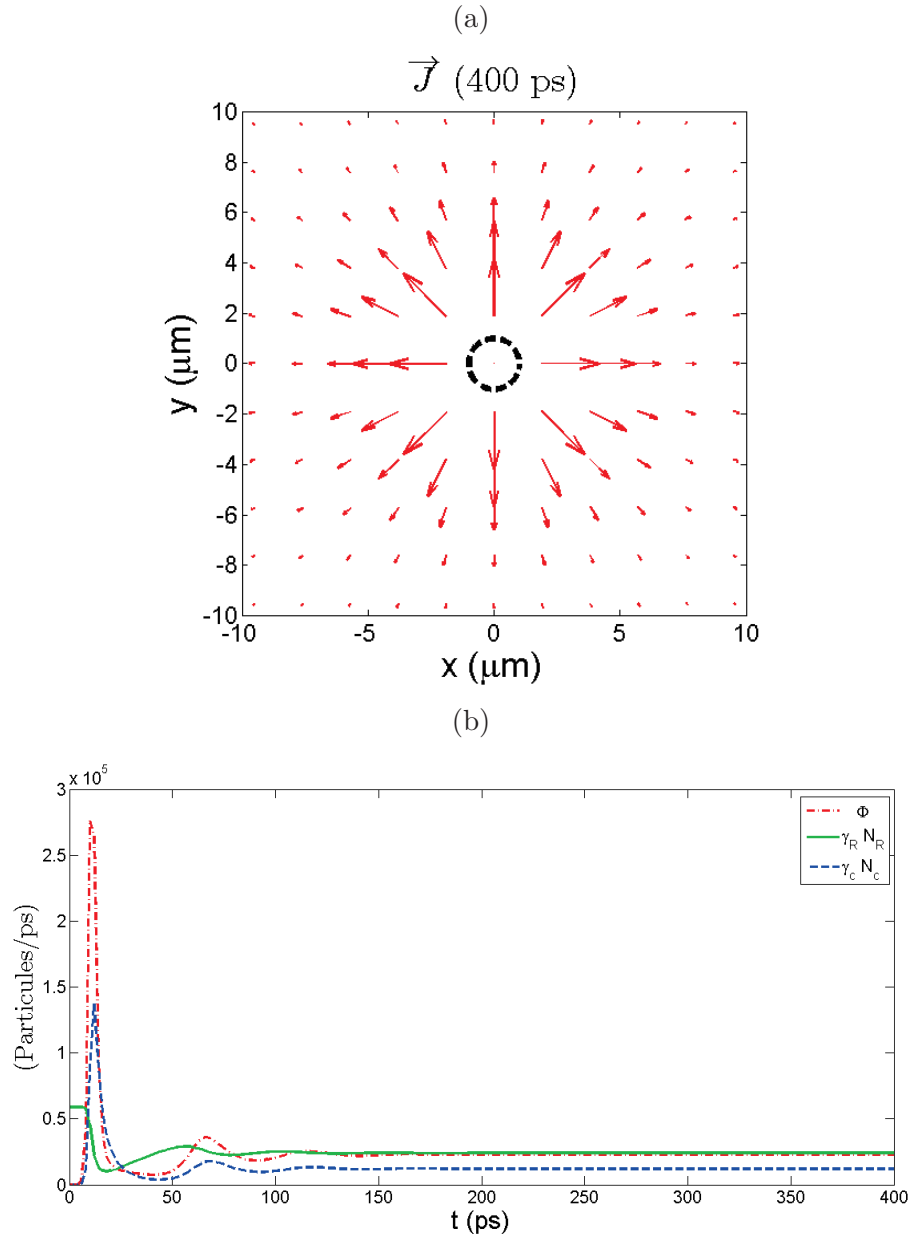


FIGURE 4.12 – (a) Champ de courant en régime permanent. (b) Évolution temporelle des taux de polaritons mobiles par le flux Φ et fixes sous le spot de durée de vie $1/\gamma_c$, dans le condensat, et des populations dans le réservoir créé sous le spot, de durée de vie $1/\gamma_R$.

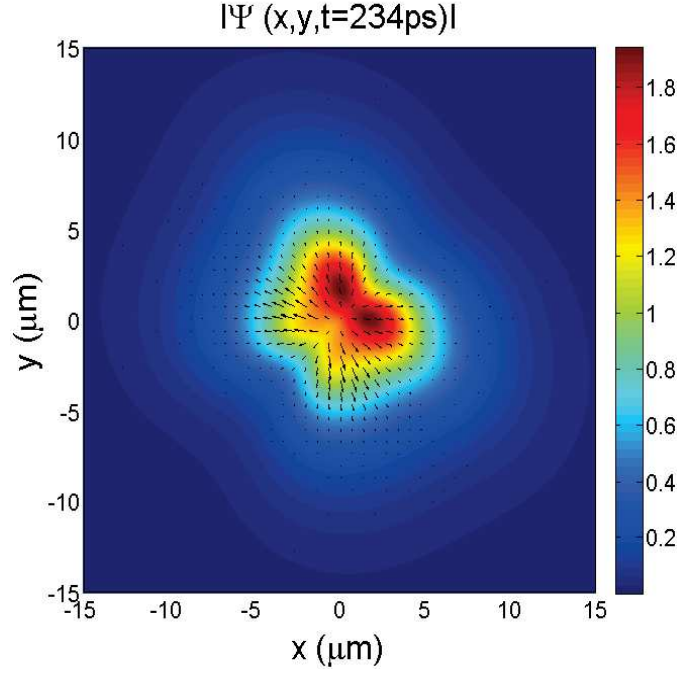


FIGURE 4.13 – Simulation du profil 2D du condensat en champ proche : le champ de vitesse est représenté par les flèches noires ($P = 1.7 P^{th}$: valeur mesurée).

4.2.7 Investigation des instabilités spatiales et temporelles

Nous avons noté au début du chapitre l'anisotropie de propagation qui apparaît en augmentant la puissance de pompage (voir figure 4.4). Nous présentons ici, des résultats préliminaires de simulations de ces instabilités dans le condensat. Selon les mesures expérimentales, en augmentant la puissance de pompage, la durée de vie des polaritons baisse : dans les simulations suivantes, l'énergie $\hbar\gamma_c = 1.8 \text{ meV}$. Dans la figure (4.13), nous représentons le profil simulé du condensat, à 2D, en champ proche. De façon analogue au profil mesuré expérimentalement (voir graphe (c) de la figure (4.4)), nous remarquons une propagation anisotrope caractérisée par la fragmentation du condensat en deux lobes. En effet, cette simulation a été réalisée avec un spot d'excitation Gaussien, isotrope, ainsi, l'anisotropie de propagation ne peut pas être attribuée au profil du spot. Également, cette dernière a été

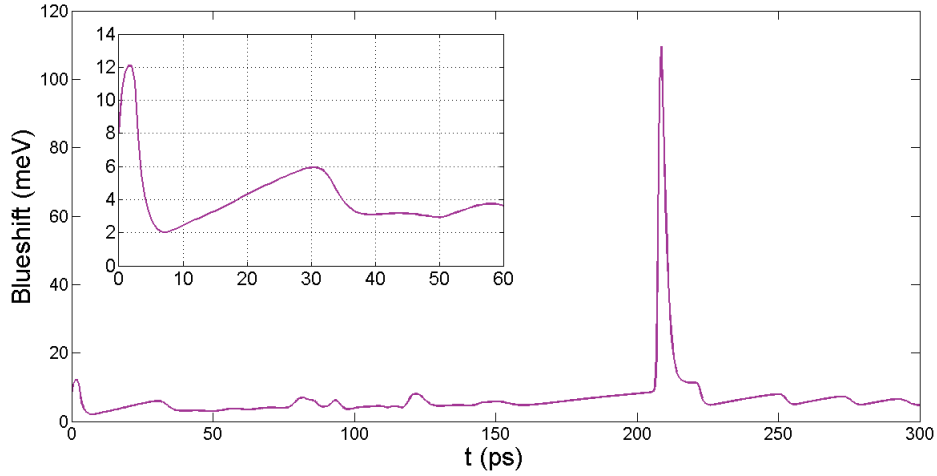


FIGURE 4.14 – Évolution temporelle du blueshift du condensat, à $P = 1.7 P^{th}$ (valeur mesurée).

réalisée avec des paramètres numériques respectant le critère de stabilité de notre schéma numérique, déduit dans le deuxième chapitre. Ainsi, comme a été expliqué dans le chapitre précédent, sous-section (3.3.3), les instabilités observées sont des instabilités physiques relatives aux paramètres du système. Ces instabilités sont à la fois spatiales et temporelles comme le montre l'évolution du Blueshift représentée dans la figure (4.14). Sur cette figure, nous repérons la valeur mesurée de 12 meV (figure (4.3)) pour le blueshift, à $P = 1.7 P^{th}$ (valeur mesurée), juste au début de la condensation.

Conclusion

Nous avons exposé dans ce chapitre, les résultats de simulations dynamiques de la condensation des polaritons dans une microcavité à couche ZnO massive, soumise à une excitation non-résonante, quasi-continue. Cette étude fournit beaucoup plus d'informations que l'étude antérieure menée par R. Hahe, en régime stationnaire, et en coordonnées polaires de la même expérience de condensation. Nous avons accédé à travers notre simulation dynamique à plus de détails sur les mécanismes de formation du condensat. En étudiant la dynamique temporelle, nous avons souligné l'importance du régime transitoire dans le processus de condensation. En étudiant la dyna-

CHAPITRE 4. MODÉLISATION DYNAMIQUE D'UN CONDENSAT D'UNE MICROCAVITÉ ZNO

mique spatiale, nous avons pu identifier les différents mécanismes de pertes de particules localement, sous le spot. Finalement, nous avons présenté des résultats préliminaires sur les instabilités spatiales et temporelles, observées expérimentalement lors de l'augmentation de la puissance de pompage. Dans ce contexte, des études plus poussées sont nécessaires pour expliquer l'origine physique de ces instabilités repérées dans le condensat.

Conclusion

L'objectif de cette thèse est la compréhension de la dynamique de formation des condensats de polaritons de microcavités, et de l'effet des différentes configurations de stimulation sur le comportement des populations et de l'énergie du système. Notre étude a été essentiellement exploitée ensuite pour la simulation des différents aspects de la condensation des polaritons dans une microcavité ZnO sous excitation focalisée. Pour ce faire, nous avons adopté le modèle Gross-Pitaevskii généralisé. Ce modèle couple une équation non linéaire qui décrit l'évolution spatiale et temporelle de la fonction d'onde du condensat, à une seconde équation qui décrit la même évolution pour la densité de particules dans le réservoir, créée suite à l'excitation du système.

Dans un premier temps, nous avons proposé une approche numérique pour la résolution complète du modèle Gross-Pitaevskii généralisé à deux dimensions en coordonnées cartésiennes. Cette dernière est basée sur la méthode des différences finies appliquée aux variables spatiales combinée à la méthode Runge-Kutta 4 appliquée à la variable temporelle. Nous avons justifié la convergence et la stabilité de notre schéma et nous l'avons validé à travers la confrontation de nos résultats avec des résultats déjà publiés.

Nous nous sommes concentrés sur l'étude des aspects du seuil de condensation des polaritons rarement abordés dans les travaux théoriques, notamment, dans le cadre du modèle Gross-Pitaevskii. En étudiant le cas d'école du condensat CdTe sous un grand spot d'excitation continue dans le temps, nous avons proposé une approche nouvelle pour la détermination du seuil. Dans cette approche, le seuil est déterminé à travers la discontinuité de la dérivée première de la self-énergie du condensat, signature d'une transition de phase du premier ordre. En effet, grâce à notre étude dynamique, nous avons pu poursuivre le temps d'établissement du régime permanent en fonc-

CONCLUSION

tion de la puissance de pompage. Ainsi, nous avons repéré une divergence de ce temps aux alentours proches du seuil et, un comportement asymptotique asymétrique à la valeur du seuil. Sous la même configuration temporelle d'excitation, nous avons cherché à comprendre le comportement du seuil de condensation en jouant sur le profil spatial par la variation du diamètre du spot. Nous avons trouvé, conformément à des résultats expérimentaux récents pour des polaritons ZnO et GaN, une baisse du seuil avec l'augmentation du diamètre d'excitation. En analysant les différentes contributions des énergies dans l'énergie totale du condensat, nous avons montré que la baisse du seuil est due à une baisse de l'énergie cinétique du condensat, i.e, à une décorrélation progressive de celui-ci des interactions répulsives avec le réservoir qui lui a donné naissance. En effet, des instabilités relevées dans les simulations, et reliées selon des études récentes au choix des paramètres, ont empêché l'obtention de ces résultats pour les polaritons ZnO. Sous excitation impulsionnelle, le déclenchement de la condensation est difficile à repérer. Cependant, nous avons montré l'augmentation du seuil de condensation grâce à un régime de gain efficace mais qui décline rapidement à cause de la courte durée de l'impulsion.

Finalement, nous avons cherché à modéliser une expérience de condensation des polaritons dans une microcavité ZnO excitée par un petit spot en régime quasi-continu. Avec notre modélisation dynamique, nous avons abordé plusieurs aspects de la condensation qui ne pouvaient pas être abordés avec une simulation stationnaire antérieure de la condensation, dans la même microcavité. Nous avons souligné l'influence importante du régime transitoire sur la formation du condensat. A travers l'étude de la dynamique spatiale, nous avons identifié les différents mécanismes de pertes sous la région du spot. Et nous avons essayé d'accéder aux effets d'anisotropie observés dans les expériences.

L'étude abordée dans cette thèse pourrait être complétée en améliorant les résultats des calculs numériques pour les paramètres de la microcavité ZnO. Il serait également intéressant d'explorer de nouvelles géométries d'excitations récemment utilisées dans les expériences. Notamment, un spot allongé pour une éjection uni-directionnelle du condensat, un spot top-hat pour limiter la dépendance en taille de spot et le transport radial, un spot annulaire pour

CONCLUSION

piéger le condensat. Le rôle de la relaxation devra aussi être exploré dans le cadre de ce modèle, suivant des travaux récents dans lesquels il a été étudié dans le régime stationnaire.

Annexe A

Principe de la méthode Runge-Kutta 4

De façon générale, les méthodes Runge-Kutta sont des méthodes très utilisées pour la résolution des équations différentielles. Leur popularité vient du fait qu'elles sont d'une part, des méthodes de calcul explicites, d'où la simplicité de leur implémentation numériquement. D'autre part, leur utilisation ne nécessite que la connaissance de la solution initiale. Nous nous restreignons dans cet annexe à un rappel du principe de la méthode Runge-Kutta d'ordre 4 que nous avons utilisée dans notre travail numérique [69].

Considérons l'équation différentielle du premier ordre suivante

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)).$$

La méthode rudimentaire pour la résolution de la forme discrète de l'équation continue ci-dessus, est la méthode d'Euler qui utilise un développement de Taylor au premier ordre :

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= \frac{y(t + h_t) - y(t)}{h_t} \\ y(t + h_t) &= y(t) + h_t f(t, y(t))\end{aligned}$$

h_t étant le pas de discrétisation en t . Cette dernière définit donc deux suites :

— Une première qui permet de définir les valeurs de t

$$\begin{cases} \text{Terme initial : } t_0 \\ \text{Relation de récurrence : } t_{i+1} = t_i + h_t \end{cases}$$

— Une deuxième qui permet d'évaluer la valeur de y

$$\begin{cases} \text{Terme initial : } y_0 \\ \text{Relation de récurrence : } y_{i+1} = y_i + h_t f(t_i, y_i) \end{cases}$$

De cette façon, la valeur de la fonction inconnue y à un instant t est une fonction explicite de sa valeur à l'instant juste avant $t - h_t$. Son évaluation à t par cette méthode manque de précision comme elle ne repose que sur une seule évaluation de sa dérivée pendant une itération de t_i à t_{i+1} .

Autrement, la méthode **RK4** définit la deuxième suite pour le calcul de y comme suit :

$$\begin{cases} \text{Terme initial : } y_0 \\ \text{Relation de récurrence : } y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases}$$

avec

$$\begin{aligned} k_1 &= h_t * f(t_i, y_i) \\ k_2 &= h_t * f(t_i + \frac{h_t}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 &= h_t * f(t_i + \frac{h_t}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 &= h_t * f(t_i + h_t, y_i + k_3) \end{aligned}$$

Ainsi, le calcul de y pendant une itération de t_i à t_{i+1} passe par le calcul de quatre estimations de la valeur de sa dérivée :

- La première estimation de la dérivée k_1 au point de départ t_i correspond à celle de la méthode d'Euler.
- La seconde estimation k_2 s'effectue à mi-intervalle

$$k_2 = h_t * f(t_{i+\frac{1}{2}}, \hat{y}_{i+\frac{1}{2}}) = h_t * f(t_i + \frac{h_t}{2}, y_i + \frac{h_t}{2} * f(t_i, y_i)).$$

- La troisième estimation k_3 se refait à mi-intervalle en utilisant la valeur de la dérivée au même point calculée dans la seconde estimation

$$k_3 = h_t * f(t_{i+\frac{1}{2}}, \hat{y}_{i+\frac{1}{2}}) = h_t * f(t_i + \frac{h_t}{2}, y_i + \frac{h_t}{2} * f(t_{i+\frac{1}{2}}, \hat{y}_{i+\frac{1}{2}})).$$

- Et, la dernière estimation k_4 s'effectue à pas complet en utilisant la valeur de la dérivée calculée à mi-intervalle dans la troisième estimation

$$k_4 = h_t * f(t_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) = h_t * f(t_i + h_t, y_i + h_t * f(t_{i+\frac{1}{2}}, \hat{y}_{i+\frac{1}{2}})).$$

Finalement, la solution au pas suivant y_{i+1} est la somme explicite de la solution au pas précédent y_i plus la moyenne pondérée des quatre estimations ci-dessus de la méthode **RK4**.

Annexe B

Data de convergence

Nous détaillons ici les calculs de convergence résumés dans les deux tableaux (2.1) et (2.2) du chapitre 2. Nous donnons dans les trois tableaux (B.1) (B.2) et (B.3) les data pour les trois puissances ascendantes de pompage $P_1 = 25.835 \mu m^{-2} ps^{-1}$, $P_2 = 60.790 \mu m^{-2} ps^{-1}$ et $P_3 = 85.106 \mu m^{-2} ps^{-1}$. Le pas temporel prend les deux valeurs $\tilde{h}_t = \{3 \times 10^{-4}, 6 \times 10^{-4}\}$ et le nombre de points de discrétisation est choisi de sorte que le critère de stabilité soit respecté dans tous les cas.

ANNEXE B. DATA DE CONVERGENCE

TABLE B.1 – Convergence du blueshift à $t = 99 \text{ ps}$, pour plusieurs valeurs du pas spatial, et deux valeurs du pas temporel respectant le critère de stabilité dans tous les cas. La puissance de pompage est $P_1 = 25.835 \text{ } \mu\text{m}^{-2}\text{ps}^{-1}$.

Points de Discrétisation	Pas spatial ($\tilde{h}_x = \tilde{h}_y$)	Facteur de stabilité ($\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2$)	Blueshift (meV)
$\tilde{h}_t = 3 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0074	0.30668
150	0.1342	0.0167	0.30641
200	0.1005	0.0297	0.30632
210	0.0957	0.0328	0.30631
220	0.0913	0.0360	0.30630
230	0.0873	0.0393	0.30629
240	0.0837	0.0428	0.30628
250	0.0803	0.0465	0.30627
300	0.0669	0.0671	0.30625
350	0.0573	0.0914	0.30624
400	0.0501	0.1194	0.30623
450	0.0445	0.1512	0.30622
500	0.0401	0.1868	0.30622
550	0.0364	0.2261	0.30621
600	0.0334	0.2691	0.30621
700	0.0286	0.3665	0.30621
800	0.0250	0.4788	0.30621
$\tilde{h}_t = 6 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0147	0.30668
200	0.1005	0.0594	0.30632
300	0.0669	0.1341	0.30625
400	0.0501	0.2388	0.30623
500	0.0401	0.3735	0.30622

ANNEXE B. DATA DE CONVERGENCE

TABLE B.2 – Convergence du blueshift à $t = 99 \text{ ps}$, pour plusieurs valeurs du pas spatial, et deux valeurs du pas temporel respectant le critère de stabilité dans tous les cas. La puissance de pompage est $P_2 = 60.790 \text{ } \mu\text{m}^{-2}\text{ps}^{-1}$.

Points de Discrétisation	Pas spatial ($\tilde{h}_x = \tilde{h}_y$)	Facteur de stabilité ($\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2$)	Blueshift (meV)
$\tilde{h}_t = 3 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0074	0.84568
180	0.1117	0.0240	0.95984
190	0.1058	0.0268	0.96933
200	0.1005	0.0297	0.97233
210	0.0957	0.0328	0.97314
220	0.0913	0.0360	0.97353
230	0.0873	0.0393	0.97381
240	0.0837	0.0428	0.97402
250	0.0803	0.0465	0.97418
260	0.0772	0.0503	0.97430
300	0.0669	0.0671	0.97461
400	0.0501	0.1194	0.97485
440	0.0456	0.1445	0.97488
450	0.0445	0.1512	0.97489
460	0.0436	0.1580	0.97490
470	0.0426	0.1650	0.97490
480	0.0418	0.1721	0.97491
500	0.0401	0.1868	0.97491
600	0.0334	0.2691	0.97493
700	0.0286	0.3665	0.97494
800	0.0250	0.4788	0.97495
$\tilde{h}_t = 6 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0147	0.84843
200	0.1005	0.0594	0.97233
300	0.0669	0.1341	0.97461
400	0.0501	0.2388	0.97485
500	0.0401	0.3735	0.97491

ANNEXE B. DATA DE CONVERGENCE

TABLE B.3 – Convergence du blueshift à $t = 99 \text{ ps}$, pour plusieurs valeurs du pas spatial, et deux valeurs du pas temporel respectant le critère de stabilité dans tous les cas. La puissance de pompage est $P_3 = 85.106 \text{ } \mu\text{m}^{-2}\text{ps}^{-1}$.

Points de Discrétisation	Pas spatial ($\tilde{h}_x = \tilde{h}_y$)	Facteur de stabilité ($\tilde{h}_t/\tilde{h}_x^2$)	Blueshift (meV)
$\tilde{h}_t = 3 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0074	1.15056
200	0.1005	0.0297	1.41647
300	0.0669	0.0671	1.49896
310	0.0647	0.0716	1.49997
320	0.0627	0.0763	1.50039
330	0.0608	0.0812	1.50074
340	0.0590	0.0862	1.50104
400	0.0501	0.1194	1.50222
470	0.0426	0.1650	1.50291
480	0.0418	0.1721	1.50297
490	0.0409	0.1793	1.50304
500	0.0401	0.1868	1.50309
510	0.0393	0.1943	1.50315
600	0.0334	0.2691	1.50349
700	0.0286	0.3665	1.50371
800	0.0250	0.4788	1.50384
$\tilde{h}_t = 6 \times 10^{-4}$			
100	0.2020	0.0147	1.15045
200	0.1005	0.0594	1.41454
300	0.0669	0.1341	1.49897
400	0.0501	0.2388	1.50222
500	0.0401	0.3735	1.50310

Résumé

Les polaritons de microcavité sont des états hybrides lumière-matière à caractère bosonique. Dans les dernières décennies, un grand intérêt a été accordé à leur phase de condensation de Bose-Einstein. Nous avons développé dans ce travail des outils théoriques et numériques pour comprendre et interpréter la dynamique spatiale et temporelle de la formation des condensats de polaritons. Nous avons proposé une approche numérique pour la résolution complète des équations couplées du modèle Gross-Pitaevskii généralisé à deux dimensions en coordonnées cartésiennes. Nous avons cherché à comprendre les aspects du seuil de condensation sous différentes configurations spatiales et temporelles d'excitation optique non résonante. Nous avons en particulier proposé une nouvelle approche pour définir le seuil. Enfin, pour une condensation sous excitation focalisée, dans une microcavité ZnO, nous avons pu accéder à, et comprendre, quelques propriétés vues dans les expériences.

Mots-clés : exciton, microcavité, polariton, condensation de Bose-Einstein, Gross-Pitaevskii.

Microcavity polaritons are hybrid light-material states of a bosonic nature. In the last decades, an enormous interest has been paid to their Bose-Einstein condensation phase. We develop, in this work the theoretical and numerical tools to understand and interpret the spatial and temporal dynamics of the formation of condensates of polaritons. We propose a numerical approach for the comprehensive resolution of the generalized Gross-Pitaevskii model in two-dimensions in Cartesian coordinates. We sought to understand the aspects of the condensation threshold under different spatial and temporal configurations of non-resonant optical excitation. In particular, we pro-

RÉSUMÉ

pose a new approach to define the threshold. Finally, for a condensation under a focal excitation in a ZnO microcavity, we were able to access, and understand, some of the experimentally observed properties.

Keywords : exciton, microcavity, polariton, Bose-Einstein condensation, Gross-Pitaevskii.

Bibliographie

- [1] Hui Deng, Hartmut Haug, and Yoshihisa Yamamoto. Exciton-polariton bose-einstein condensation. *Reviews of modern physics*, 82(2) :1489, 2010.
- [2] Iacopo Carusotto and Cristiano Ciuti. Quantum fluids of light. *Reviews of Modern Physics*, 85(1) :299, 2013.
- [3] Jonathan Keeling and Natalia G Berloff. Exciton–polariton condensation. *Contemporary Physics*, 52(2) :131–151, 2011.
- [4] Aurélien Trichet, Emilien Durupt, François Médard, Sanjoy Datta, Anna Minguzzi, and Maxime Richard. Long-range correlations in a 97% excitonic one-dimensional polariton condensate. *Physical Review B*, 88(12) :121407, 2013.
- [5] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :3969–3973, Nov 1995.
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221) :198–201, 1995.
- [7] Jacek Kasprzak, M Richard, S Kundermann, A Baas, P Jeambrun, JMJ Keeling, FM Marchetti, MH Szymańska, R Andre, JL Staehli, et al. Bose–einstein condensation of exciton polaritons. *Nature*, 443(7110) :409–414, 2006.
- [8] S Christopoulos, G Baldassarri Höger Von Högersthal, AJD Grundy, PG Lagoudakis, AV Kavokin, JJ Baumberg, G Christmann, R Butté, E Feltin, J-F Carlin, et al. Room-temperature polariton lasing in semiconductor microcavities. *Physical review letters*, 98(12) :126405, 2007.

BIBLIOGRAPHIE

- [9] Jacques Levrat, Raphaël Butté, Eric Feltin, Jean-François Carlin, Nicolas Grandjean, Dmitry Solnyshkov, and Guillaume Malpuech. Condensation phase diagram of cavity polaritons in gan-based microcavities : Experiment and theory. *Physical Review B*, 81(12) :125305, 2010.
- [10] Feng Li, Laurent Orosz, Olfa Kamoun, Sophie Bouchoule, Christelle Brimont, Pierre Disseix, Thierry Guillet, Xavier Lafosse, Mathieu Leroux, Joel Leymarie, et al. From excitonic to photonic polariton condensate in a zno-based microcavity. *Physical review letters*, 110(19) :196406, 2013.
- [11] M Richard, J Kasprzak, R André, R Romestain, Le Si Dang, G Malpuech, and A Kavokin. Experimental evidence for nonequilibrium bose condensation of exciton polaritons. *Physical Review B*, 72(20) :201301, 2005.
- [12] T. Gao, P. S. Eldridge, T. C. H. Liew, S. I. Tsintzos, G. Stavrinidis, G. Deligeorgis, Z. Hatzopoulos, and P. G. Savvidis. Polariton condensate transistor switch. *Phys. Rev. B*, 85 :235102, Jun 2012.
- [13] A. Askitopoulos, H. Ohadi, A. V. Kavokin, Z. Hatzopoulos, P. G. Savvidis, and P. G. Lagoudakis. Polariton condensation in an optically induced two-dimensional potential. *Phys. Rev. B*, 88 :041308, Jul 2013.
- [14] Peter Cristofolini. *Optical control of polariton condensation and dipolaritons in coupled quantum wells*. PhD thesis, University of Cambridge, 2015.
- [15] Michiel Wouters, Iacopo Carusotto, and Cristiano Ciuti. Spatial and spectral shape of inhomogeneous nonequilibrium exciton-polariton condensates. *Physical Review B*, 77(11) :115340, 2008.
- [16] T. D. Doan, Huy Thien Cao, D. B. Tran Thoai, and H. Haug. Condensation kinetics of microcavity polaritons with scattering by phonons and polaritons. *Phys. Rev. B*, 72 :085301, Aug 2005.
- [17] T. D. Doan, Huy Thien Cao, D. B. Tran Thoai, and H. Haug. Microcavity polariton kinetics for bosonic condensation and lasing in ii-vi compound materials. *Phys. Rev. B*, 74 :115316, Sep 2006.
- [18] G. Malpuech, A. Kavokin, A. Di Carlo, and J. J. Baumberg. Polariton lasing by exciton-electron scattering in semiconductor microcavities. *Phys. Rev. B*, 65 :153310, Apr 2002.

BIBLIOGRAPHIE

- [19] F. Boeuf. *Spectroscopie optique linéaire et non-linéaire dans les micro-cavités de semiconducteurs II-VI à base de CdTe*. PhD thesis, 2000.
- [20] Max Born and Emil Wolf. *Principles of optics : electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. CUP Archive, 2000.
- [21] P. Yeh. *Optical Waves in Layered Media*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 2005.
- [22] Sihem Jaziri. *Etude des états excitoniques dans les nanostructures semiconductrices*. PhD thesis, Université de Tunis, 1996.
- [23] P. Lawaetz. Valence-band parameters in cubic semiconductors. *Phys. Rev. B*, 4 :3460–3467, Nov 1971.
- [24] D. D. Sell, S. E. Stokowski, R. Dingle, and J. V. DiLorenzo. Polariton reflectance and photoluminescence in high-purity gaas. *Phys. Rev. B*, 7 :4568–4586, May 1973.
- [25] Bernard Gil, Sandra Clur, and Olivier Briot. The exciton-polariton effect on the photoluminescence of gan on sapphire. *Solid state communications*, 104(5) :267–270, 1997.
- [26] Marian Zamfirescu, Alexey Kavokin, Bernard Gil, Guillaume Malpuech, and Mikhail Kaliteevski. Zno as a material mostly adapted for the realization of room-temperature polariton lasers. *Phys. Rev. B*, 65 :161205, Apr 2002.
- [27] Bernard Gil and Andenet Alemu. Optical anisotropy of excitons in strained gan epilayers grown along the 101^{-0} direction. *Physical Review B*, 56(19) :12446, 1997.
- [28] NN Syrbu, IM Tiginyanu, VV Zalamai, VV Ursaki, and EV Rusu. Exciton polariton spectra and carrier effective masses in zno single crystals. *Physica B : Condensed Matter*, 353(1) :111–115, 2004.
- [29] I Vurgaftman and JR Meyer. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 94(6) :3675–3696, 2003.
- [30] Alexey Kavokin, Jeremy J Baumberg, Guillaume Malpuech, and Fabrice P Laussy. *Microcavities*, volume 16. OUP Oxford, 2011.

BIBLIOGRAPHIE

- [31] M. R. Vladimirova, A. V. Kavokin, and M. A. Kaliteevski. Dispersion of bulk exciton polaritons in a semiconductor microcavity. *Phys. Rev. B*, 54 :14566–14571, Nov 1996.
- [32] Y. Chen, A. Tredicucci, and F. Bassani. Bulk exciton polaritons in gaas microcavities. *Phys. Rev. B*, 52 :1800–1805, Jul 1995.
- [33] Vincenzo Savona, LC Andreani, P Schwendimann, and A Quattropani. Quantum well excitons in semiconductor microcavities : unified treatment of weak and strong coupling regimes. *Solid State Communications*, 93(9) :733–739, 1995.
- [34] Giovanna Panzarini, Lucio Claudio Andreani, A Armitage, D Baxter, MS Skolnick, VN Astratov, JS Roberts, Alexey V Kavokin, Maria R Vladimirova, and MA Kaliteevski. Cavity-polariton dispersion and polarization splitting in single and coupled semiconductor microcavities. *Physics of the Solid State*, 41(8) :1223–1238, 1999.
- [35] J. J. Hopfield. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals. *Phys. Rev.*, 112 :1555–1567, Dec 1958.
- [36] Hung T.Diep. *Physique Statistique*. Ellipses, 2006.
- [37] Baptiste Battelier. *Gaz bidimensionnel de Bosons ultrafroids Nouvelle expérience de condensation de Bose-Einstein*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2007.
- [38] Pallab Bhattacharya, Thomas Frost, Saniya Deshpande, Md Zunaid Baten, Arnab Hazari, and Ayan Das. Room temperature electrically injected polariton laser. *Phys. Rev. Lett.*, 112 :236802, Jun 2014.
- [39] Lev P Pitaevskii and Sandro Stringari. *Bose-einstein condensation*. Number 116. Oxford University Press, 2003.
- [40] Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii, and Sandro Stringari. Theory of bose-einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*, 71 :463–512, Apr 1999.
- [41] Nataliya Bobrovska, Elena A Ostrovskaya, and Michał Matuszewski. Stability and spatial coherence of nonresonantly pumped exciton-polariton condensates. *Physical Review B*, 90(20) :205304, 2014.

BIBLIOGRAPHIE

- [42] Franziska Veit, Marc Aßmann, Manfred Bayer, Andreas Löffler, Sven Höfling, Martin Kamp, and Alfred Forchel. Spatial dynamics of step-wise homogeneously pumped polariton condensates. *Physical Review B*, 86(19) :195313, 2012.
- [43] Guangyao Li, Michael D Fraser, Alexander Yakimenko, and Elena A Ostrovskaya. Stability of persistent currents in open dissipative quantum fluids. *Physical Review B*, 91(18) :184518, 2015.
- [44] Guillaume Malpuech, Alexey Kavokin, and Fabrice P Laussy. Polariton bose condensation in microcavities. *physica status solidi (a)*, 195(3) :568–578, 2003.
- [45] D. D. Solnyshkov, H. Tercas, K. Dini, and G. Malpuech. Hybrid boltzmann-gross-pitaevskii theory of bose-einstein condensation and superfluidity in open driven-dissipative systems. *Phys. Rev. A*, 89 :033626, Mar 2014.
- [46] H. Haug, T. D. Doan, and D. B. Tran Thoai. Quantum kinetic derivation of the nonequilibrium gross-pitaevskii equation for nonresonant excitation of microcavity polaritons. *Phys. Rev. B*, 89 :155302, Apr 2014.
- [47] Franziska Veit, Marc Aßmann, Manfred Bayer, Andreas Löffler, Sven Höfling, and Alfred Forchel. Relaxation dynamics of optically imprinted polariton wires. In *SPIE OPTO*, pages 82600O–82600O. International Society for Optics and Photonics, 2012.
- [48] Maxime Richard, Jacek Kasprzak, Robert Romestain, Régis André, and Le Si Dang. Spontaneous coherent phase transition of polaritons in cdte microcavities. *Phys. Rev. Lett.*, 94 :187401, May 2005.
- [49] P Muruganandam and Sadhan Kumar Adhikari. Fortran programs for the time-dependent gross-pitaevskii equation in a fully anisotropic trap. *Computer Physics Communications*, 180(10) :1888–1912, 2009.
- [50] Weizhu Bao, Qinglin Tang, and Yong Zhang. Accurate and efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar bose-einstein condensates via the nonuniform fft. *Communications in Computational Physics*, 19 :1141–1166, 5 2016.
- [51] Weizhu Bao, Shidong Jiang, Qinglin Tang, and Yong Zhang. Computing the ground state and dynamics of the nonlinear schrödinger equation

BIBLIOGRAPHIE

- with nonlocal interactions via the nonuniform fft. *Journal of Computational Physics*, 296 :72–89, 2015.
- [52] Ronald M Caplan and Ricardo Carretero-González. Numerical stability of explicit runge–kutta finite-difference schemes for the nonlinear schrödinger equation. *Applied Numerical Mathematics*, 71 :24–40, 2013.
- [53] Frederick Ira Moxley, Tim Byrnes, Baoling Ma, Yun Yan, and Weizhong Dai. A g-fdtd scheme for solving multi-dimensional open dissipative gross–pitaevskii equations. *Journal of Computational Physics*, 282 :303–316, 2015.
- [54] Hayder Salman. A time-splitting pseudospectral method for the solution of the gross–pitaevskii equations using spherical harmonics with generalised-laguerre basis functions. *Journal of Computational Physics*, 258 :185–207, 2014.
- [55] Xavier Antoine, Weizhu Bao, and Christophe Besse. Computational methods for the dynamics of the nonlinear schrödinger/gross–pitaevskii equations. *Computer Physics Communications*, 184(12) :2621–2633, 2013.
- [56] M. M. Cerimele, M. L. Chiofalo, F. Pistella, S. Succi, and M. P. Tosi. Numerical solution of the gross-pitaevskii equation using an explicit finite-difference scheme : An application to trapped bose-einstein condensates. *Phys. Rev. E*, 62 :1382–1389, Jul 2000.
- [57] Michiel Wouters and Iacopo Carusotto. Excitations in a nonequilibrium bose-einstein condensate of exciton polaritons. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :140402, Oct 2007.
- [58] Rereao Hahe, Christelle Brimont, Pierre Valvin, Thierry Guillet, Feng Li, Mathieu Leroux, Jesus Zuniga-Perez, Xavier Lafosse, Gilles Patriarche, and Sophie Bouchoule. Interplay between tightly focused excitation and ballistic propagation of polariton condensates in a zno microcavity. *Physical Review B*, 92(23) :235308, 2015.
- [59] Helena Franke, Chris Sturm, Gerald Wagner, Marius Grundmann, et al. Ballistic propagation of exciton-polariton condensates in a zno-based microcavity. *New Journal of Physics*, 14(1) :013037, 2012.

BIBLIOGRAPHIE

- [60] Raphaël Butté, Jacques Levrat, Gabriel Christmann, Eric Feltin, Jean-François Carlin, and Nicolas Grandjean. Phase diagram of a polariton laser from cryogenic to room temperature. *Physical Review B*, 80(23) :233301, 2009.
- [61] Jian Wang, Wei Xie, Long Zhang, Dan Xu, Wenhui Liu, Jian Lu, Yinglei Wang, Jie Gu, Yan Chen, Xuechu Shen, et al. Exciton-polariton condensate induced by evaporative cooling in a three-dimensionally confined microcavity. *Physical Review B*, 91(16) :165423, 2015.
- [62] Ying-Yu Lai, Yu-Hsun Chou, Yu-Pin Lan, Tien-Chang Lu, Shing-Chung Wang, and Yoshihisa Yamamoto. Crossover from polariton lasing to exciton lasing in a strongly coupled zno microcavity. *Scientific reports*, 6, 2016.
- [63] O Jamadi, F Réveret, E Mallet, P Disseix, F Médard, M Mihailovic, D Solnyshkov, G Malpuech, J Leymarie, X Lafosse, et al. Polariton condensation phase diagram in wide-band-gap planar microcavities : Gan versus zno. *Physical Review B*, 93(11) :115205, 2016.
- [64] Nataliya Bobrovska, Elena A. Ostrovskaya, and Michał Matuszewski. Stability and spatial coherence of nonresonantly pumped exciton-polariton condensates. *Phys. Rev. B*, 90 :205304, Nov 2014.
- [65] Nataliya Bobrovska, Michał Matuszewski, Konstantinos S Daskalakis, Stefan A Maier, and Stéphane Kéna-Cohen. Dynamical instability of a non-equilibrium exciton-polariton condensate. *arXiv preprint arXiv :1603.06897*, 2016.
- [66] Feng Li, Laurent Orosz, Olfa Kamoun, Sophie Bouchoule, Christelle Brimont, Pierre Disseix, Thierry Guillet, Xavier Lafosse, Mathieu Leroux, Joël Leymarie, et al. Fabrication and characterization of a room-temperature zno polariton laser. *Applied Physics Letters*, 102(19) :191118, 2013.
- [67] Rereao Hahe. *Imagerie de la génération et de la propagation des condensats de polaritons dans les microcavités ZnO*. PhD thesis, Université de Montpellier, 2015.
- [68] Bryan Nelsen, Gangqiang Liu, Mark Steger, David W. Snoke, Ryan Balili, Ken West, and Loren Pfeiffer. Dissipationless flow and sharp

BIBLIOGRAPHIE

threshold of a polariton condensate with long lifetime. *Phys. Rev. X*,
3 :041015, Nov 2013.

[69] J P Nougier. *Méthodes de calcul numérique*. Masson, 1989.