



HAL
open science

Transport électronique en régime de couplage fort lumière-matière pour les dispositifs quantiques moyen-infrarouge

Mathurin Lagrée

► **To cite this version:**

Mathurin Lagrée. Transport électronique en régime de couplage fort lumière-matière pour les dispositifs quantiques moyen-infrarouge. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université Paris-Saclay, 2022. Français. NNT : 2022UPAST115 . tel-03863209

HAL Id: tel-03863209

<https://theses.hal.science/tel-03863209>

Submitted on 21 Nov 2022

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.

Transport électronique en régime de
couplage fort lumière-matière pour les
dispositifs quantiques moyen-infrarouge
*Electronic transport in the strong light-matter coupling
regime for mid-infrared quantum devices*

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 575,
Physique et ingénierie : Electrons, Photons, Sciences du vivant (EOBE)
Spécialité de doctorat : Électronique et Optoélectronique, Nano- et Microtechnologies
Graduate School : Sciences de l'ingénierie et des systèmes
Réfèrent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse préparée dans les unités de recherche C2N (Université Paris-Saclay, CNRS) et III-V lab
(Thales), sous la direction de **Raffaele COLOMBELLI**, Directeur de recherche, la
co-supervision de **Virginie TRINITÉ**, Docteure, et la co-supervision d' **Alexandre DELGA**,
Docteur.

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 19 septembre 2022, par

Mathurin LAGRÉE

Composition du jury

François JULIEN Directeur de recherche, C2N	Président
Simone DE LIBERATO Directeur de recherche, university of Southampton	Rapporteur & examinateur
Andreas WACKER Directeur de recherche, Lund university	Rapporteur & examinateur
Angela VASANELLI Professeure, LPENS	Examinatrice
Roland TEISSIER Directeur de recherche, université de Montpellier	Examineur
Raffaele COLOMBELLI Directeur de recherche, C2N	Directeur de thèse

Titre : Transport électronique en régime de couplage fort lumière-matière pour les dispositifs quantiques moyen-infrarouge

Mots clés : couplage fort, inter-sousbande, infrarouge, détecteurs, transport électronique, polaritons

Résumé : Ce travail de recherche se focalise sur l'étude du transport électronique dans les photo-détecteurs intersousbandes (infrarouge, 10 μm) dans différents régimes d'intensité de couplage lumière-matière.

Pour le régime de couplage faible, où les quanta de lumière et de matière sont les électrons et photons, ce manuscrit présente la description théorique extensive du fonctionnement d'un dispositif inter-sousbande en particulier, le détecteur à cascade quantique (QCD). Un procédé de conception et d'optimisation de ce dispositif est présenté en détail, du dimensionnement de l'environnement électromagnétique à la conception de la zone active.

Pour le régime de couplage fort, l'interaction lumière-matière devient si intense que de nouvelles quasi-particules, les polaritons, apparaissent. Ces particules hybrides mi-matière mi-lumière, initialement découvertes dans les systèmes semiconducteurs excitoniques, ont depuis été largement étudiées et démontrées dans d'autres domaines, en particulier les polaritons inter-sousbandes. Malgré de nombreuses propriétés quantiques uniques (émission stimulée,

condensation de Bose-Einstein), il n'existe aujourd'hui que très peu de dispositifs applicatifs fondés sur les polaritons.

Dans ce travail de recherche, on propose une modélisation du transport électronique dans les détecteurs à cascade quantique en régime de couplage fort. On présente différentes stratégies de modélisation, de complexité croissante, dont les différences sont extensivement étudiées et discutées. Ces différents modèles mettent en évidence les modifications profondes qu'engendrent le couplage fort sur les propriétés optiques et photo-électriques de ces dispositifs. En comparant ces travaux de modélisation avec des jeux de données expérimentaux, on démontre en particulier la possibilité de concevoir une extraction résonnante et sélective d'excitations depuis les états polaritoniques vers la cascade de niveaux électroniques d'un QCD.

Ce travail crée des perspectives d'application pour les dispositifs inter-sousbandes fonctionnant dans un régime de couplage fort lumière-matière et renforce l'objectif de long terme de mettre en œuvre le processus inverse, c'est-à-dire l'injection électrique efficace dans des dispositifs polaritoniques émetteurs.

Title : Electronic transport in the strong light-matter coupling regime for mid-infrared quantum devices

Keywords : strong coupling, inter-subband, infrared, detectors, electronic transport, polaritons

Abstract : This research work focuses on the study of electronic transport in intersubband photodetectors (infrared, 10 μm) in different intensity regimes of light-matter coupling.

For the weak coupling regime, where the light and matter quanta are electrons and photons, this manuscript presents the extensive theoretical description of the operation of one particular inter-subband device, the quantum cascade detector (QCD). A design and optimization process of this device is presented in detail, from the dimensioning of the electromagnetic environment to the design of the active region.

For the strong coupling regime, the light-matter interaction becomes so intense that new quasiparticles, the polaritons, appear. These hybrid light-matter particles, initially discovered in excitonic semiconductor systems, have since been widely studied and demonstrated in other fields, in particular inter-subband polaritons. Despite many unique quantum properties (stimulated emission, Bose-Einstein condensation),

there are very few application devices based on polaritons today.

In this research work, a model of electronic transport in quantum cascade detectors in the strong coupling regime is proposed. We present different modeling strategies, of increasing complexity, whose differences are extensively studied and discussed. These different models highlight the profound changes that strong coupling brings to the optical and photoelectric properties of these devices. By comparing these modeling works with experimental data sets, we demonstrate in particular the possibility to design a resonant and selective extraction of excitations from polaritonic states to the electronic levels of the QCD cascade.

This work creates application perspectives for inter-subband devices operating in a strong light-matter coupling regime and reinforces the long-term goal of implementing the reverse process, i.e., efficient electrical injection into light-emitting polaritonic devices.

Remerciements

J'aimerais ici rendre hommage à l'ensemble des personnes, qui de près ou de loin, m'ont permis de mener à bien les travaux présentés dans ce manuscrit. Cet entourage bienveillant et généreux est une composante indispensable, capitale, de ces résultats.

Je remercie tout d'abord les rapporteurs de ce manuscrit et le jury de soutenance : Andreas Wacker, Simone De Liberato, Angela Vasanelli, Roland Teissier, et leur président, François Julien. Merci pour vos questions pertinentes, pour l'évaluation de ces travaux, et pour vous être déplacés, parfois de loin, pour assister à la soutenance.

Un merci sincère à mon directeur de thèse, Raffaele Colombelli, pour m'avoir fait bénéficier de sa culture étendue du sujet et d'avoir eu confiance en mes développements. Un immense merci à mes encadrants : d'abord à Virginie Trinité, reine du transport électronique, pour sa pertinence technique et son oreille attentive. Merci d'avoir toujours été là pour rentrer dans les détails. Ensuite, à Alexandre Delga, pour son apport absolument majeur et primordial sur l'ensemble des fronts scientifiques et humains de cette thèse. Ta sagacité en toute circonstance est inspirante. Bon courage pour les briques. Un grand merci à Mathieu Jeannin, pour sa contribution essentielle aux travaux présentés dans ce manuscrit. Merci pour nos échanges scientifiques, tes commentaires, questions et rectifications, toujours justes et pertinents ; et surtout, merci d'avoir lu mes mails jusqu'au bout.

Des remerciements ensuite à l'équipe MIR : merci d'abord à Jean-Luc Reverchon pour sa gestion de l'équipe et pour sa bienveillance envers les doctorants et leurs sujets fondamentaux, pas toujours en phase avec les besoins industriels du III-V lab. Merci à Salvatore pour nos interactions scientifiques, tes belles mesures de QCDs qui n'étaient pas censées fonctionner, mais surtout pour ta sympathie. Merci au capitaine des doctorants, Grégory, sans qui cette thèse ne serait que des élucubrations théoriques sans dispositifs ni mesures. Merci à Thomas pour le temps passé ensemble pendant ces trois années, à découvrir ensemble le monde de l'inter-sousbande, à se poser mutuellement des questions souvent idiotes, à boire du café et manger tes gâteaux. Merci à Marco pour sa bonne humeur et sa sympathie : le thésarium me manque. Merci aux différents stagiaires et alternants membres et ex-membres du groupe MIR : Rached, Corentin, Nour, Mathias, Inès, Romain. Bon courage à vous !

Merci à Borge Vinter, pour nos discussions, ses relectures de documents et la pertinence de ses suggestions et remarques scientifiques. Merci à Axel pour son travail et ses plaques de grande qualité. Merci à Théo pour nos trop rares interactions, et bon courage pour la suite. Un merci plus général à la plateforme : Bruno Gérard, Olivier Parillaud, Alexandre Larrue. Enfin, un remerciement sincère à Pascale Nouchi pour sa confiance et sa bienveillance.

Merci à Isabelle Sagnes, Konstantinos Pantzas et Gilles Patriarche pour nos interactions scientifiques.

Merci aux collègues de couloir, de bureau, doctorants : Pierre, Yasmine, Sylvain, Frédéric, François, Théo. Merci pour votre chaleur humaine, et les cafés/i-lunch partagés dans le jardin. Merci à Romain pour ses riffs alambiqués et nos retours en RER B. Un merci particulier à Jean Decobert, pour m'avoir fait découvrir le III-V lab. Merci à Olivier, Valeria, Mehdi, pour leur support informatique et administratif.

Merci aux copains : Ioric, Nico, Luca, Aliénor, Nessim, Orane, Max, Juliet, Anna, Ornella. Votre amitié y est pour beaucoup. Merci à la team lundi soir : Dhimo, Marty, Rémi. Merci à la StK et Matthieu.

Un immense merci à ma famille, mes parents, et mon frère Tanguy, pour leur soutien tout au long de cette thèse.

Enfin, *merci Marine.*

Avant propos

Dans le domaine du moyen-infrarouge (entre 3 et 12 μm), il existe une famille de dispositifs opto-électroniques de taille nanométrique à base de semi-conducteurs qui exploitent les effets de confinement quantique pour créer des transitions électroniques au sein de la bande de conduction : les dispositifs *inter-sousbandes*. En plaçant un dispositif inter-sousbande dans un système optique résonnant (une cavité), il est possible d'exalter l'interaction lumière-matière entre la transition électronique du dispositif et le mode électromagnétique confiné de la cavité optique. Cette exaltation permet d'accéder au régime de *couplage fort*, dont émergent deux nouveaux modes propres, les modes *polaritoniques*, issus de l'hybridation des modes électroniques et photoniques. Exploiter ce mécanisme de couplage permettrait d'envisager la conception de dispositifs opto-électroniques innovants à base de polaritons. Cependant, la compréhension profonde de la nature du transport entre un système polaritonique et un réservoir électronique est un problème irrésolu qui constitue un verrou fondamental pour le développement technologique de ces dispositifs.

Dans ce contexte, ce manuscrit présente l'étude du régime de couplage fort lumière-matière dans un dispositif inter-sousbande en particulier : le détecteur à cascade quantique (QCD). Si la liberté de conception et la nature du transport électronique dans les QCDs les édifient en une plateforme propice à l'étude fondamentale du régime de couplage fort, nous envisagerons également ce régime de fonctionnement comme un potentiel différenciateur technologique au service des performances de ces détecteurs infrarouge.

Dans le chapitre 1, nous introduisons la notion de couplage fort lumière-matière, et comment elle s'étend aux dispositifs inter-sousbandes. Nous introduirons les principaux détecteurs inter-sousbandes et comment ils se comparent pour l'étude du couplage fort. Pour appréhender la complexité de ce régime de fonctionnement, il nous faudra d'abord comprendre le transport électronique en régime de *couplage faible* : c'est l'objectif du chapitre 2, qui présente notre modélisation du transport électronique dans les détecteurs à cascade quantique en régime de couplage faible, et pose les bases de la compréhension intuitive de ce système. Le chapitre 3 résume l'ensemble de la chaîne de conception d'un détecteur à cascade quantique embarqué dans un réseau d'antennes patches, du dimensionnement de la géométrie des cavités optiques jusqu'aux choix des épaisseurs des puits quantiques. Le chapitre 4 se tourne vers l'analyse du comportement d'un QCD en régime de couplage fort, par le biais de mesures optiques et électro-optiques. Pour interpréter ces différents jeux de mesure, nous développerons un modèle semi-classique du transport basé sur la théorie des modes couplés. Enfin, le chapitre 5 présente un modèle quantique du transport en régime de couplage fort, basé sur le formalisme de la matrice densité. On verra notamment comment ce nouveau modèle permet de réconcilier les différentes approches du transport abordées en chapitre 2 et 4.

Table des matières

1	Introduction : couplage fort lumière-matière et détecteurs inter-sousbandes	10
1.1	Régime de couplage-fort et états polaritoniques	12
1.2	Polaritons inter-sousbandes	14
1.3	Injection électrique dans les états polaritoniques ISB	17
1.4	Détecteurs inter-sousbandes	17
1.4.1	Détecteur infrarouge à puits quantiques (QWIP)	18
1.4.2	Détecteur infrarouge à cascade quantique (QCD)	19
1.4.3	Figures de mérite et état de l'art	20
1.5	Détecteurs ISB pour le régime de couplage fort	21
1.5.1	QWIP et extraction depuis les états polaritoniques	22
1.5.2	QCD et extraction résonnante d'excitations polaritoniques	23
1.5.3	Gain de performance pour les détecteurs ISB en régime de couplage fort	24
1.6	Bilan	26
2	Transport électronique dans les détecteurs à cascade quantique en régime de couplage faible lumière-matière	27
2.1	Équation de Schrödinger et approximation de la fonction enveloppe	28
2.1.1	États de Bloch	29
2.1.2	Fonction enveloppe	29
2.1.3	Équation de Schrödinger unidimensionnelle	31
2.1.4	Interaction tunnel et base des états électroniques	33
2.2	Système d'équations bilans de population	37
2.2.1	Hypothèse des sousbandes thermalisées	39
2.2.2	Taux de diffusion inter-sousbandes	41
2.2.3	Taux tunnels	44
2.2.4	Populations électroniques	46
2.3	Équation de Poisson	49
2.4	Performances d'un QCD	50
2.4.1	Courant d'obscurité et énergie d'activation	51
2.4.2	Absorption et réponse	55
2.5	Capacité prédictive et évolution du modèle	58
2.5.1	Probabilité d'extraction	59
2.5.2	Masse effective et non-parabolicité	64
2.5.3	Modélisation des interfaces non-abruptes	68
2.5.4	Permittivité du puits quantique, fréquence plasma et absorption	70

2.5.5	Contacts et simulation apériodiques	72
2.5.6	Application des évolutions du modèle aux données expérimentales	78
2.6	Calibration des paramètres matériaux	80
2.7	Bilan	82
3	Conception d'un détecteur à cascades quantiques en régime de couplage faible lumière-matière	83
3.1	Présentation de l'environnement de développement	85
3.2	Conception de l'environnement électromagnétique	87
3.2.1	Introduction à la géométrie patch : modes TM_{lmn} et distribution du champ	88
3.2.2	Calcul des taux de dissipation non-radiatifs	90
3.2.3	Calcul des taux de dissipation radiatifs	94
3.2.4	Optimisation électromagnétique	97
3.3	Conception de la structure active	100
3.3.1	Puits optique	100
3.3.2	Cascade électronique	102
3.4	Conception des contacts	108
3.5	Bilan sur la conception	110
4	Comportement d'un détecteur à cascade quantique en régime de couplage fort lumière-matière : modèle semi-classique du transport	111
4.1	Origine des états polaritoniques ISB	112
4.1.1	État brillant et états noirs : origine du mode plasmonique ISB	112
4.1.2	Mode de cavité	118
4.1.3	Interaction lumière-matière : Hamiltonien complet	119
4.1.4	États polaritoniques	119
4.1.5	Distinction entre couplage fort et couplage faible	121
4.1.6	Bilan	124
4.2	Analyse optique d'un QCD en couplage fort	125
4.2.1	Mesures de réflectivité	127
4.2.2	Théorie des modes couplés à deux résonateurs	128
4.3	Analyse électro-optique d'un QCD en couplage fort	133
4.3.1	Mesures de photo-courant	133
4.3.2	Échec du modèle séquentiel du transport électronique	136
4.3.3	Théorie des modes couplés à trois résonateurs	138
4.4	Influence du dopage sur le courant d'obscurité	146
4.4.1	Mesures de courants d'obscurité	147
4.4.2	Résultats de simulations pour le courant d'obscurité	150
4.5	Bilan sur les performances d'un QCD en régime de couplage fort lumière-matière	152
4.6	Bilan	155
5	Vers un modèle quantique du transport électronique en régime de couplage fort lumière-matière	157
5.1	Introduction aux systèmes quantiques ouverts	161
5.1.1	Matrice densité	162

5.1.2	Équation maîtresse de Lindblad pour la matrice densité réduite . . .	163
5.2	Résolution de l'équation de Lindblad : l'exemple d'un unique résonateur . . .	164
5.2.1	Équations de Bloch optiques	166
5.3	Système à trois niveaux : l'exemple du QCD en couplage faible	169
5.3.1	Description du système	169
5.3.2	Étude paramétrique de l'influence des dynamiques intra-sousbandes et inter-sousbandes	176
5.4	Équation maîtresse quantique d'un QCD en régime de couplage fort	181
5.4.1	Description du système	181
5.4.2	Étude paramétrique de l'influence du couplage lumière-matière . . .	184
5.4.3	Application à des mesures de photo-réponse sous tension	187
5.5	Bilan	192
Conclusion et perspectives		194
A Courant d'obscurité dans une structure QWIP en couplage fort		196
A.1	Problématique	196
A.2	Calcul analytique du courant d'émission	197
A.2.1	Expression de G	198
A.2.2	Calcul de $G_{if}(\Delta)$	198
A.2.3	Calcul de $G_{f\nu}(\Delta)$	199
A.2.4	Calcul de $G_{i\rightarrow f\rightarrow\nu}(\Delta)$	199
B Calcul du taux de dissipation radiatif Γ_c d'un réseau d'antennes patches.		201
B.1	Champ rayonné par une antenne patch	201
B.1.1	Taux de dissipation radiatif pour une antenne patch	203
B.1.2	Réseau d'antennes patches	203
C Modèle a périodique du transport : application sur un QCD une période		205
D Mesures supplémentaires de réflectivité pour des cavités non-dopées		207
E Dispersion polaritonique		208
E.1	Diagonalisation de l'Hamiltonien et matrices de passage	208
E.2	Dissipation dans la base polaritonique	209
F Calcul de la propagation sur les spectres des erreurs des paramètres de fit		211
G Résultats supplémentaires de la procédure de fit sur les mesures de réflectivité de QCDs en couplage fort		212
H Résultats de fits en théorie des modes couplés sur les mesures de photocourant sous champ électrique		214
I Résultat de fit pour des valeurs de taux d'extraction γ_E contraintes aux calculs sur la structure de bande		217

Chapitre 1

Introduction : couplage fort lumière-matière et détecteurs inter-sousbandes

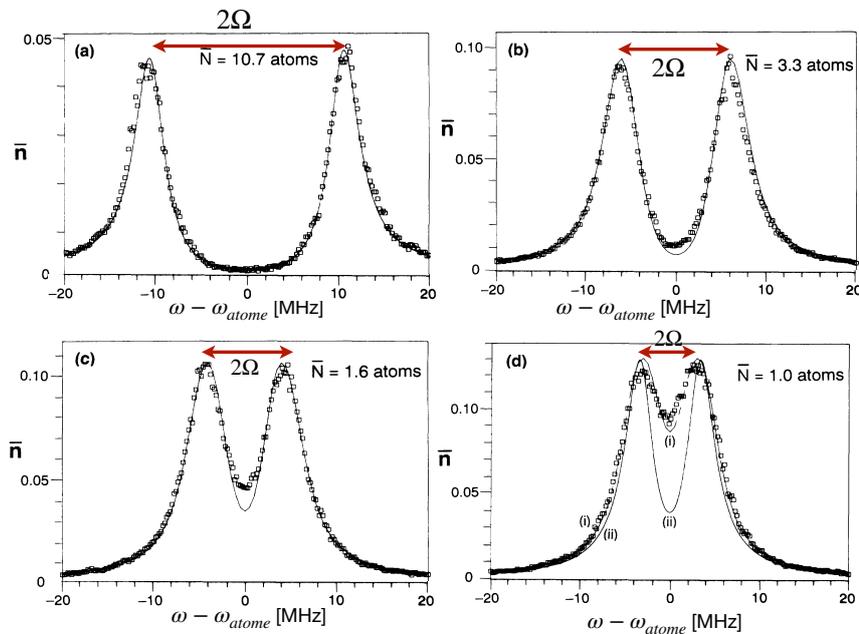


FIGURE 1.1 – Figure adaptée de [1]. Spectre de transmission d’une collection d’atomes embarqués dans une cavité optique et pompés par un laser de fréquence ω , en régime de couplage fort lumière-matière, exprimés en nombre de photons moyens détectés \bar{n} . Les différentes figures illustrent des situations expérimentales avec un nombre moyen \bar{N} d’atomes à deux niveaux embarqués dans une cavité optique.

En 1946, dans le cadre de l’étude de l’imagerie par résonance magnétique nucléaire, Purcell découvre que l’émission spontanée de photons d’un matériau peut être exaltée en embarquant ce matériau dans un système optique résonnant [2]. Cette découverte permet l’émergence de l’électrodynamique quantique de cavité (*CQED*), un nouveau champ de

recherche qui se focalise sur la conception de résonateurs photoniques pour la modification de l'interaction lumière-matière.

En 1983, Haroche et al. [3] met au point une expérience où un ensemble d'atomes de Rydberg est embarqué dans une cavité Fabry-Pérot micro-ondes. Sous le pompage optique des atomes par un laser, il met en évidence un échange *oscillatoire* de quantas d'énergie entre les atomes et les photons de cavité, qui correspond à l'émission et l'absorption successives d'un photon de cavité par l'ensemble d'atomes. Cette oscillation est qualifiée d'*oscillation de Rabi* de pulsation Ω . C'est la première observation expérimentale d'un régime de *couplage fort*, un régime où l'intensité du couplage entre la lumière et la matière Ω excède les pertes du système (ici, le taux de dissipation de photons vers l'extérieur de la cavité). De nombreuses

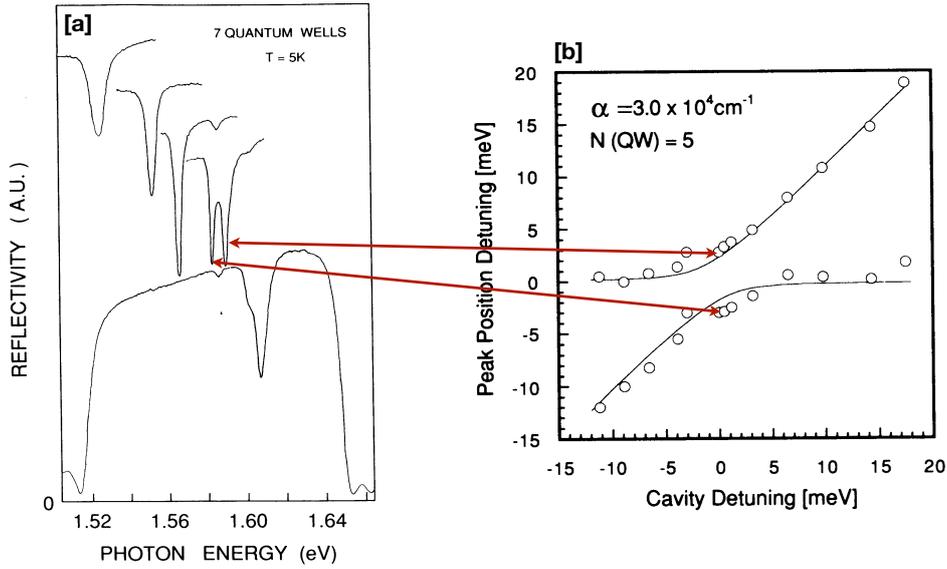


FIGURE 1.2 – Figure adaptée de [4]. [a] Spectres de réflectivité du système excitonique embarqué dans une micro-cavité : les différents spectres représentent différentes valeurs de résonance de cavité ω_c . En changeant ω_c , on accorde/désaccorde la cavité sur la résonance des excitons ω_{exciton} . À résonance $\omega_c = \omega_{\text{exciton}}$, les pics sont d'égales amplitudes. [b] Dispersion polaritonique : les minima de réflectivité sont reportés en fonction du désaccord $\omega_{\text{exciton}} - \omega_c$.

nouvelles études de systèmes en couplage fort suivront cette démonstration expérimentale. En 1992, Thompson et al. [1] examinent la réponse spectrale d'une collection d'atomes à deux niveaux embarqués dans une cavité optique. En accordant la résonance de la cavité à l'énergie de transition atomique ω_{atome} , ils observent deux nouvelles résonances, espacées d'une valeur 2Ω et localisées symétriquement de part et d'autre de la résonance atomique $\omega_{\pm} = \omega_{\text{atome}} \pm \Omega$ (cf. Figure 1.1). Cette séparation en deux pics symétriques est la signature spectrale caractéristique du régime de couplage fort.

Jusqu'à là, l'exaltation du couplage lumière-matière Ω se fait principalement par l'augmentation du nombre d'atomes N embarqués dans les résonateurs photoniques. En 1992, Weisbuch et al. [4] observent pour la première fois un couplage entre un gaz 2D d'excitations électroniques (des excitons) contenues dans un puits quantique et le mode électromagnétique d'une cavité optique (cf. Figure 1.2). L'utilisation d'un gaz 2D va notamment permettre de démultiplier le nombre d'entités interagissant avec le mode optique et donc d'augmenter

l'intensité du couplage Ω et l'exploration de nouveaux régimes de fonctionnement.

1.1 Régime de couplage-fort et états polaritoniques

Ces expériences démontrent la possibilité de concevoir des systèmes en régime de *couplage fort*, où le couplage Ω entre le mode *matière* (la transition atomique par exemple) et le mode *lumière* (le mode électromagnétique de la cavité optique) est supérieur aux pertes du système. Dans ce régime de fonctionnement, on observe l'émergence de deux nouveaux modes propres : les modes *polaritoniques*, issus de l'hybridation entre les modes "matière" et "lumière" [5] dont la signature spectrale est la présence de deux résonances symétriques espacées de 2Ω , et dont la signature temporelle est un régime d'oscillation de Rabi de fréquence Ω . La quasi-particule associée à ces modes polaritoniques est appelée *polariton*.

Pour mieux comprendre ce régime de couplage fort, nous allons étudier le système le plus simple représentant un mode "matière" résonnant : un système à deux niveaux (TLS, pour *Two Level System*), de fréquence propre ω_{TLS} , soumis à des pertes radiatives γ_{TLS} (figure 1.3-[a1]). À $t = 0$, on place une excitation dans l'état excité, et on considère deux configurations différentes :

1. **En l'absence de cavité optique** : l'excitation, uniquement soumise au taux de dissipation γ_{TLS} , se désexcite et émet un photon vers l'environnement extérieur. La probabilité de trouver l'excitation dans l'état excité décroît exponentiellement en un temps caractéristique $1/\gamma_{\text{TLS}}$ (figure [b1]). Spectralement, on observe sur le spectre d'émission une unique résonance, de largeur spectrale proportionnelle à γ_{TLS} (figure [c1]).
2. **En présence de cavité optique** : cette fois, le système à deux niveaux est embarqué dans une cavité optique résonnante de fréquence propre ω_c (on se place à la résonance $\omega_c = \omega_{\text{TLS}} = \omega_0$), soumise à des pertes radiatives γ_c (figure [a2]). On choisit ces pertes telles que $\gamma_c \gg \gamma_{\text{TLS}}$: l'objectif est d'augmenter la capacité radiative du système. Le système à deux niveaux se couple au mode électromagnétique de la cavité par l'intermédiaire du couplage Ω . On distingue deux situations :
 - **En couplage faible** ($\Omega < \gamma_c$) : l'intensité du couplage Ω est trop faible devant les pertes γ_c de la cavité pour observer des oscillations de Rabi. L'excitation se désexcite et émet un photon de cavité, qui est lui même dissipé vers l'extérieur. La probabilité de trouver une excitation (matière ou lumière) dans le système décroît exponentiellement en un temps caractéristique $\approx 1/\gamma_c$, court par rapport à celui du système [a1] non couplé à une cavité (figure [b2]). Spectralement, on observe sur le spectre d'émission une unique résonance, de largeur spectrale proportionnelle à γ_c , plus large que dans la figure [c1].
 - **En couplage fort** ($\Omega > \gamma_c$) : l'intensité du couplage Ω est forte devant les pertes γ_c de la cavité. On observe des oscillations de Rabi associées à l'émission et réabsorption successive d'un photon de cavité par le système à deux niveaux : la probabilité de l'excitation d'être dans l'état excité du système à deux niveaux (ou d'être dans l'état photonique de la cavité) est une fonction oscillante du temps, de fréquence Ω . L'enveloppe de cette fonction oscillante est amortie puisque le photon de cavité reste soumis aux pertes radiatives γ_c d'émission de photons hors de la

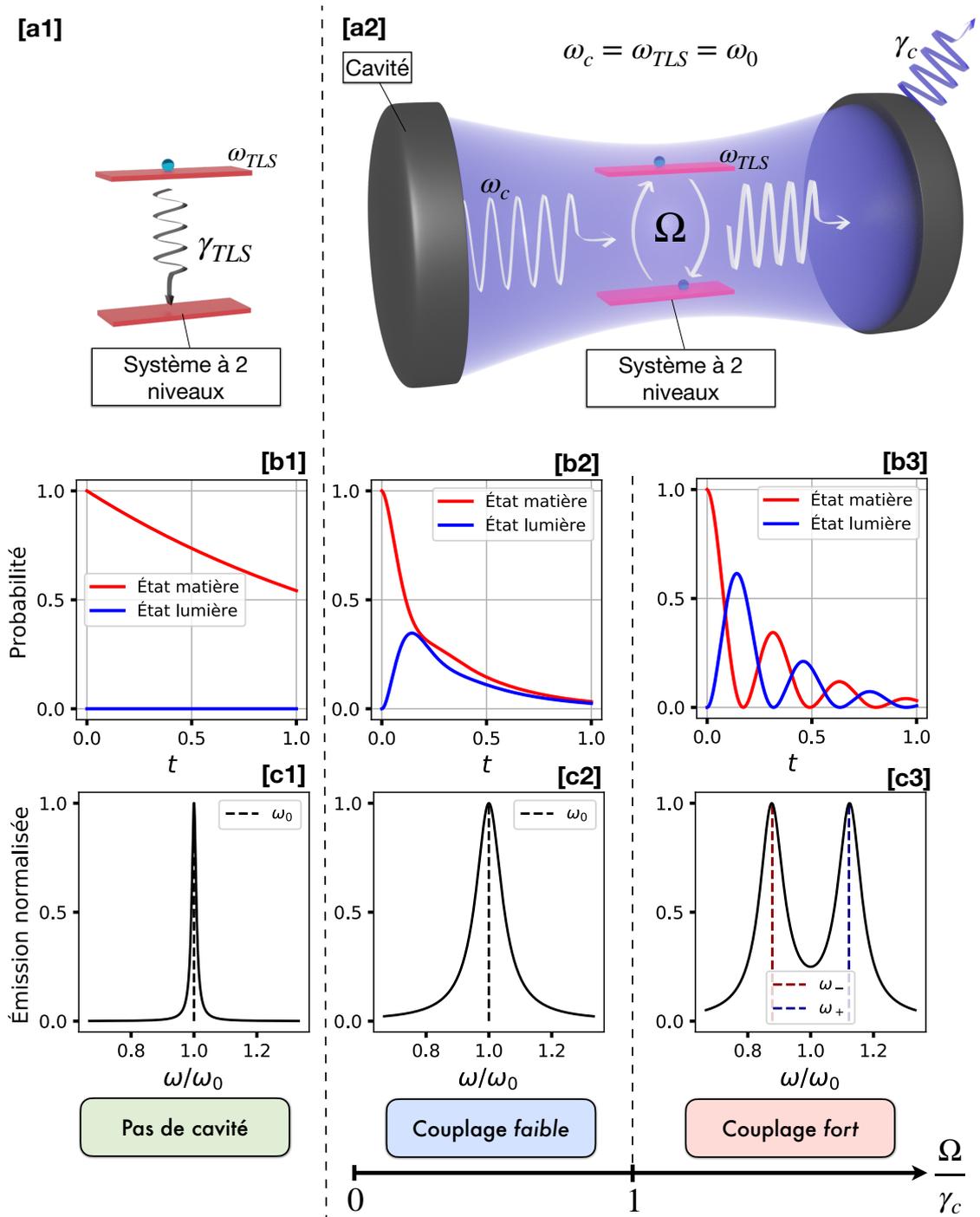


FIGURE 1.3 – [a1,a2] : représentations schématiques d’un système simple à deux niveaux en l’absence et en présence d’une cavité optique résonante. [b1,b2,b3] : Évolution temporelle de la probabilité d’une excitation d’être dans l’état “matière” (le niveau excité du TLS) ou “lumière” (l’état photonique de cavité), pour trois situations : pas de cavité, couplage faible et couplage fort. [c1,c2,c3] : Représentation normalisée du spectre d’émission, pour trois situations : pas de cavité, couplage faible et couplage fort.

cavité (figure [b3]). Spectralement, on observe cette fois deux pics de résonance, espacés de 2Ω , associés aux états polaritoniques (figure [c3]).

À noter qu’il existe un troisième régime de fonctionnement, le régime de *couplage ultra-fort* qui correspond à une situation $\frac{\Omega}{\omega_0} > 0.1$. L’intensité du couplage peut devenir suffisamment grande pour être comparable à l’énergie de résonance ω_0 des modes impliqués dans le couplage. Un système peut donc être en régime de couplage ultra-fort sans nécessairement être en couplage fort, si ce système présente de très fortes pertes (on peut avoir $\Omega/\gamma_c < 1$ et $\Omega/\omega_0 > 0.1$). Ce régime de fonctionnement est propice à des effets non-linéaires et nécessite une modélisation différente des deux premières situations. Dans ce manuscrit, nous n’aborderons que les régimes de couplage faible et fort.

De nombreux types de polaritons ont été étudiés, issus de l’hybridation de modes “matière” et “lumière” de natures différentes. La physique polaritonique est riche et diverse : on passera ici rapidement en revue les principaux types de polaritons (le lecteur peut se référer à [6] pour une revue en profondeur des différents systèmes à base de polaritons).

- Les *polaritons de micro-cavité* (ou polaritons excitoniques) sont issus de l’hybridation d’excitons et de photons de micro-cavité. La masse effective de ces polaritons est particulièrement faible, ce qui les rend propices à l’étude de phénomènes physiques particuliers, tel que la condensation de Bose-Einstein dans les semi-conducteurs [7]. Une revue des polaritons de micro-cavité est donnée dans [8].
- Les *polaritons de Landau*, issus de l’hybridation entre les transitions électroniques collectives entre des niveaux de Landau (généralisé par l’application d’un champ électromagnétique transverse sur des puits quantiques) et un résonateur photonique [9, 10].
- Des systèmes polaritoniques plus originaux reposent sur le couplage entre des atomes “artificiels”, générés par des circuits quantiques supraconducteurs, et un mode optique de résonateur LC [11], d’excitons moléculaires couplés à des photons de cavité [12], ou encore de dispositifs opto-mécaniques couplés aux modes de vibration de molécules [13].

Le record d’intensité de couplage est actuellement détenu par des systèmes à bases de cristaux de nano-particules plasmoniques [14] ($\Omega/\omega_0 \approx 1.8$).

Dans ce manuscrit, on se penchera uniquement sur l’étude des *polaritons inter-sous-bandes*, qui résultent du couplage entre l’excitation collective d’un gaz 2D d’électrons entre deux sousbandes générées par le confinement d’un puits quantique semi-conducteur et le mode transverse magnétique (TM) d’une micro-cavité optique. Nous y reviendrons en détail dans la prochaine section et dans le chapitre 4.

1.2 Polaritons inter-sousbandes

Les travaux d’Esaki [16, 17] sur les super-réseaux ont ouvert la voie à la conception de dispositifs exploitant les phénomènes quantiques de confinement, et en particulier, les dispositifs à base d’hétérostructures (voir figure 1.4-[a]), empilements de fines couches (de l’ordre de la dizaine de nanomètre) de matériaux semi-conducteurs d’énergies de gap E_G différentes, déposés par les techniques usuelles d’épitaxie de MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) et de MOCVD (*Metalorganic Chemical Vapor Deposition*).

En particulier, ces 30 dernières années ont vu l’émergence des dispositifs ISB, disposi-

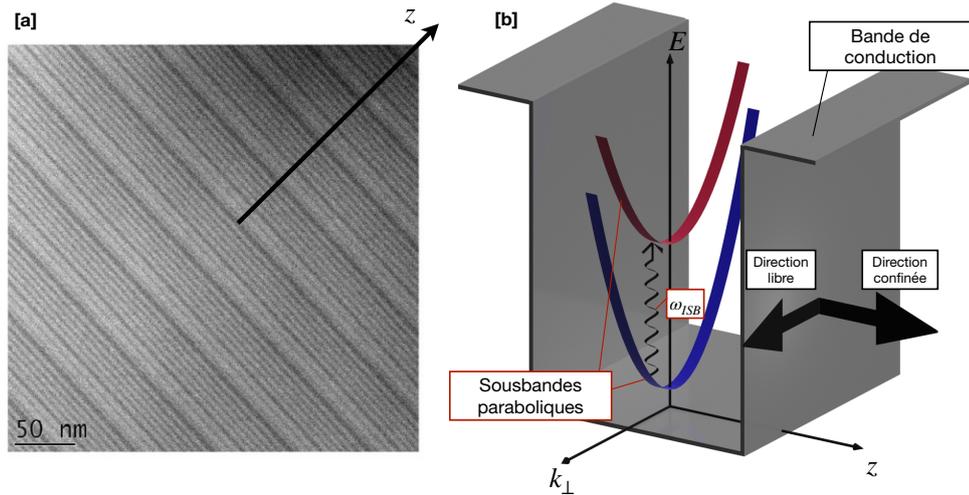


FIGURE 1.4 – [a] Image par microscopie à transmission d’électrons (TEM) d’un laser à cascade quantique AlGaAs/GaAs, tirée de [15]. [b] Représentation schématique d’un puits de potentiel dans la bande de conduction d’une hétérostructure et des sousbandes générées par le confinement unidimensionnel. La figure présente une superposition des espaces réel et réciproque.

tifs qui exploitent des transitions électroniques entre des niveaux confinés dans la bande de conduction (cf. figure 1.4-[b]) : en alternant périodiquement des couches 2D de matériaux différents, il est possible de créer des puits de potentiel au sein de la bande de conduction du dispositif. Le confinement unidimensionnel (selon l’axe de croissance z), associé au libre mouvement des électrons dans le plan perpendiculaire à l’axe z , génère la création de sous-bandes quasi-paraboliques d’états électroniques. Ce sont les transitions entre ces sous-bandes, les transitions *inter-sousbandes*, qui vont permettre de réaliser des processus d’absorption et d’émission de photons. Par ailleurs, l’espacement entre ces sous-bandes est déterminé par la largeur et la nature des matériaux utilisés et permet la couverture de larges plages de longueur d’onde.

La première observation de polaritons inter-sousbandes (polaritons ISB) remonte à 2003 [18]. Dans cette publication, Dini et al. démontrent expérimentalement qu’il est possible de coupler fortement la transition électronique collective du gaz 2D d’électrons contenus dans les puits quantiques à un mode TM de la cavité formée par les couches de semi-conducteur. En changeant l’angle d’incidence θ de la lumière d’excitation, ils modifient continûment la valeur de résonance du mode TM et scannent la dispersion de modes polaritoniques (cf. figure 1.5).

Depuis, de nombreuses démonstrations ont suivi, à l’aide de différentes géométries optiques et systèmes ISB : détecteurs infrarouge à puits quantiques (QWIPs), lasers et détecteurs à cascades quantiques (QCLs et QCDs) [19, 20, 21]. Le fonctionnement en régime de couplage ultra-fort, initialement prédit dans [22], est démontré pour la première fois dans [23] (et s’en suit d’autres études [24, 25, 26]). Les auteurs de [27] exportent également le concept de couplage critique, de parfaite injection de puissance optique, dans les dispositifs ISB en couplage fort. Le record de couplage $\Omega/\omega_0 = 0.45$ pour les dispositifs à base de polaritons

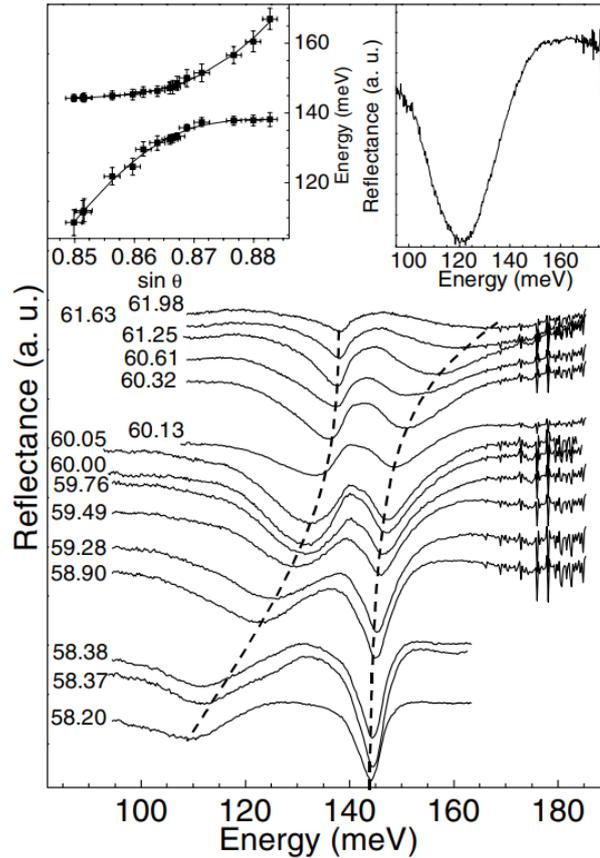


FIGURE 1.5 – Figure tirée de [18]. Des spectres de réflectivité sont superposés pour différentes valeurs d’angles d’incidence θ de la lumière d’excitation. Les spectres présentent tous deux pics de résonance, signature d’un régime de couplage fort et des modes polaritoniques. L’encadré haut/gauche représente la dispersion de ces modes polaritoniques, tracée via le report des minima des pics de réflectivité selon θ . L’encadré haut/droite représente un spectre de réflectivité avec un éclairage polarisé TE (transverse électrique). Dans ce cas, seule la résonance du mode de cavité est discernable.

ISB est actuellement détenu par [28].

Ces développements récents sur les polaritons ISB apportent un degré de liberté supplémentaire lors de la conception et l’optimisation des dispositifs ISB. La nature bosonique des modes polaritoniques et les forts couplages de Rabi Ω apparaissent comme des propriétés intéressantes à mettre au profit des performances des dispositifs actuels, voir même pour la conception de nouveaux systèmes. L’étude du régime de couplage fort dans les systèmes ISB est donc un problème non seulement d’une grande richesse fondamentale, mais aussi une source d’enjeux industriels. En particulier, nous verrons dans la suite comment un verrou fondamental limite le déploiement applicatif de systèmes ISB en régime couplage fort : l’injection électrique, depuis un réservoir électronique, des états polaritoniques.

1.3 Injection électrique dans les états polaritoniques ISB

Les dispositifs ISB émetteurs (LEDs, lasers) sont soumis à une faible efficacité quantique radiative : les temps de vie associés aux processus d'émission radiatifs sont bien plus longs (de l'ordre 10 à 100 ns) par rapport aux processus de désexcitations non-radiatifs (de l'ordre de la ps). L'exploitation des propriétés polaritoniques en régime de couplage fort est une piste d'amélioration des performances radiatives des systèmes émetteurs ISB [29, 30]. En 2009, De Liberato et Ciuti [31] énoncent la possibilité de concevoir des dispositifs reposant sur l'émission stimulée de polaritons ISB, entre les deux branches polaritoniques, via l'émission de phonons LO. De tels dispositifs permettraient d'obtenir des seuils lasers extrêmement faibles et sans inversion de population.

Bien que des démonstrations de dispositifs émetteurs fonctionnant dans le régime de couplage fort existent [32, 20], *l'injection électrique efficace* de ces dispositifs est un défi majeur et irrésolu, qui manque à ce jour de démonstrations expérimentales convaincantes. La raison fondamentale de cette impossibilité expérimentale réside dans la nature du couplage tunnel entre un réservoir électronique (par exemple la cascade d'un QCL) et des états polaritoniques : il apparaît que la majorité des électrons injectés se redirigent (par effet tunnel) dans les *états noirs*, incapables de se coupler avec la lumière, plutôt que dans les états polaritoniques [33]. Les états noirs sont des états électroniques, aveugles à toute interaction avec le mode électromagnétique de cavité. Nous verrons dans le chapitre 4 leur origine physique plus en détail. L'efficacité du dispositif s'en trouve considérablement détériorée. Par ailleurs, il est compliqué d'extraire des informations sur la nature du transport et les mécanismes d'injection : les états noirs étant incapables de se coupler à la lumière, ils sont invisibles sur les spectres d'électroluminescence mesurés. Dans [34], une stratégie pour s'affranchir du couplage tunnel avec les états noirs est discutée : en exploitant le couplage *multi-sousbande* avec un mode de cavité, on pourrait significativement espacer les modes polaritoniques des états noirs, et pratiquer une injection électrique plus discriminante.

Cette problématique constitue un obstacle fondamental qui rend impossible le développement et l'exploitation des dispositifs ISB émetteurs à base de polaritons. Pour combler le besoin important d'informations expérimentales sur la nature du transport dans ces dispositifs, une idée s'est récemment imposée : étudier le phénomène inverse, à savoir *l'extraction* depuis les états polaritoniques vers un réservoir électronique, c'est-à-dire étudier le phénomène de *détection*. Dans la partie suivante, nous allons donc présenter différents détecteurs ISB, qui sont des plateformes adaptées à l'étude du transport polaritonique.

1.4 Détecteurs inter-sousbandes

Dans le domaine applicatif de la détection infrarouge, les diodes *interbandes* InSb [35], InGaAs [36] et HgCdTe [37] ainsi que les super-réseaux de type II (InGaSb/InAs) [38] dominent le marché industriel. Les détecteurs inter-sousbandes, représentés par le détecteur à puits quantiques (QWIP : *Quantum Well Infrared Photodetector*) et le détecteur à cascade quantique (QCD : *Quantum Cascade Detector*), trouvent cependant des applications dans la spectroscopie, la thermographie et les télécommunications en espace libre (une revue du

partage de marché des différentes technologies peut être trouvée dans [39]). Ces détecteurs reposent sur trois piliers majeurs [40] :

1. **leur fonctionnement unipolaire** : les mécanismes d'absorption et de transport n'impliquent que la bande de conduction et le mouvement des *électrons*. Les énergies caractéristiques E_{SRH} d'activation de bruit liées aux défauts de mi-gap (mécanismes de type Shockley-Read-Hall), traditionnellement dominants dans les dispositifs inter-bandes, sont par conséquent très supérieures aux énergies de détection de photon $E_{\text{détection}}$, déterminées par les espacements de sousbandes dans la bande de conduction. C'est la force principale de ces dispositifs : ils ne nécessitent pas d'étapes technologiques de passivation pour s'affranchir des effets de surfaces qui parasitent généralement les détecteurs inter-bandes.
2. **le faible temps de vie des porteurs**, principalement dominé par la diffusion assistée par les phonons LO. La dispersion parabolique des sousbandes permet d'exploiter ce mécanisme de recombinaison, de temps caractéristique de l'ordre de la pico-seconde : les dispositifs ISB sont intrinsèquement rapides, avec des fréquences de coupures atteignant théoriquement la centaine de GHz.
3. **la règle de sélection ISB**. Ces dispositifs ISB sont contraints par une règle de sélection [41] qui impose que seule la composante TM (orientée selon l'axe de croissance z) de la lumière d'excitation incidente peut générer des processus d'absorption entre les sousbandes. C'est la faiblesse principale de ces dispositifs, qui dans les environnements électromagnétiques les plus simples, présentent donc de faibles efficacités d'absorption.

1.4.1 Détecteur infrarouge à puits quantiques (QWIP)

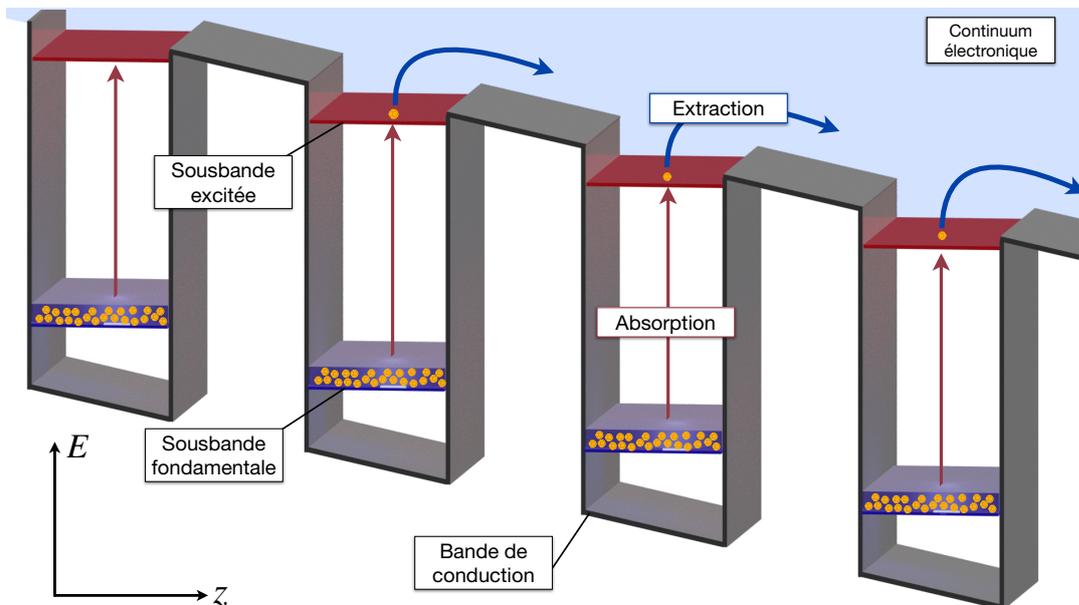


FIGURE 1.6 – Représentation schématique d'un détecteur infrarouge à puits quantiques QWIP. La dispersion des sousbandes électroniques n'est pas représentée.

Un QWIP [42], dont la première conception remonte à 1993 [43], est formé d’une répétition périodique de deux matériaux, l’un responsable de “puits” de potentiel, et l’autre de “barrières” (cf. figure 1.6). Les couples de matériaux (puits/barrières) les plus utilisés sont InGaAs/-GaAs, InGaAs/AlInAs, InAsSb/InSb, dont la stœchiométrie des différents alliages utilisés détermine la hauteur des barrières de potentiel. Les puits sont généralement dopés par des impuretés donneuses n (Si), et les électrons issus de la ionisation de ces impuretés sont contenus dans la sousbande fondamentale des puits quantiques. Il est possible de promouvoir un électron situé dans la sousbande fondamentale des puits vers la sousbande excitée, par l’absorption d’un photon incident. Cette sousbande excitée est placée en résonance avec le haut de la barrière de potentiel : sous application d’une tension aux bornes du dispositif, un photo-électron promu dans cette sousbande va pouvoir être extrait dans le continuum d’états électroniques qui surplombe les puits quantiques, et générer un photo-courant. Ce courant se superpose au courant d’obscurité, principalement dominé par l’activation thermique des porteurs de la sousbande fondamentale à haute température, et les effets tunnels inter-puits à basse température [44].

1.4.2 Détecteur infrarouge à cascade quantique (QCD)

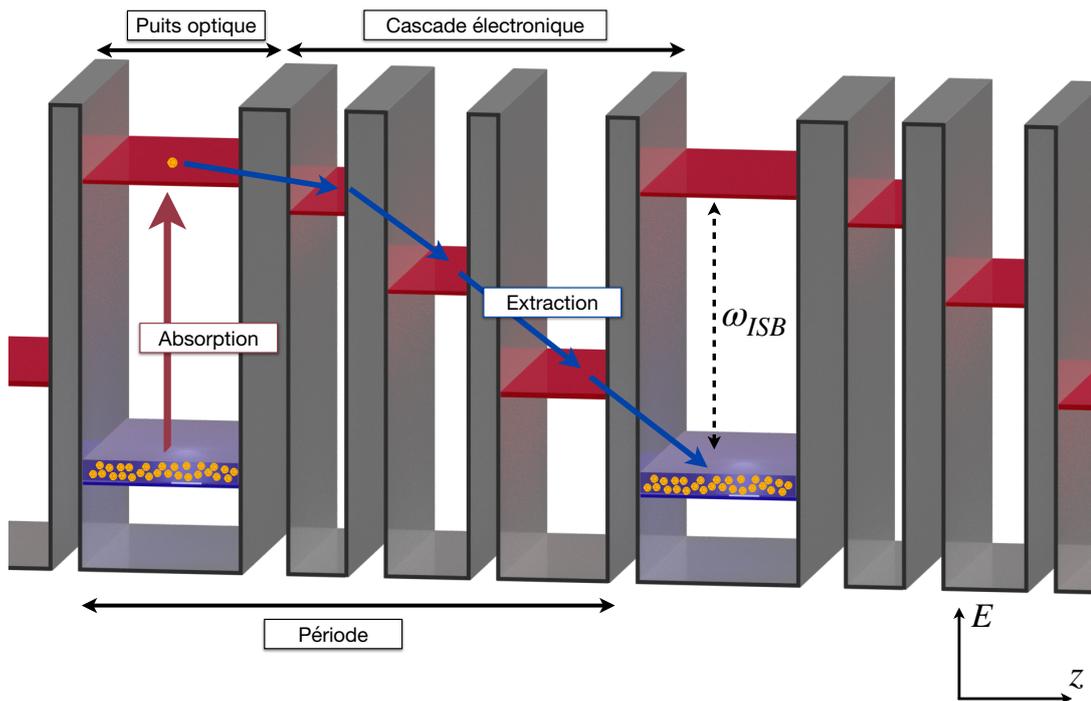


FIGURE 1.7 – Représentation schématique d’un détecteur à cascade quantique. La dispersion des sousbandes électroniques n’est pas représentée.

Le détecteur à cascade quantique (QCD, cf. figure 1.7) est l’extension aux processus de détection du laser à cascade quantique (QCL) [45] : la première démonstration expérimentale d’extraction de photo-courant s’est faite par l’utilisation d’une structure de bande initialement conçue pour l’émission de lumière [46]. La première conception d’une structure ISB entièrement dédiée à la détection remonte à 2004 [47] dans les laboratoires de Thales. La

structure d'une période de QCD se décompose en un puits quantique où s'effectue les processus d'absorption de photon (dopés n par des impuretés donneuses, Si), et d'une cascade de niveaux électroniques. Cette forme asymétrique d'une période de QCD permet l'extraction de photo-courant en l'absence de tension : une fois promu dans la sousbande excitée du puits optique, un photo-électron est extrait via les niveaux de la cascade électronique par une combinaison de mécanismes tunnel résonnant et de diffusions assistées par l'absorption et l'émission de phonons LO. C'est ce transport d'une charge d'une période à une autre qui est responsable de la génération d'un courant électrique mesurable. Nous verrons en détail la modélisation du transport et des mécanismes d'absorption dans le chapitre 2. Pour une revue détaillée sur le QCD, voir [40].

1.4.3 Figures de mérite et état de l'art

Les détecteurs QWIPs et QCDs sont qualifiés par les mêmes figures de mérite :

- **Le rendement quantique externe** η_{ext} , qui se décompose en deux contributions :
 - **L'efficacité d'absorption** η_{abs} , qui quantifie la proportion de photons incidents qui sont effectivement absorbés dans la transition ISB des puits optiques. Cette efficacité d'absorption est dépendante de l'environnement électromagnétique qui englobe la structure active d'un détecteur ISB. Nous verrons notamment dans le chapitre 3 comment des micro-cavités optiques permettent de redresser la polarisation quelconque d'une onde incidente en une polarisation TM et ainsi exalter η_{abs} .
 - **L'efficacité interne** η_{int} , qui quantifie la proportion de photo-électrons promus par l'absorption d'un photon dans la transition ISB qui participent effectivement à la génération de photo-courant : depuis la sousbande excitée, un photo-électron est soit extrait, soit re-dissipé vers une sousbande fondamentale, sans participer à la génération de courant.

$\eta_{\text{ext}} = \eta_{\text{abs}}\eta_{\text{int}}$ quantifie donc la proportion de puissance optique incidente qui est effectivement convertie en puissance électrique mesurable. L'efficacité quantique externe est l'expression adimensionnelle de la **réponse** \mathcal{R} , qui s'exprime en $A.W^{-1}$:

$$\eta_{\text{ext}} = \frac{\hbar\omega}{e}\mathcal{R} \quad (1.1)$$

- **La densité spectrale de bruit** S , en $(A.\sqrt{\text{Hz}}^{-1})$, qui quantifie les fluctuations de signal liées aux mécanismes de bruit (thermiques mais aussi optiques) dans les détecteurs. Un signal de grande intensité noyé dans des fluctuations importantes de bruit ne sera pas exploitable.
- **La détectivité spécifique** \mathcal{D}^* en Jones ($\text{cm}.\sqrt{\text{Hz}}.W^{-1}$), est la figure de mérite qui permet d'intégrer ces considérations sous la forme du rapport signal (\mathcal{R}) à bruit (S), indépendamment de la géométrie du détecteur :

$$\mathcal{D}^* = \frac{\mathcal{R}}{S}\sqrt{A} \quad (1.2)$$

où A représente la surface électrique du détecteur.

- **La fréquence de coupure à -3 dB** $f_{-3\text{dB}}$ qui établit la fréquence de modulation seuil à partir de laquelle la puissance en sortie du détecteur est divisée par deux.

Dans les dispositifs ISB, intrinsèquement rapides grâce aux mécanismes de diffusion LO, elle sera principalement limitée par le circuit électrique permettant la mesure.

- **La température BLIP** (*background limited infrared photodetector*) T^{BLIP} . Elle correspond à la température à partir de laquelle les mécanismes d'obscurité prennent le pas sur les mécanismes optiques et dominant le bruit sous éclairage par un corps noir à 300K. C'est une température représentative de la température de fonctionnement du système de détection.

La flexibilité de conception associée aux détecteurs ISB se convertit en une large gamme de longueur d'onde exploitable, du faible infrarouge SWIR [48, 49] jusqu'aux fréquences THz [50, 51]. On trouve de nombreuses démonstrations de détecteurs ISB qui mettent à profit la rapidité des mécanismes de diffusion par phonons LO, pour des fréquences $f_{-3\text{dB}}$ de l'ordre de la trentaine de GHz pour le QWIP [52] et le QCD [53, 54, 55].

Les QWIPs et les QCDs sont des détecteurs de structures relativement similaires et donc de performances comparables. Le QWIP bénéficie cependant d'une maturité technologique qui découle de son développement préalable au QCD et du développement de la filière GaAs. De ce fait, il domine le marché industriel de la détection infrarouge inter-sousbande. Le QCD bénéficie bien de qualités qui lui sont propres et qui proviennent essentiellement de la liberté de conception donnée par la nature de son schéma d'extraction : la conception de QCLDs, dispositifs intégrant à la fois une capacité de détection et d'émission [56, 57] ouvre par exemple la voie à l'élaboration de circuits photoniques intégrés (*PIC*). Malgré ces avantages et de bonnes performances [58], il existe une nécessité de créer un différenciateur technologique en faveur du QCD pour lui donner une place de concurrent viable du QWIP.

1.5 Détecteurs ISB pour le régime de couplage fort

Avec le développement de la nanophotonique, *i.e.* la conception de résonateurs photoniques de taille nanométrique, les détecteurs ISB ont bénéficié d'améliorations importantes de performances. En embarquant les détecteurs ISB dans ces dispositifs optiques résonnants, l'injection de puissance optique ne se fait plus directement dans la transition ISB : c'est le mode électromagnétique du résonateur optique qui est optiquement pompé, et qui, couplé à la transition ISB, lui ré-injecte de la puissance. De nombreuses géométries optiques existent : réseaux plasmoniques [59], résonateurs à base de métamatériaux [60], réseaux d'antennes patchs [55, 49, 61, 62]. Ces derniers permettent notamment de redresser la polarisation de la lumière incidente et donc *de contourner la règle de transition ISB* : la puissance optique est pompée dans le mode TM de la cavité patch dont la polarisation est intégralement alignée selon l'axe de croissance z . L'efficacité d'absorption η_{abs} s'en trouve nécessairement décuplée. Nous reviendrons plus en détail sur ces cavités optiques dans le chapitre 3.

L'utilisation de ces cavités optiques est également responsable de l'émergence du régime de couplage fort dans les dispositifs ISB et de l'observation de polaritons ISB. Il apparaît que l'intensité du couplage Ω entre le mode TM de cavité et le mode plasmonique ISB est une fonction du nombre d'électrons présents dans la sousbande fondamentale [22] et donc mécaniquement du dopage surfacique $n_{2\text{D}}$ injecté dans les puits quantiques par les impuretés donneuses Si :

$$\boxed{\Omega \propto \sqrt{n_{2\text{D}}}} \quad (1.3)$$

Dans la suite, nous allons voir comment les détecteurs QWIPs et QCDs permettent d'apporter des réponses aux problématiques de transport en régime de couplage fort abordées dans la section 1.3.

1.5.1 QWIP et extraction depuis les états polaritoniques

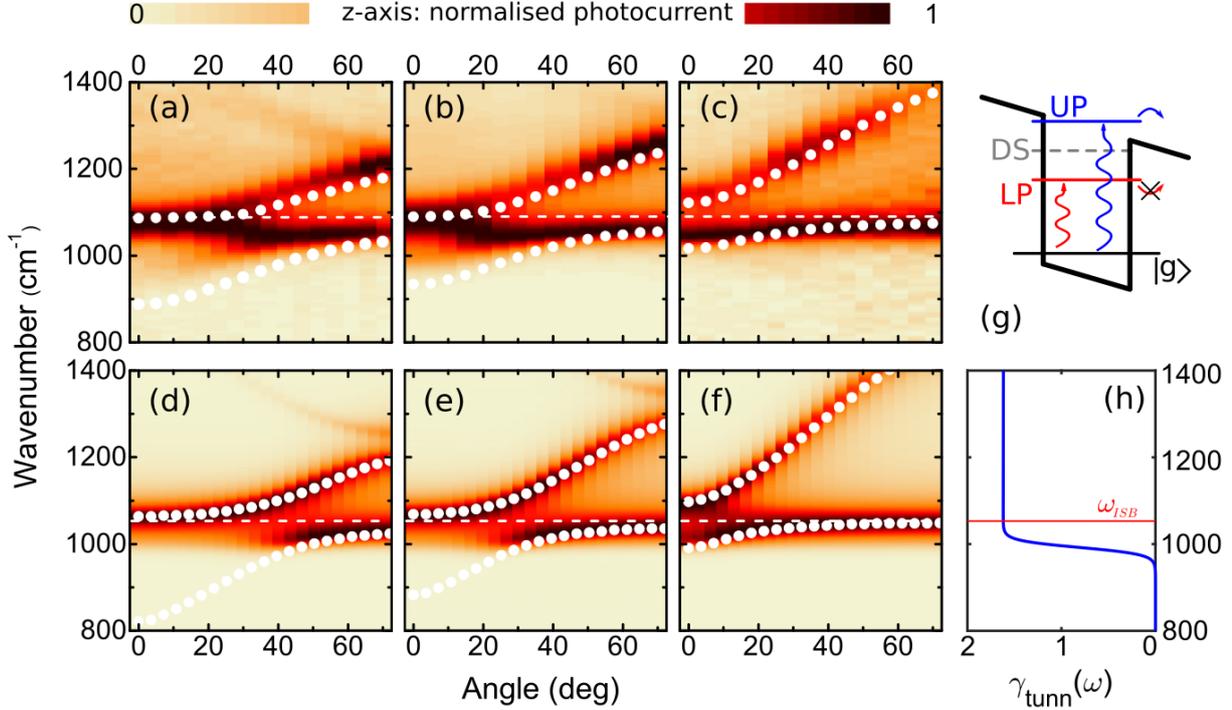


FIGURE 1.8 – Figure issue de [63]. **(a)-(c)** : spectres *expérimentaux* de photo-courants de QWIPs en régime de couplage fort ($n_{2D} \approx 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), en fonction du nombre d'onde (ordonnée) et de l'angle d'incidence de l'excitation (abscisse). L'utilisation d'une structure optique basée sur des rubans assemblés en réseau de diffraction permet d'ajuster la résonance du mode électromagnétique ω_c avec l'angle d'incidence, et donc de scanner continûment la dispersion polaritonique. Les mesures sont réalisées à 78 K, entre 0° et 70° , pour des périodes de réseau différentes entre (a), (b) et (c). Les cercles blancs correspondent à une dispersion polaritonique calculée à partir d'un code numérique en RCWA. Cette dispersion suit précisément le maximum du spectre de photo-courant. **(c)-(f)** : spectres *calculés* de photo-courant, à partir d'un modèle phénoménologique basé sur la théorie des modes couplés. Le modèle repose en particulier sur une fonction de transfert $\gamma(\omega)$ entre les états polaritoniques et le continuum électronique, représentée sur le graphique **(h)**, et dont les effets sont illustrés sur le schéma **(g)** d'alignement de niveaux : toute tentative d'extraction depuis l'état polaritonique bas (LP) est rendue impossible par la barrière entre l'état LP et le continuum. C'est effectivement ce qui est observé sur les spectres (a)-(c) : en deçà de ω_{ISB} , représenté par une ligne pointillée, le signal de photo-courant associé à la branche ω_- (LP) disparaît complètement.

Pour contourner le problème de l'injection électrique décrit dans la section 1.3, et obtenir des informations sur la nature du transport entre les états polaritoniques et un réservoir

électronique, Vigneron et al. [63] ont adopté la stratégie d'étudier le phénomène inverse : l'*extraction* d'un courant électrique depuis un réservoir polaritonique, i.e. un processus de *détection*. À l'aide de photo-détecteurs QWIPs, ils mettent en évidence un signal de photocourant imputable à l'extraction d'excitations polaritoniques dans le continuum électronique. En particulier, un modèle empirique du transport est proposé, basé sur une fonction de transfert $\gamma(\omega)$ phénoménologique, dépendante de la fréquence ω de l'onde d'excitation incidente. Les résultats principaux de ces travaux sont présentés dans la figure 1.8.

Ces travaux constituent une étape importante dans la compréhension du transport ISB en régime de couplage fort : si les échelles d'énergie polaritoniques ω_{\pm} sont clairement définies, et que de nombreuses observations valident l'existence de cet écartement, la question de l'alignement relatif des niveaux se pose : les états polaritoniques se séparent-ils autour de l'état excité du puits optique ? Cette question est particulièrement légitime puisque l'alignement relatif des états polaritoniques avec les états électroniques de la cascade est une condition nécessaire pour l'extraction d'un photo-courant (ou l'injection électrique dans un état polaritonique). En montrant que seule la branche polaritonique haute (ω_+) est présente sur les spectres de photo-courant (cf. figure 1.8-(d),(e),(f)) (l'autre branche ω_- , considérablement enfoncée dans le puits, est incapable d'extraire des polaritons dans le continuum électronique), les auteurs de [63] valident l'alignement polaritonique décrit dans la figure 1.8-(g).

Les résultats de modélisation sont en revanche moins convaincants : l'accord entre les résultats expérimentaux et simulés n'est pas quantitatif. En particulier, l'absorption générée autour de la transition ISB (figures 1.8-(a) (b) et (c)) n'est pas reproduite par le modèle RCWA utilisé. Enfin, la fonction de transfert $\gamma(\omega)$ utilisée pour décrire le lien spectral entre absorption et photo-courant est introduite de manière phénoménologique.

Si les résultats obtenus apportent d'importantes informations, le QWIP ne constitue pas la plateforme idéale pour la modélisation du transport en régime de couplage fort : concilier la nature 2D des électrons confinés dans les puits quantiques avec la nature 3D de l'extraction dans le continuum électronique est une difficulté de modélisation qui se superpose aux difficultés engendrées par le régime de couplage fort.

1.5.2 QCD et extraction résonnante d'excitations polaritoniques

La validation de l'alignement relatif des états polaritoniques ouvre la voie à l'étude du transport électronique dans les QCDs en régime de couplage fort. La structure de bande complexe du QCD et ses degrés de liberté de conception vont nous permettre d'étudier activement la nature du transport dans les dispositifs ISB à base de polariton. Par ailleurs, la nature du transport dans le QCD est restreinte à une modélisation bidimensionnelle, mieux établie et maîtrisée que celle du QWIP. Le QCD est un terrain de jeu propice à l'étude du régime de couplage fort.

La figure 1.9 représente schématiquement [a] un QCD en couplage faible [b] et son équivalent en couplage fort, où apparaissent les deux états polaritoniques de part et d'autre de la sousbande excitée. En accordant la source d'excitation incidente sur la résonance $\omega = \omega_-$, on pompe l'état polaritonique bas. L'objectif est ensuite d'étudier le mécanisme d'extraction qui suivra ce pompage : est-il possible de réaliser une extraction résonnante

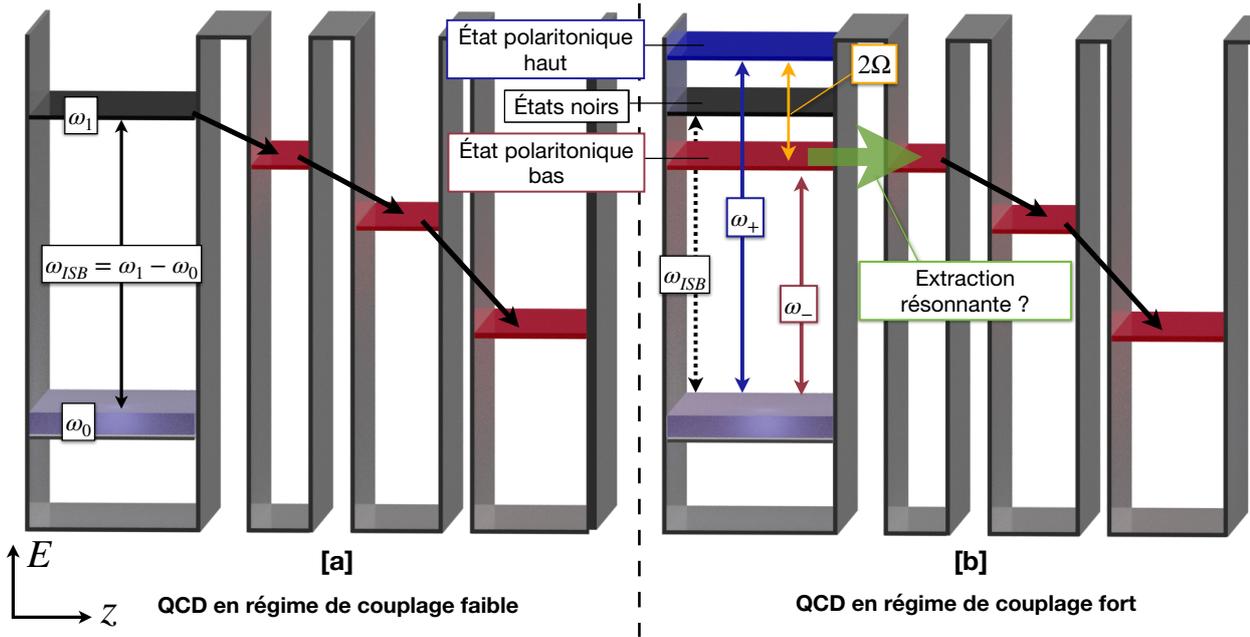


FIGURE 1.9 – Représentation schématique d’un QCD [a] en régime de couplage faible [b] en régime de couplage fort.

d’un état polaritonique, vers la cascade électronique? Quel rôle jouent les états noirs dans ce processus d’extraction (alors qu’on les sait responsables des problématiques d’injection)? De manière générale, nous étudierons donc comment le régime de couplage fort affecte la nature du transport électronique dans les dispositifs ISB.

Une problématique de ce travail de recherche est donc de caractériser et de modéliser des QCDs en régime de couplage fort dans l’objectif d’élucider la nature du transport dans de tels dispositifs. En particulier, nous chercherons à déterminer la fonction de transfert $TF(\omega)$, qui relie l’absorption optique \mathcal{A} à la réponse photo-électrique du dispositif \mathcal{R} . C’est en analysant cette fonction de transfert et sa distribution spectrale en fonction de la fréquence incidente ω que nous clarifierons le schéma d’extraction. Cette problématique sera traitée dans les chapitres 4 et 5 de ce manuscrit.

1.5.3 Gain de performance pour les détecteurs ISB en régime de couplage fort

L’énergie d’activation E_A est l’énergie qu’il est nécessaire à fournir aux électrons de la sousbande fondamentale pour les promouvoir dans la sousbande excitée, où ils participeront au courant d’obscurité. Ce courant d’obscurité suit une loi d’Arrhénius : une augmentation de l’énergie d’activation permet la diminution du courant et du bruit d’obscurité. En première approximation, E_A s’écrit à partir de la différence entre la position du niveau de Fermi μ_F (qui dépend du dopage n_{2D} introduit dans les puits optiques) et de la sousbande excitée¹. En prenant comme référence d’énergie la sousbande fondamentale, on a donc :

$$E_A = \omega_{ISB} - \mu_F \quad (1.4)$$

1. Nous reprendrons plus en détail la notion d’énergie d’activation dans le chapitre 2.

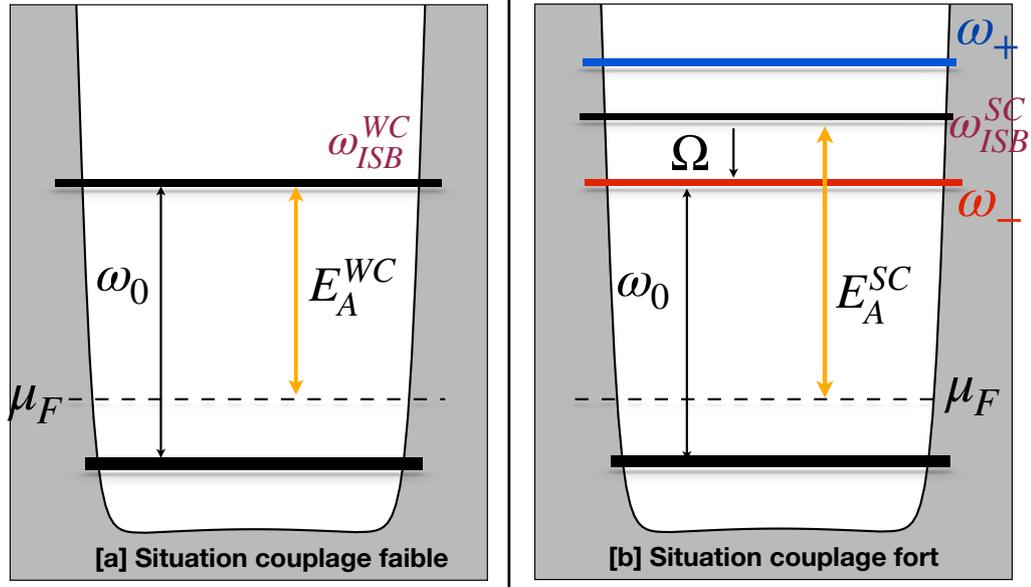


FIGURE 1.10 – Représentation schématique des niveaux d'énergie dans une situation [a] de couplage faible [b] de couplage fort.

L'énergie d'activation des porteurs est donc linéairement liée à l'énergie de la transition ISB. Autrement dit, *il est impossible de désintriquer l'énergie d'activation thermique responsable du bruit de l'énergie optique de détection* : $E_A \propto \omega_{ISB} = \omega_0$.

En régime de couplage fort, cette séparation apparaît possible. On s'appuie sur la figure 1.10, qui compare les deux situations de couplage [a] faible et [b] fort, pour une même situation de dopage (même position des niveaux de Fermi μ_F), avec pour longueur d'onde ciblée λ_0 (ω_0 en énergie) :

- **Situation couplage faible [a]** : Le QCD est embarqué dans une géométrie optique qui ne donne pas lieu à une interaction résonnante avec un mode optique confiné (par exemple, on éclaire le QCD par la tranche). On utilise des puits quantiques optiques d'une taille L_{WC}^2 qui engendrent une transition $\omega_{ISB}^{WC} = \omega_0$, accordée sur la longueur d'onde optique ciblée. Comme discutée précédemment, cette transition ω_{ISB} détermine également l'énergie d'activation E_A^{WC} (Eq.(1.4)).
- **Situation couplage fort [b]** : Cette fois, le QCD étant embarqué dans une cavité optique résonnante, le couplage entre le mode optique et le mode de transition ISB fait apparaître les modes polaritoniques ω_{\pm} . L'idée est alors d'utiliser le mode polaritonique bas pour effectuer l'absorption optique. On ajuste donc les dimensions des puits optiques pour accorder la résonance optique :

$$\omega_- = \omega_0 \quad (1.5)$$

Un tel ajustement nécessite des puits quantiques optiques d'une taille $L_{SC} < L_{WC}$ qui engendrent donc une transition $\omega_{ISB}^{SC} > \omega_{ISB}^{WC} = \omega_0$, désaccordée par rapport à la longueur d'onde optique ciblée, mais qui détermine l'énergie d'activation E_A^{SC} .

2. WC : *weak coupling*, SC : *strong coupling*

Le gain de la situation de couplage fort par rapport à celle de couplage faible est simple : si les deux dispositifs détectent bien à la même longueur d'onde ω_0 (l'un via la transition ISB, l'autre via l'état polaritonique bas), *l'énergie d'activation dans le dispositif en couplage fort est plus élevée d'un facteur Ω* :

$$\boxed{E_A^{\text{SC}} - E_A^{\text{WC}} = \omega_{\text{ISB}}^{\text{SC}} - \omega_{\text{ISB}}^{\text{WC}} = \Omega} \quad (1.6)$$

Ces considérations primaires semblent donc anticiper une diminution du courant et du bruit d'obscurité pour une situation de couplage fort, par rapport à une situation équivalente de couplage faible (même dopage, même longueur d'onde). Une telle diminution de l'énergie d'activation se traduirait en une augmentation de la température BLIP T^{BLIP} . Nous aurons l'occasion de revenir sur cette problématique dans le chapitre 4.

À noter que cette amélioration de performance n'est envisageable que pour le QCD : les travaux sur les QWIPs présentés dans la section 1.5.1 mettent en avant l'impossibilité d'exploiter le gain sur l'énergie d'activation décrit par l'équation (1.6). En effet, pour les structures QWIPs, il est démontré qu'il est impossible d'extraire du photo-courant depuis l'état polaritonique bas ω_- , ce dernier étant enfoncé dans le puits de potentiel. L'idée symétrique, où l'on exploiterait l'état polaritonique haut ω_+ pour la détection, est discutée en Annexe [A]. Il y est démontré que l'abaissement du niveau haut de la transition ISB dans le puits quantique favorise le courant d'obscurité et détériore les performances du dispositif. Le QWIP apparaît donc comme une architecture inadaptée à un régime de couplage fort, les différents schémas d'extraction étant défavorables pour ses performances.

1.6 Bilan

Le QCD s'impose donc comme une plateforme idéale pour étudier la nature du transport dans des systèmes polaritoniques : la liberté dont on dispose pour la conception des structures de bande de QCD va nous permettre d'étudier les gains de performances décrits dans la section précédente, mais également de sonder la nature du transport ISB en régime de couplage fort et l'extraction résonnante des états polaritoniques.

Cependant, avant d'envisager l'étude de ces QCDs en couplage fort, nous devons étudier extensivement le comportement et la modélisation de QCDs en régime de couplage faible (chapitre 2 et 3), dans le but de développer un savoir-faire et une compréhension intuitive du transport que nous pourrions réinvestir dans l'étude du transport électronique en couplage fort (chapitre 4 et 5).

Chapitre 2

Transport électronique dans les détecteurs à cascade quantique en régime de couplage faible lumière-matière

Dans ce chapitre, nous abordons la modélisation des dispositifs inter-sousbandes, et tout particulièrement, la modélisation de détecteurs à cascade quantique (QCD, Figure 2.1-[a]). L'objectif est d'introduire le formalisme théorique qui va nous permettre, à partir d'un empilement d'hétérostructure donné, de modéliser et de calculer le fonctionnement de ce dispositif.

Dans un premier temps, nous construirons progressivement le modèle, de l'expression de l'Hamiltonien du cristal parfait, jusqu'aux équations de bilans de population des différentes sousbandes électroniques des puits quantiques. Cette construction progressive s'accompagnera de différentes hypothèses (fonction enveloppe, sousbandes thermalisées), que nous prendrons soin de justifier. Une fois le modèle posé, nous pourrons l'appliquer au calcul des différentes grandeurs physiques *mesurables* de nos QCDs, à savoir l'absorption, le courant d'obscurité et la photo-réponse.

Dans un second temps, nous présenterons les évolutions du modèle qui ont été développées dans ce travail de thèse. Ces évolutions répondent à une problématique commune : la nécessité de reproduire quantitativement les mesures expérimentales de nos QCDs. Nous verrons donc comment ces évolutions de modèle ont permis d'améliorer la capacité de prédiction et de reproduction des données expérimentales, dans l'objectif, in-fine, de concevoir des dispositifs robustes, efficaces et prédictifs.

En présentant et en appliquant notre modèle de transport électronique, ce premier chapitre nous permettra donc de développer une première compréhension intuitive du fonctionnement complexe des détecteurs à cascade quantique.

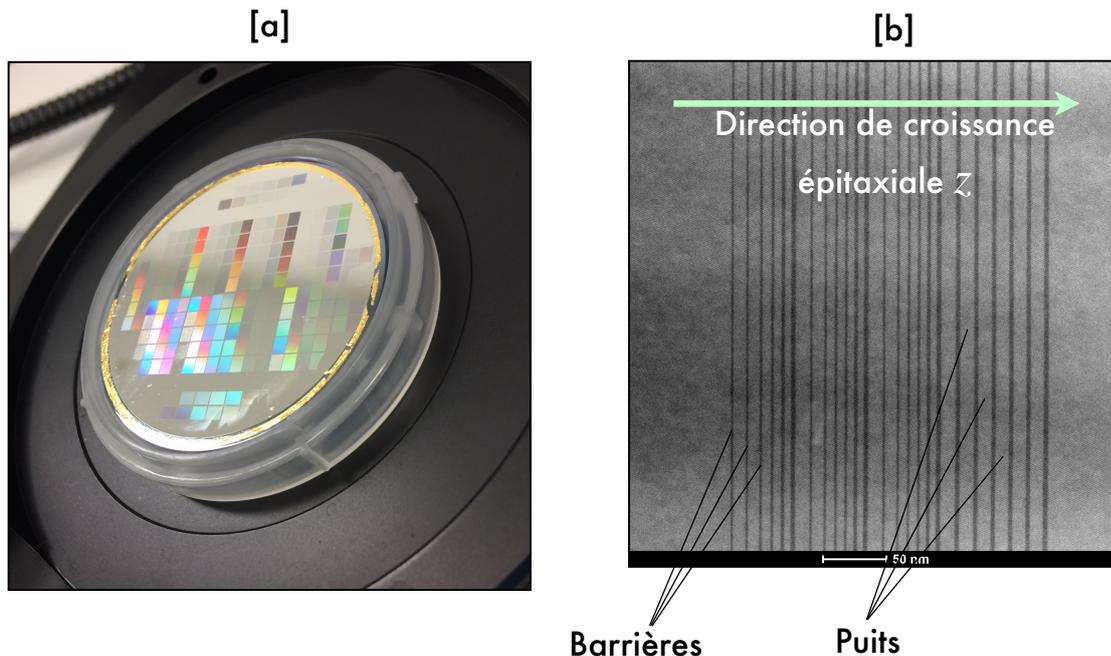


FIGURE 2.1 – [a] : photographie (G.Quinchard) d’une plaque de détecteurs à cascade quantique (QCDs) embarqués dans des réseaux d’antennes patches. Chaque rectangle coloré correspond à un réseau d’environ une centaine de milliers de cavités antennes patches, dans lesquelles les structures de QCD sont embarquées. Les différentes géométries de ce réseau d’antennes sont à l’origine des colorations différentes observées sur la photographie. [b] : coupe TEM (remerciements à Gilles Patriarche et Konstantinos Pantzas, de la plateforme Renatech du C2N pour nous avoir fourni ces images TEM) d’une région active d’un QCD. On est capable de distinguer les différentes couches qui composent l’hétérostructure (dans ce cas précis, des barrières d’ $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ et des puits quantiques d’ $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{47}\text{As}$).

2.1 Équation de Schrödinger et approximation de la fonction enveloppe

L’objectif de cette première partie est de construire l’Hamiltonien $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$ d’un électron confiné dans une hétérostructure périodique, et par suite d’approximations, d’obtenir la forme générale des fonctions d’onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ solutions de (2.1). La formulation la plus générale de l’équation de Schrödinger est :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t)} \quad (2.1)$$

Dans la suite, on ne s’intéresse qu’aux solutions stationnaires de l’équation de Schrödinger :

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

2.1.1 États de Bloch

Considérons un unique matériau semi-conducteur A. L'Hamiltonien \mathcal{H}_A à un électron s'écrit :

$$\mathcal{H}_A(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_C^A(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V_C^A(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

Où m_0 représente la masse de l'électron dans le vide. En plus de la contribution cinétique, l'électron est soumis au potentiel du réseau cristallin $V_C^A(\mathbf{r})$, un potentiel périodique de l'échelle de la maille cristalline. Il est fait le choix de représenter les fonctions d'onde du système décrit par Eq. (2.3) dans la base des états de Bloch $|n, \mathbf{k}\rangle$ [64], indicés par le numéro de bande n et le vecteur d'onde \mathbf{k} , de distribution spatiale :

$$\Psi_{n, \mathbf{k}}^A(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_A}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

Où V_A , le volume du matériau A, est introduit par normalisation, et $u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ est une fonction périodique de même périodicité que le réseau cristallin. Nous verrons plus tard que c'est le choix particulier de cette base de représentation, les états de Bloch, qui va nous permettre d'introduire l'approximation de la fonction enveloppe. Ces états prennent donc la forme d'ondes planes modulées par une fonction périodique.

La question est donc de savoir comment sont modifiés ces états du système lorsque l'on introduit un second matériau B, de structure cristalline différente de A.

2.1.2 Fonction enveloppe

Dans le cas d'une hétérostructure, le calcul de ces nouveaux états étant technique et fastidieux, le lecteur est invité à se reporter à [65] pour de plus amples détails. Nous nous contenterons ici de présenter les résultats et d'en souligner les points clés.

La répétition périodique sur l'axe de croissance z des deux matériaux semi-conducteurs A et B forme un potentiel périodique $V_{\text{Het}}(z)$ de l'hétérostructure dans la bande de conduction (voir Figure 2.2), lentement variable par rapport aux potentiels cristallins V_C^A et V_C^B . Ce potentiel V_{Het} est couramment idéalisé comme uniforme dans la direction perpendiculaire à l'axe de croissance $\mathbf{r}_\perp = (x, y)$ et on le présente généralement sous la forme simplifiée d'une répétition de crêpeaux abrupts selon z de discontinuité périodique V_{BO} , qualifiée de potentiel d'offset de bandes. Le nouvel Hamiltonien du système est alors de la forme :

$$\mathcal{H}_{AB}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V_C^A(\mathbf{r}) + V_C^B(\mathbf{r}) + V_{\text{Het}}(z) \quad (2.5)$$

où le potentiel cristallin V_C^B du semi-conducteur B a été introduit. L'hypothèse de la fonction enveloppe consiste à supposer que le potentiel d'hétérostructure V_{Het} (et tous les potentiels perturbateurs qui seront introduits plus tard) varie à grande échelle (échelle du nanomètre) par rapport au potentiel cristallin (échelle de l'angström). En développant les solutions de l'équation (2.5) sur la base des états de Bloch, et en appliquant cette approximation, on obtient que les états propres de \mathcal{H}_{AB} sont de la forme suivante :

$$\Psi_{n, \mathbf{k}}^{AB}(\mathbf{r}) = \xi_n(\mathbf{r}) u_{n, \mathbf{k}=\mathbf{0}}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

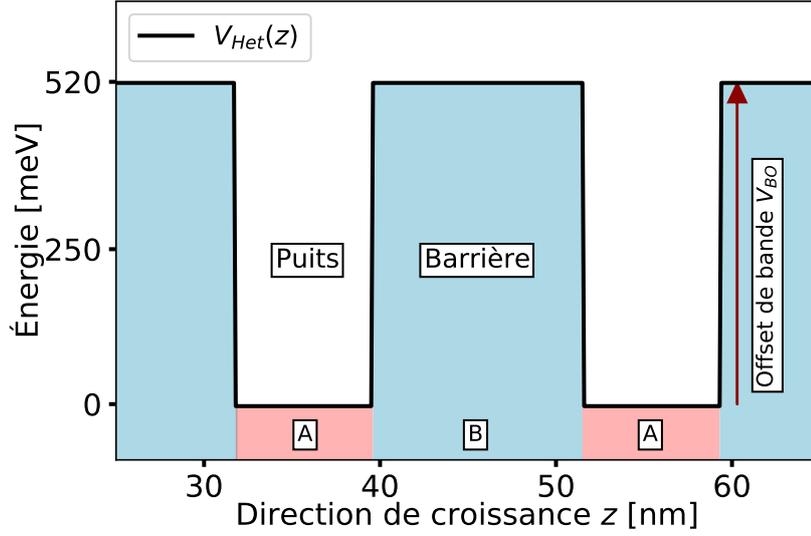


FIGURE 2.2 – Représentation du potentiel d’hétérostructure pour une répétition périodique de deux matériaux A et B . Ici $A = \text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et $B = \text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$, tel que $V_{\text{BO}} = 520$ meV.

L’expression obtenue est très similaire à l’expression de l’équation (2.4). Les solutions sont constituées d’une fonction enveloppe, $\xi_n(\mathbf{r})$ dont la forme est déterminée par le potentiel d’hétérostructure, modulée par une fonction périodique (seuls les états de fond de bande de conduction $\mathbf{k} = 0$ sont utilisés). Il est possible de montrer à partir des équations (2.5) et (2.6) que la fonction enveloppe est déterminée à partir d’une équation de Schrödinger effective :

$$-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\left(\frac{1}{m^*(E_{n,\mathbf{k}_\perp},z)}\nabla\right)\xi_n(\mathbf{r})+V_{\text{Het}}(z)\xi_n(\mathbf{r})=E_{n,\mathbf{k}_\perp}\xi_n(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

associée à une idée fondamentale : pour chaque état $|n, \mathbf{k}_\perp\rangle$, tous les effets du potentiel cristallin sont incorporés par l’introduction de la masse effective m^* . Cette modification de la masse de l’électron libre permet de nous affranchir du suivi explicite des potentiels cristallins V_A et V_B , via une écriture condensée et simple.

La dernière étape de ce développement consiste simplement à distinguer la direction de croissance z de la direction perpendiculaire \mathbf{r}_\perp . La masse effective étant considérée comme uniforme selon la direction perpendiculaire \mathbf{r}_\perp , on décompose l’Hamiltonien total tel que :

$$\mathcal{H}(\mathbf{r})=\mathcal{H}^z(z)+\mathcal{H}^\perp(\mathbf{r}_\perp) \quad (2.8)$$

Avec :

$$\mathcal{H}^z(z)=-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{m^*(E_{n,\mathbf{k}_\perp=0},z)}\frac{\partial}{\partial z}\right)+V_{\text{Het}}(z) \quad (2.9)$$

$$\mathcal{H}^\perp(\mathbf{r}_\perp)=-\frac{\hbar^2}{2m^*(E_{n,\mathbf{k}_\perp},z)}\nabla_{\mathbf{r}_\perp}^2 \quad (2.10)$$

Par conséquent, dans la direction perpendiculaire \mathbf{r}_\perp , les électrons ne sont pas confinés et peuvent se déplacer librement. Les solutions de l’équation (2.7) peuvent alors être mises sous

une forme factorisée :

$$\boxed{\xi_n(\mathbf{r}) = \phi_n(z)e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp}} \quad (2.11)$$

Cette expression contient l'essentiel de l'information physique : la fonction enveloppe de l'électron est le produit d'une onde plane dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance épitaxial (les électrons sont libres dans ce plan) et d'une fonction enveloppe unidimensionnelle selon z , dont la distribution spatiale va être déterminée par le potentiel d'hétérostructure. À noter que l'approximation d'homogénéité dans les plans de croissance est conditionnée par la qualité des structures épitaxiales étudiées (ce qui est généralement le cas dans nos hétérostructures, cf. l'image TEM d'un QCD Figure 2.1-[b]). Si par hypothèse, la rugosité aux interfaces n'est donc pas incluse dans la modélisation des fonctions d'onde, elle sera tout de même traitée plus tard, de manière perturbative.

La dispersion de chaque bande n créée par le confinement du potentiel d'hétérostructure est :

$$\boxed{E_{n,\mathbf{k}_\perp} = E_n + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*(E_{n,\mathbf{k}_\perp})}} \quad (2.12)$$

La dispersion de ces bandes est souvent approximée comme parabolique, en prenant la masse effective de chaque point k étant égale à la masse effective en fond de bande n :

$$E_{n,\mathbf{k}_\perp} \approx E_n + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*(E_n)} \quad (2.13)$$

Différents modèles de non-parabolicité seront étudiés plus loin, section 2.5.2.

2.1.3 Équation de Schrödinger unidimensionnelle

Dans la section précédente, on a réussi à condenser l'essentiel de la substance physique du système dans une fonction unidimensionnelle $\phi_n(z)$. Jusque là, dans un souci de simplification, nous n'avons considéré que le potentiel d'hétérostructure V_{het} dans le potentiel de l'Hamiltonien (les effets des potentiels cristallins ont été incorporés dans la masse effective). Il existe évidemment d'autres contributions à l'Hamiltonien \mathcal{H}^z , que nous allons regrouper en deux catégories de contributions :

$$\mathcal{H}^z(z, \mathbf{r}_\perp) = \mathcal{H}_0(z) + \mathcal{H}_1(z, \mathbf{r}_\perp) \quad (2.14)$$

$\mathcal{H}_0(z)$ est assimilable à l'Hamiltonien du cristal parfait. Il regroupe les termes de potentiel dont les effets sont prépondérants sur le système. En le diagonalisant, on obtiendra des solutions $\phi_n(z)$ qui sont représentatives du système. $\mathcal{H}_1(z)$ est l'Hamiltonien du cristal réel. Il représente les non-idéalités du potentiel qui va induire le transport dans la structure. Il regroupe donc les termes perturbatifs, dont les effets ne sont pas suffisants pour altérer de manière significative les états propres de $\mathcal{H}_0(z)$. Ces termes, traités de manière perturbative, joueront en revanche un rôle clé dans le calcul des populations et du transport électronique de manière générale.

On commence par s'intéresser à l'Hamiltonien $\mathcal{H}_0(z)$. Comme énoncé précédemment, c'est cet Hamiltonien qu'on utilise pour calculer les $\phi_n(z)$. L'équation à résoudre devient donc l'équation de Schrödinger effective et unidimensionnelle :

$$\mathcal{H}_0(z)\phi_n(z) = E_n\phi_n(z) \quad (2.15)$$

Identifions maintenant les différentes contributions à cet Hamiltonien $\mathcal{H}_0(z)$:

$$\mathcal{H}_0(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(E_n, z)} \nabla \right) + V_{\text{Het}}(z) + V_{\text{App}}(z) + V_{\text{Poisson}}(z) \quad (2.16)$$

Deux nouvelles contributions ont été ajoutées :

- $V_{\text{App}}(z)$ représente la distribution selon z du potentiel électrique appliqué aux bornes de la structure. Au sein de la structure active, on l'approxime par une distribution linéaire (donc homogène) du champ électrique appliqué F tel que :

$$V_{\text{App}}(z) = qFz \quad (2.17)$$

- $V_{\text{Poisson}}(z)$ est le potentiel de Poisson. Il modélise les effets de la redistribution des charges électroniques, occasionnée par le transport dans la structure, sur le potentiel. Calculer ce terme statique, dû au champ moyen, est une manière semi-classique et macroscopique d'intégrer les contributions majoritaires de l'interaction électron-électron. Le calcul de $V_{\text{Poisson}}(z)$ et ses effets seront rediscutés plus loin section 2.3.

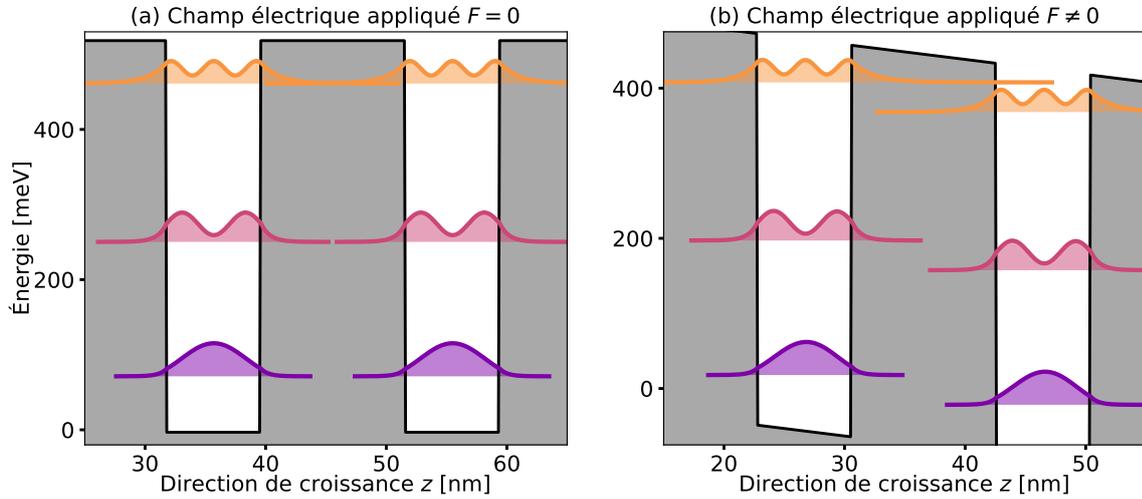


FIGURE 2.3 – Représentation graphique de la densité de probabilité des fonctions d'onde $|\phi_n(z)|^2$ solutions de l'équation (2.7) pour une hétérostructure typique $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, avec une largeur de puits $L_{\text{QW}} = 78 \text{ \AA}$. (a) Pour un champ électrique appliqué nul ($V_{\text{App}} = 0$) (b) Pour un champ électrique appliqué non-nul. Ici $V_{\text{Poisson}} = 0$.

Il ne nous reste plus qu'à diagonaliser l'Hamiltonien \mathcal{H}_0 de l'équation (2.16) pour obtenir les états propres $\{|n\rangle\}$, qui représentent les différentes sousbandes de notre QCD, placées

aux énergies propres $\{\omega_n\}$ ¹. Un exemple de résolution typique des fonctions d'onde dans un potentiel d'hétérostructure est représenté Figure 2.3, pour deux situations de potentiel appliqué V_{App} . On restreint le calcul aux fonctions d'onde qui sont confinées (celles qui sont dans les puits de potentiel). Il est possible de calculer les fonctions d'onde du continuum, en mettant des créneaux de potentiel fictifs aux bornes du domaine de calcul (ce qui donne par ailleurs une représentation discrète des fonctions d'onde du continuum), mais dans les systèmes que nous étudierons, les fonctions du continuum participent de manière négligeable au transport. On applique des conditions aux bords de type "boîte" : le domaine est borné par des barrières de potentiel épaisses. Pour éloigner les effets de bords indésirables, on réalise généralement le calcul sur un minimum de trois périodes. À noter que les hypothèses de périodicité se trouveront aussi dans les équations de transport, discutée plus loin.

2.1.4 Interaction tunnel et base des états électroniques

L'objectif de cette partie est d'introduire l'interaction tunnel entre deux sousbandes, et les différentes manières de traiter cette interaction, en fonction de l'amplitude des mécanismes de couplage tunnel Ω_T cohérents, et des mécanismes antagoniques décohérents, liés à la dynamique intra-sousbande γ_{intra} (déplacement des électrons au sein des sousbandes). Nous verrons que les différents traitements abordés changent radicalement la représentation spatiale et l'interprétation physique des fonctions d'onde ϕ_n .

Dans la partie précédente, on a trouvé une base d'états propres $\{|n\rangle\}$ qui diagonalise l'Hamiltonien (2.16) d'énergies propres $\{\omega_n\}$. Dans cette base, la représentation matricielle de l'Hamiltonien restreint à deux bandes i et j , qu'on prendra séparées par une barrière, est donc diagonale :

$$\mathcal{H}_0^{ij} = \begin{bmatrix} \omega_i & 0 \\ 0 & \omega_j \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

où ω_i et ω_j représentent les énergies associées aux deux sousbandes i et j . Les sousbandes sont orthogonales et n'interagissent pas entre elles (pour le moment, les termes perturbatifs \mathcal{H}_1 à l'origine du transport électronique ne sont pas pris en compte).

Pour appréhender les effets du couplage tunnel entre les deux sousbandes, on peut choisir de ne pas représenter l'Hamiltonien \mathcal{H}_0^{ij} sous sa forme diagonale, mais sous une forme qui fait explicitement apparaître ce couplage, d'amplitude Ω_T . Ω_T représente donc les interactions tunnel des sousbandes deux-à-deux, à travers les barrières de potentiel qui les séparent. Dans cette nouvelle base d'états $\{|n'\rangle\}$, \mathcal{H}_0^{ij} devient :

$$\mathcal{H}_0^{ij} = \begin{bmatrix} \omega'_i & \Omega_T \\ \Omega_T & \omega'_j \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

où les $\omega'_{i,j}$ sont les énergies des sousbandes dans la base $\{|n'\rangle\}$. La question qui se pose désormais est : dans quelles conditions la base d'états $\{|n'\rangle\}$ est-elle plus pertinente que la base $\{|n\rangle\}$ pour représenter les fonctions d'onde du système ?

1. À partir de maintenant et dans toute la suite de ce manuscrit, nous utiliserons la notation ω pour faire référence à une énergie.

Dans un premier temps, on se restreint aux situations résonnantes $\omega'_i = \omega'_j$. Le couplage tunnel est un mécanisme de transport cohérent, qui crée des oscillations de Rabi entre les deux sousbandes ω'_i et ω'_j : la probabilité pour un électron d'être présent dans une des sousbandes i', j' est une fonction sinusoïdale du temps, de pulsation d'oscillation Ω_T . C'est un phénomène résonnant, c'est-à-dire que ses effets sont d'autant plus conséquents que les sousbandes sont proches en énergie.

À ce transport cohérent, s'opposent les effets décohérents de la dynamique *intra-sousbande* γ_{intra} . Dans un système réel, les états électroniques des sousbandes sont en effet soumis à des processus diffusifs, assimilables à des actions de l'environnement (l'extérieur du système, à savoir les phonons, la rugosité aux interfaces ...) sur ces états. Ces processus vont avoir pour effet de provoquer des transitions $|i', k\rangle \rightarrow |i', k'\rangle$ et donc de réorganiser la distribution électronique à l'intérieur d'une sousbande. Cette réorganisation a pour conséquence d'effacer progressivement la cohérence entre deux sousbandes et donc d'amortir les oscillations de Rabi dues au couplage tunnel. Les mécanismes qui dominent ces effets décohérents sont les mécanismes dits *intra-sousbandes*, c-a-d. qui prennent place à l'intérieur des sousbandes (à distinguer des mécanismes *inter-sousbandes*, entre les sousbandes, dont l'efficacité est généralement d'un ordre de grandeur inférieur aux mécanismes intra). L'enjeu désormais est donc de distinguer plusieurs situations de rapport d'amplitude entre la dynamique tunnel cohérente Ω_T et la dynamique décohérente intra-sousbande γ_{intra} :

1. **Situation** $\Omega_T \gg \gamma_{\text{intra}}$: pour comprendre cette situation, on se rapporte d'abord à la situation asymptotique $\Omega_T \neq 0$, $\gamma_{\text{intra}} = 0$ d'un système fermé idéal, parfaitement hermétique à l'extérieur et restreint à deux sousbandes i et j . L'évolution du système est donc parfaitement cohérente, uniquement soumise au couplage tunnel. Les électrons des sousbandes oscillent à la pulsation $2\Omega_T$, et ces oscillations de Rabi perdurent éternellement (Figure 2.4.[c]) : ni l'énergie du système, ni les cohérences ne sont dissipées. Dans cette situation idéale, il est pertinent d'utiliser les états propres $\{|n\rangle\}$ qui diagonalisent l'Hamiltonien \mathcal{H}_0^{ij} (2.19). En particulier, cela nous permet d'exprimer les énergies propres $\omega_{i,j}$ explicitement à l'aide de l'amplitude du couplage tunnel Ω_T . À la résonance $\omega_i = \omega_j$, on a :

$$\omega_i = \frac{\omega'_i + \omega'_j}{2} + \Omega_T \quad (2.20)$$

$$\omega_j = \frac{\omega'_i + \omega'_j}{2} - \Omega_T \quad (2.21)$$

La distribution spatiale des fonctions d'onde est représentée Figure 2.4-[a]. Les fonctions d'onde sont délocalisées dans les deux puits, ce qui traduit le caractère cohérent du transport électronique entre ces deux sousbandes. Dans cette première situation, nous avons étudié le cas extrême $\gamma_{\text{intra}} = 0$, mais cette interprétation peut être élargie aux situations $\Omega_T \gg \gamma_{\text{intra}}$. De manière générale, si la dynamique tunnel domine la dynamique intra-sousbande, et donc si les oscillations électroniques entre les deux sousbandes sont plus rapides que les processus diffusifs décohérents, il est pertinent d'utiliser la base diagonale $\{|n\rangle\}$ et une représentation *délocalisée* des fonctions d'onde.

2. **Situation** $\Omega_T \ll \gamma_{\text{intra}}$: ici, la dynamique intra-sousbande domine le couplage tunnel entre les deux bandes. Un électron dans la sousbande i transporté de manière

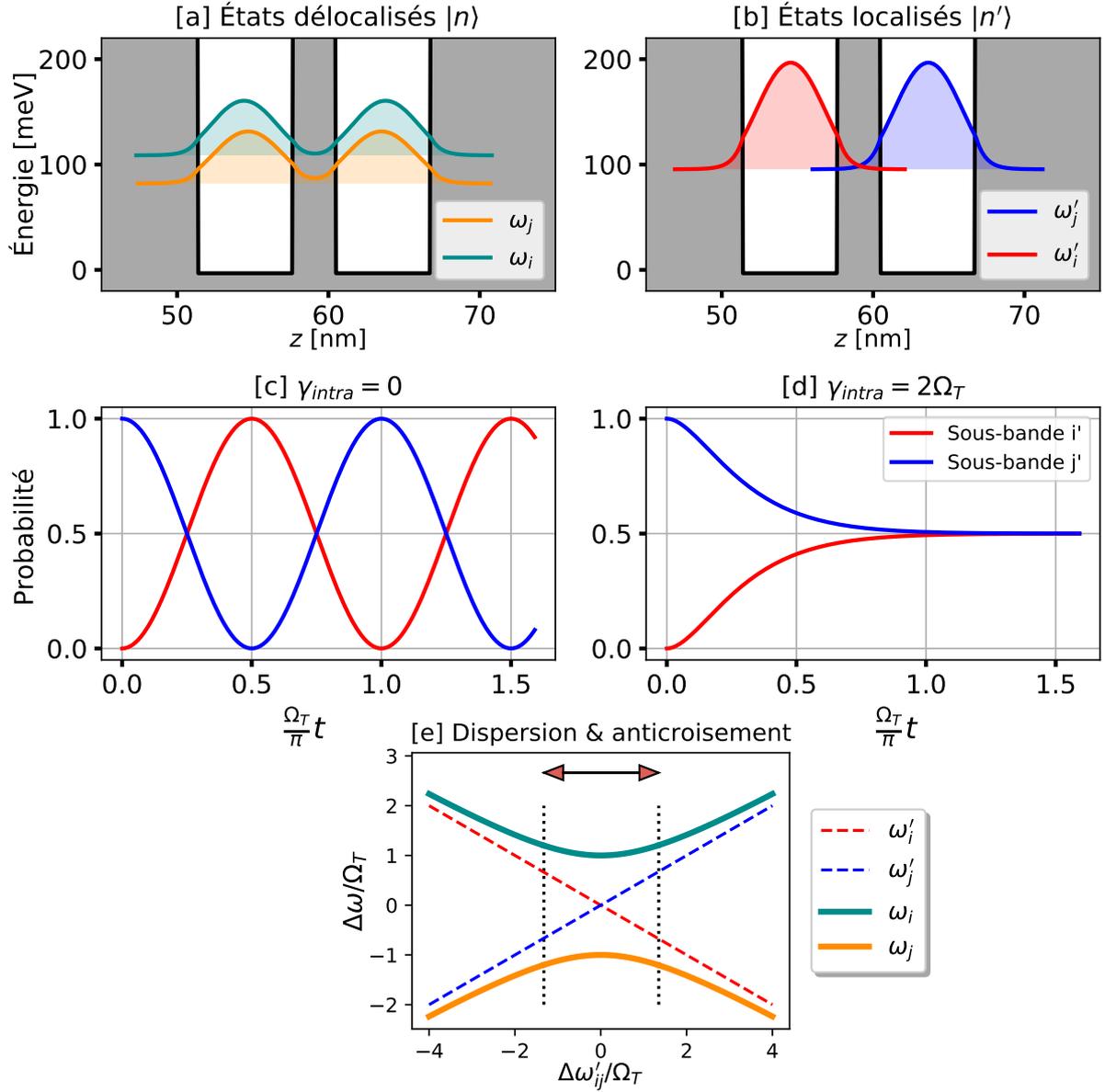


FIGURE 2.4 – Illustration des bases dites *délocalisées* et *localisées*. Toutes les figures sont tracées à résonance $\omega'_i = \omega'_j$ (sauf [e]), pour le même couplage tunnel Ω_T . [a] : densité de probabilité des fonction d'onde dans une base *délocalisée* $\{|n\rangle\}$. [b] : dans une base *localisée* $\{|n'\rangle\}$. [c] : Probabilité de présence d'un électron dans les différentes sousbandes i et j en fonction du temps, pour $\gamma_{intra} = 0$. On observe les oscillations caractéristiques de Rabi, dues au couplage tunnel cohérent. Calcul réalisé avec Qutip [66]. [d] : pour $\gamma_{intra} = 2\Omega_T$. L'amortissement dû aux effets de décohérence intra-sousbande ne permet plus de distinguer les oscillations de Rabi. Les sousbandes se localisent. [e] Diagramme de dispersion des différentes énergies du système en fonction de la différence d'énergie $\Delta\omega'_{ij}$ exprimée dans la base localisée. La zone d'anticroisement est indiquée par la flèche et délimitée par les traits pointillés verticaux. Loin de cette zone, les deux bases donnent une dispersion quasi-similaire.

cohérente vers la sousbande j est immédiatement localisé dans la sousbande d'arrivée, par les mécanismes de diffusion intra-sousbande, sans qu'il n'ait le temps de réaliser plusieurs oscillations entre les sousbandes. Les cohérences entre les sousbandes sont amorties à tel point qu'il n'est plus possible de discerner le caractère oscillatoire du couplage (Figure 2.4-[d]). Dans cette situation, c'est cette fois la base d'états $\{|n'\rangle\}$, qui ne diagonalise pas l'Hamiltonien (2.19), qui représente plus fidèlement le système, et qui doit être utilisée. L'idée ici n'est pas de négliger les effets tunnels, mais de les traiter plus tard, de manière perturbative, en les introduisant dans l'Hamiltonien de perturbation \mathcal{H}_1 . La représentation spatiale des fonctions d'onde est donc celle de la Figure 2.4-[b], où chaque sousbande est dite *localisée* dans son puits de potentiel respectif.

Quel que soit le rapport d'amplitude entre la dynamique tunnel Ω_T et intra-sousbande γ_{intra} , il faut, de manière pragmatique, sélectionner une base $\{|n'\rangle\}$ (localisée) où $\{|n\rangle\}$ (délocalisée) pour poursuivre nos calculs de transport. Si les deux situations précédentes sont évidentes, les situations d'amplitudes comparables $\Omega_T \approx \gamma_{\text{intra}}$ sont complexes à traiter, le choix de telle ou telle base affectant significativement les résultats des calculs d'absorption, de courant d'obscurité, de photo-courant... Lorsqu'on s'éloigne de la condition de résonance

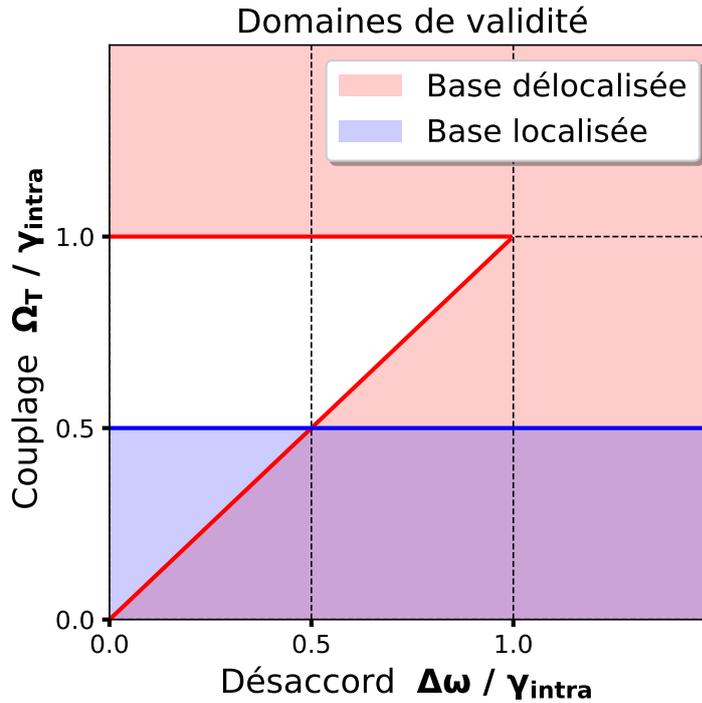


FIGURE 2.5 – Domaines de validité des deux bases de représentation des fonctions d'onde (*localisée* et *délocalisée*). Adaptée de [67].

$\omega'_i = \omega'_j$, les deux bases $\{|n\rangle\}$ et $\{|n'\rangle\}$ convergent vers des descriptions similaires du système. La discussion est illustrée avec la Figure 2.4-[e], qui représente le diagramme de dispersion des énergies des sousbandes en fonction de la différence d'énergie $\Delta\omega'_{ij} = \omega'_j - \omega'_i$. On voit bien que loin de la résonance ($|\Delta\omega'_{ij}| > 2\Omega_T$), les énergies propres des états délocalisés (ω_i et ω_j) convergent vers les énergies des états localisés (ω'_i et ω'_j). En pratique, pour

déterminer si l'une ou l'autre base est adaptée, on utilise la figure 2.5, qui représente les domaines de validité des différentes bases (*localisée* et *délocalisée*) en fonction de Ω_T , γ_{intra} et $\Delta\omega = |\omega'_i - \omega'_j|$ [67]. Discutons des différentes limites de ces domaines de validité :

- Domaine de validité de la base localisée (en bleu) : tant que le couplage tunnel est suffisamment faible devant l'intensité des effets décohérents intra-sousbandes ($\Omega_T \leq \gamma_{\text{intra}}/2$), les oscillations de Rabi électroniques sont amorties trop rapidement pour pouvoir engendrer une délocalisation des électrons entre les sousbandes. Dans ce cas, une représentation localisée est pertinente, et ce raisonnement, valable à la résonance, s'étend quel que soit le désaccord $\Delta\omega$.
- Domaine de validité de la base délocalisée (en rouge). À l'inverse, tant que le couplage tunnel est suffisamment fort devant l'intensité intra-sousbande ($\Omega_T \geq \gamma_{\text{intra}}$), les oscillations de Rabi auront le temps de perdurer pour engendrer une délocalisation des électrons entre les sousbandes. La base délocalisée est donc adaptée dans le cas de cette limite haute, quel que soit le désaccord $\Delta\omega$. Pour les situations $\Omega_T < \gamma_{\text{intra}}$, le raisonnement est plus subtil. On sait que les fonctions d'onde représentées dans cette base sont effectivement délocalisées dans les puits adjacents uniquement lorsque les sousbandes couplées sont proches de la résonance. Loin de cette résonance, elles retrouvent leur caractère localisé (on a vu que les deux bases convergeaient vers une même représentation loin de la résonance). Par conséquent, si le désaccord $\Delta\omega$ est suffisant devant l'intensité du couplage, la base délocalisée reste pertinente à utiliser, puisqu'elle n'occasionne pas de court-circuit dans la structure. En pratique, on prendra une limite $\Delta\omega = \Omega_T$.

À noter que la position et la forme de ces différentes limites restent un choix de modélisation.

Nous avons volontairement insisté sur cette partie qui peut sembler particulièrement technique et non-nécessaire à une compréhension qualitative du fonctionnement d'un QCD. En effet, cette réflexion sur l'anticroisement d'états électroniques délocalisés, issus de l'hybridation de deux sousbandes localisées, présente de fortes similarités avec l'anticroisement d'états polaritoniques, issus de l'hybridation d'un état photonique et d'un état électronique dans un régime de couplage fort lumière-matière, dont nous discuterons dans les chapitres 4 et 5 de ce manuscrit.

2.2 Système d'équations bilans de population

Dans la section précédente, on a construit l'Hamiltonien \mathcal{H}_0 en identifiant progressivement ses différentes contributions. En analysant les rapports d'amplitudes des mécanismes tunnel cohérents et intra-sousbande décohérents, on a pu construire une base d'états propres $|n\rangle$ et leur représentation spatiale de fonction d'onde $\phi_n(z)$, placées aux énergies ω_n . Dans les sections qui suivent, on va progressivement construire un système d'équations de bilan de populations, qui régit le transport électronique entre les états $|n, k\rangle$ construits précédemment. Cette approche peut être qualifiée de *perturbative*, puisque seuls les termes \mathcal{H}_0 ont été intégrés dans le calcul des fonctions d'onde ; tous les autres termes, de diffusion, inclus dans l'Hamiltonien \mathcal{H}_1 que nous décrirons dans la suite, seront traités de manière perturbative. Cette approche est cependant largement utilisée dans la littérature, avec beaucoup de succès [68, 69, 44, 70, 71]. Si ce modèle a le mérite d'être intuitif, des modèles plus complexes à

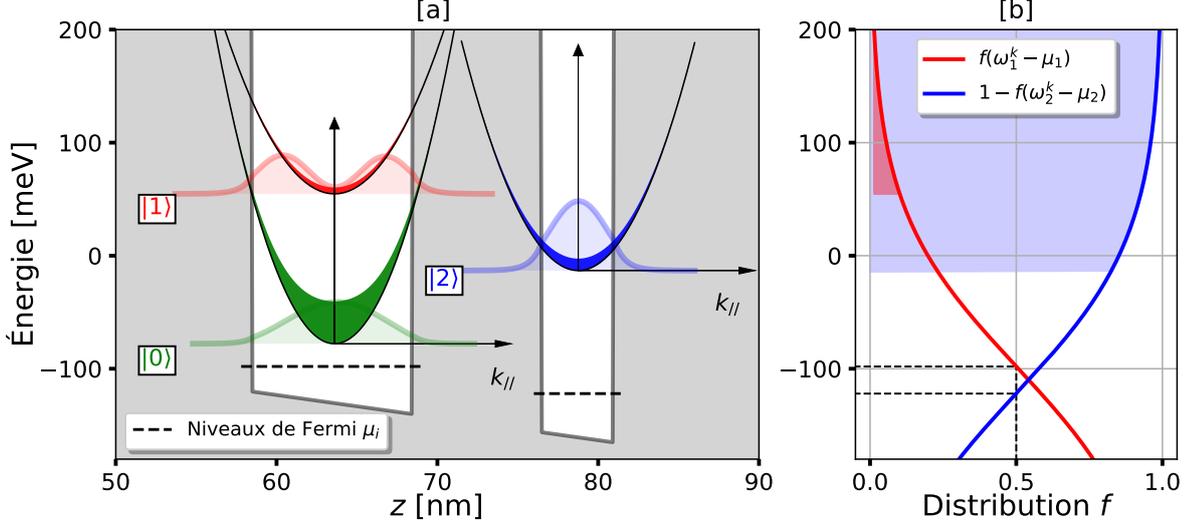


FIGURE 2.6 – [a] Superposition schématique de la structure de bande et de la dispersion de chacune des sousbandes. Les zones pleines représentent la distribution de population électronique dans les sousbandes. [b] Distributions de population f et d'états vacants $1 - f$, utilisées pour le calcul d'un taux de transition $1 \rightarrow 2$. Les zones pleines représentent les portions utilisables des deux fonctions f et $1 - f$ (car $\rho_{2D}^i(\omega < \omega_i) = 0$). On fait l'hypothèse que les sousbandes $|0\rangle$ et $|1\rangle$ ont le même niveau de Fermi.

base de fonctions de Green hors-équilibre donnent d'excellents résultats, puisque traitant de la même manière non-perturbative toutes les contributions \mathcal{H}_0 et \mathcal{H}_1 [72, 73], mais au détriment de longs temps de calculs.

Avant de pouvoir dresser ce système d'équations bilans, il nous faut recenser les différentes interactions entre sousbandes, que nous regrouperons dans l'Hamiltonien \mathcal{H}_1 , qui décrit les contributions traitées de manière perturbative. Avec l'aide des états $|n, k\rangle$, \mathcal{H}_1 va nous permettre de quantifier le transport électronique mais aussi les élargissements en énergie des sousbandes n via le calcul des taux de transitions électroniques *inter* et *intra*-sousbandes. La théorie des perturbations stipule que ces taux de transitions obéissent à la règle d'or de Fermi :

$$\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k, k'} \left| \langle j, k' | \mathcal{H}_1^{k, k'} | i, k \rangle \right|^2 \delta(\omega_i^k - \omega_j^{k'}) f(\omega_i^k) (1 - f(\omega_j^{k'})) \quad (2.22)$$

où $\omega_i^k = \omega_i + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*(k)}$ est l'énergie de l'état $|i, k\rangle$ et f représente la distribution électronique au sein des sousbandes (pour le moment, la forme de cette distribution n'est pas contrainte). Par conséquent, $1 - f$ représente la distribution d'états non-occupés dans les sousbandes. $\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}$ peut être apparenté à un courant particulière, donc le nombre de particules qui transitent d'une sousbande à l'autre par unité de temps. Dans la limite où les dimensions de la section perpendiculaire à l'axe de croissance est infinie, l'équation (2.22) prend les formes intégrales

(intégrale en k ou en énergie ω) :

$$\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} = \int d^2 k' \int d^2 k \left| \langle j, k' | \mathcal{H}_1^{k, k'} | i, k \rangle \right|^2 \delta(\omega_i^k - \omega_j^{k'}) \rho_{2D}^i(k) f(\omega_i^k) \left(1 - f(\omega_j^{k'}) \right) \quad (2.23)$$

$$= \int_{\omega_j}^{\infty} d\omega' \int_{\omega_i}^{\infty} d\omega \underbrace{\left| \langle j, k' | \mathcal{H}_1^{k, k'} | i, k \rangle \right|^2}_{\text{Probabilité de transition}} \delta(\omega - \omega') \underbrace{\rho_{2D}^i(\omega) f(\omega)}_{\text{Densité population } i} \underbrace{\left(1 - f(\omega') \right)}_{\text{Densité états vacants } j} \quad (2.24)$$

Pour chacune des transitions possibles $|i, k\rangle$ vers $|j, k'\rangle$, on calcule la probabilité de transition $P(|i, k\rangle \rightarrow |j, k'\rangle)$ à l'aide de l'Hamiltonien \mathcal{H}_1 de perturbation, qu'on pondère par la densité de population électronique en ce point k de la sousbande i et la densité d'états vacants du point k' de la sousbande j : une transition est possible si des électrons sont disponibles au départ et des états accessibles à l'arrivée.

L'élément de matrice $\left| \langle j, k' | \mathcal{H}_1^{k, k'} | i, k \rangle \right|^2$ s'exprime à l'aide des fonctions d'onde ξ_n de l'équation (2.11) :

$$\boxed{\left| \langle j, k' | \mathcal{H}_1^{k, k'} | i, k \rangle \right|^2 = \int dz \phi_j^*(z) \mathcal{H}_1^{k, k'}(z) \phi_i(z) \int d\mathbf{r}_\perp e^{-ik' \mathbf{r}_\perp} e^{ik \mathbf{r}_\perp}} \quad (2.25)$$

La Figure 2.6-[a] schématise la dispersion des sousbandes et leur représentation dans le potentiel d'hétérostructure, et illustre en Figure 2.6-[b] les électrons disponibles dans la sousbande 1 (zone pleine rouge) et les places vacantes dans la sousbande 2 (zone pleine bleue).

2.2.1 Hypothèse des sousbandes thermalisées

Dans la suite, on formule une hypothèse cruciale pour le reste des calculs : on suppose que les transitions *inter*-sousbandes ($|i, k\rangle \rightarrow |j, k'\rangle$, $i \neq j$) sont peu efficaces devant les transitions *intra*-sousbandes ($|i, k\rangle \rightarrow |i, k'\rangle$). Par conséquent, après chaque transition inter-sousbande, les électrons sont rapidement redistribués au sein de la sousbande d'arrivée par le biais des mécanismes intra-sousbandes. Cette ré-organisation rapide de la distribution électronique a pour effet d'effacer progressivement toute "mémoire" des états antérieurs des électrons, jusqu'à thermalisation totale de la sousbande. C'est l'hypothèse des sousbandes thermalisées : chaque sousbande est supposée être dans un quasi-équilibre thermodynamique, et organisée selon une statistique de Fermi-Dirac [74, 75, 76] :

$$f(\omega, \mu_i, T) = \frac{1}{1 + e^{(\omega - \mu_i)/k_B T}} \quad (2.26)$$

où on introduit μ_i , le quasi-niveau de Fermi de la sousbande considérée, k_B est la constante de Boltzmann et T est la température du système (supposée être identique pour toutes les sousbandes, et dans le cas spécifique des QCDs, identique à la température du réseau cristallin).

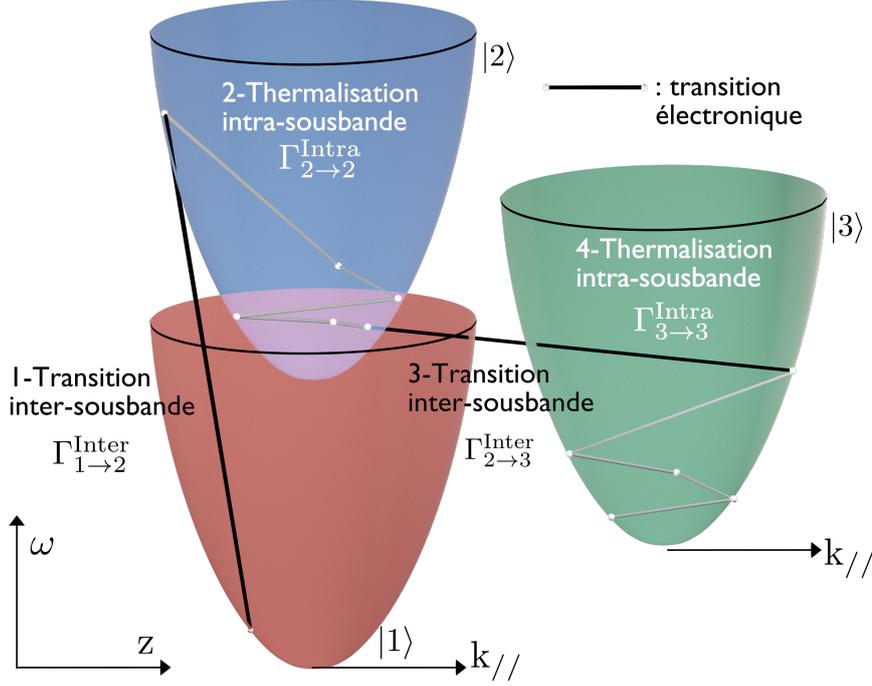


FIGURE 2.7 – Représentation schématique du transport d’un électron dans la structure : chaque transition inter-sousbande est succédée de la thermalisation de la sousbande d’arrivée.

Ces sousbandes peuvent donc être considérées comme de simples réservoirs électroniques, interagissant entre elles via des mécanismes inter-sousbandes perturbatifs. Chaque transition électronique est alors indépendante l’une de l’autre, puisque entre chaque saut, toute cohérence est effacée par la décohérence engendrée par la thermalisation intra-sousbande. Dans nos systèmes InGaAs/AlInAs, le temps caractéristique τ entre chaque transition inter-sousbande est au minimum de l’ordre de la picoseconde (ce qui se convertit en une énergie *d’au plus* $\frac{\hbar}{\tau} \approx 4$ meV), tandis que le temps caractéristique associé aux transitions intra-sousbandes est plutôt d’environ ≈ 500 fs (≈ 10 meV). Cette hypothèse sur la thermalisation des sousbandes est étudiée en détail dans [74]. Par la suite, nous n’aurons pas besoin de calculer explicitement les taux de transfert électroniques intra-sousbandes $\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow i}$ dans les équations de transport, puisque la dynamique stationnaire de chaque sousbande est entièrement englobée par l’expression de la distribution de Fermi-Dirac.

Les densités d’états 2D $\rho_{2D}^i(\omega)$ étant entièrement déterminées par les masses effectives m_i^* , il ne nous reste plus qu’à déterminer les éléments de matrice $\mathcal{H}_1^{k,k'}$ de l’équation (2.22) pour calculer les taux de transitions ISB. Dans la suite, pour comparer uniquement l’efficacité des mécanismes, nous utiliserons les taux de transitions $\Gamma_{i \rightarrow j}$:

$$\Gamma_{i \rightarrow j} = \frac{\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}}{n_i} \quad (2.27)$$

où n_i est la population de l’état i . Ces taux sont simplement les courants particuliers $\tilde{\Gamma}$ renormalisés par les populations des sousbandes, et s’expriment en s^{-1} . $\tau_{ij} = \frac{1}{\Gamma_{i \rightarrow j}}$ est donc le temps caractéristique qui sépare deux sauts d’une sousbande i à j .

Dans les prochaines parties, nous calculerons les taux de transitions $\Gamma_{i \rightarrow j}$, via les différentes contributions de l'Hamiltonien perturbatif, \mathcal{H}_1 . En particulier, nous calculerons les contributions de \mathcal{H}_1 dans les deux bases de représentation, *délocalisée* et *localisée*.

2.2.2 Taux de diffusion inter-sousbandes

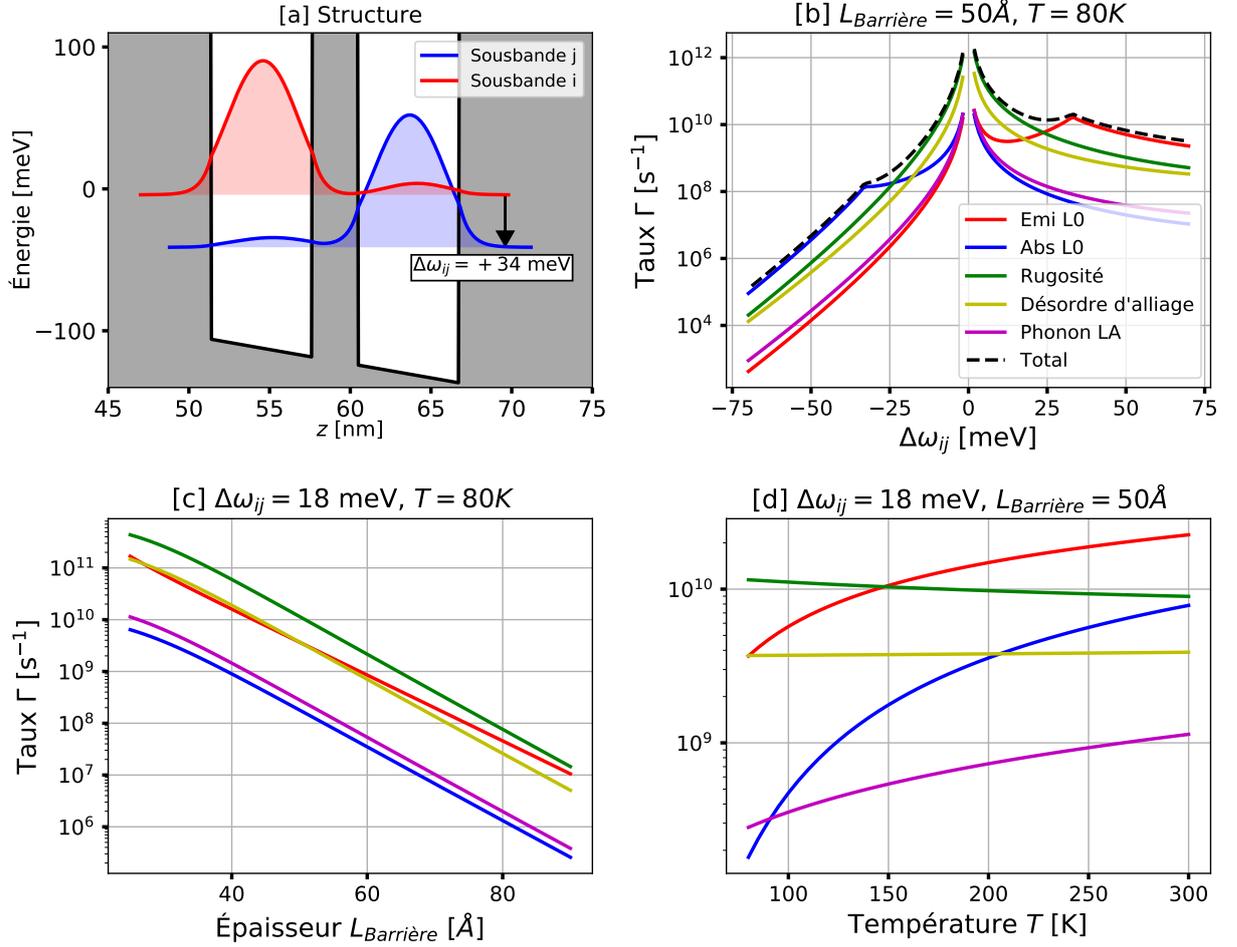


FIGURE 2.8 – [a] Structure modèle constituée de deux sousbandes, représentées dans une base délocalisée. Appliquer une tension V_{App} sur la structure permet de créer un désaccord d'énergie $\Delta\omega_{ij}$ entre les deux sousbandes. [b] Taux de diffusion pour toutes les contributions (émission phonon LO, absorption phonon LO, rugosité d'interface, désordre d'alliage et phonon LA), en fonction du désaccord d'énergie entre les sousbandes. La courbe en tirets représente la somme totale de ces contributions, $\Gamma_{i \rightarrow j}^{Diffusion}$. [c] Évolution des taux de diffusion en fonction de la largeur de la barrière $L_{Barrière}$ séparant les deux sousbandes. [d] Évolution des taux de diffusion en fonction de la température T du système.

Dans un premier temps, on se place dans un cas de figure où l'interaction entre deux sousbandes i et j est calculée dans une base *délocalisée* : tous les effets du couplage tunnel sont donc implicitement intégrés dans la représentation spatiale des fonctions d'onde $\phi_{i,j}(z)$ et leur position en énergie $\omega_{i,j}$. Si on se contente d'une simple revue des mécanismes

susceptibles d’affecter le transport, [70] et [77] fournissent une description détaillée de ces différents mécanismes et de leur implémentation. [78] donne des estimations numériques des taux de diffusion. On distingue en particulier les contributions suivantes :

- **Phonons** : la structure cristalline d’une structure semi-conductrice présente des modes de vibration, peuplés par des excitations discrètes, des quasi-particules bosoniques nommés phonons. Dans nos systèmes, par le biais de mécanismes d’absorption et d’émission de phonons, deux états k et k' peuvent interagir et donner lieu à une transition électronique, intra ou inter-sousbande. Seuls les modes optiques longitudinaux (LO) et acoustiques longitudinaux (LA) interagissent de manière efficace avec les électrons.
- **Rugosité d’interface** : la bonne gestion des interfaces entre les matériaux semi-conducteurs est un point clé de la croissance de nos hétérostructures. Ces interfaces ne sont généralement pas abruptes : sur une distance de l’ordre d’une monocouche ($\approx 3 \text{ \AA}$), on observe des variations de composition, qui engendrent des variations de potentiel susceptibles de générer des transitions électroniques [79, 80, 81].
- **Désordre d’alliage** : le désordre d’alliage est l’équivalent volumique de la rugosité d’interface. La répartition aléatoire des éléments atomiques des composés ternaires lors de la croissance, génère une fluctuation du potentiel, responsable de transitions électroniques élastiques.
- **Impuretés ionisées** : les impuretés dopantes introduites dans le réseau cristallin (dans notre cas, généralement du Si donneur) se ionisent avec la température, et permettent le peuplement des états liés des sousbandes formées dans les puits quantiques. L’accumulation de ces charges positives, désormais non-écrantées par leurs électrons, génère un potentiel perturbatif, susceptible d’affecter le transport. Ces effets sont d’autant plus intenses que la quantité de dopants introduite est élevée. La modélisation du potentiel généré par ces impuretés ionisées est un angle mort de notre modèle de transport : les modèles actuellement implémentés doivent être ré-actualisés. On choisit donc ici de ne pas présenter les résultats liés à ce potentiel perturbateur. En revanche, dans nos plages de dopage abordées ($n_{2D} \approx 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), on estime que ces mécanismes ne sont pas prépondérants [82] et nous verrons par la suite que ces mécanismes ne sont pas nécessaires pour décrire quantitativement les données expérimentales.

On définit un taux total de transition ISB dû aux mécanismes diffusifs $\Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Diffusion}}$:

$$\Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Diffusion}} = \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Abs LO}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Em LO}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{LA}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Rugosité}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Alliage}} \quad (2.28)$$

Dans la Figure 2.8, on étudie l’évolution des taux de transition électronique entre deux sousbandes i et j (cf. Figure [a]), décomposés en leur différentes contributions, en fonction de la différence d’énergie $\Delta\omega_{ij}$ entre les deux sousbandes, $L_{\text{Barrière}}$ la taille de la barrière qui les sépare, et T la température du système. De cette figure se dégagent de nombreuses tendances importantes pour la conception d’un QCD :

- **Évolution avec le désaccord en énergie** (Figure 2.8-[b]) : de manière générale, lorsque le désaccord en énergie $|\Delta\omega_{ij}|$ augmente entre deux sousbandes, les taux de transitions diminuent en intensité. Cette évolution est asymétrique : loin de la résonance, les transitions s’effectuant du “*haut vers le bas*” (de l’état plus haut en énergie vers l’état plus bas en énergie) sont plus efficaces que les transitions “*bas vers haut*”. Tous les mécanismes sont résonnants à $\Delta\omega_{ij} = 0$. À noter que les courbes

ne se rejoignent pas autour de la résonance, puisque pour le moment, on utilise la base des états délocalisés pour calculer les taux de transition : par conséquent, les états s'anticroisent autour $\Delta\omega_{ij} = 0$ (cf. section 2.1.4). Pour les mécanismes dus aux phonons LO, on trouve une résonance supplémentaire située à $\omega_{LO} = 33$ meV (pour une structure $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$: ω_{LO} est susceptible de changer selon les alliages utilisés). Cette résonance est essentielle dans la conception de structure QCD : c'est cet espacement, localisé sur la résonance $\Delta\omega = \omega_{LO}$, qu'on fixe généralement pour espacer les niveaux de la cascade.

- **Évolution avec la largeur de la barrière** (Figure 2.8-[c]) : lorsqu'on augmente les épaisseurs de barrière $L_{\text{Barrière}}$, on réduit le recouvrement des fonctions d'onde et mécaniquement les taux de transition diminuent. Dans cette situation restreinte à un système simplifié à deux sousbandes, il peut sembler intéressant de diminuer le plus possible la taille des barrières pour augmenter l'efficacité de la transition électronique. Cependant, dans un système réel avec un nombre plus important de sousbandes, il faudra faire attention à ne pas activer des transitions électroniques non-désirées : garder une taille de barrière suffisante permet de limiter ces interactions parasites.

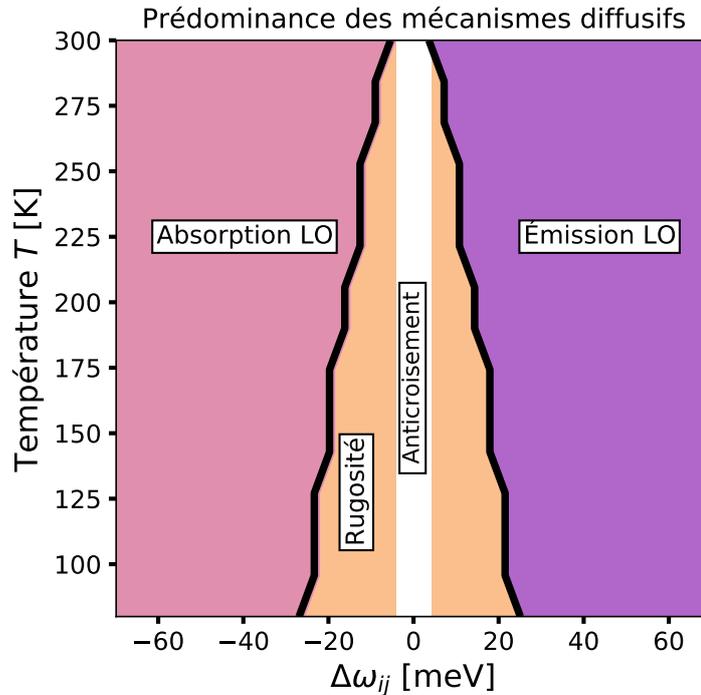


FIGURE 2.9 – Domaines de prédominances des différents mécanismes diffusifs. Autour de l'anticroisement, les mécanismes liés à la rugosité d'interface sont prédominants; au delà, les mécanismes liés à l'absorption et l'émission de phonon LO prédominent.

- **Évolution avec la température et prépondérance des mécanismes** (Figures 2.8-[b],[c] et 2.9) : attention, les conclusions suivantes sont susceptibles de changer avec des compositions d'alliages différentes (ici on ne travaille qu'avec $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} / \text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$). Seuls les mécanismes dus aux phonons ont une dépendance significative avec la température, la population de phonons étant proportionnelle à une

distribution de type Bose-Einstein. Les taux associés à la rugosité et au désordre d'alliage sont eux quasi-constants avec la température. Par conséquent, à faible température, mais aussi à faible désaccord $\Delta\omega_{ij}$, la rugosité d'interface domine les transferts électroniques, tandis qu'à haute température, ce sont bien les phonons qui prédominent. La Figure 2.9 récapitule les domaines de prépondérance des mécanismes de diffusion en fonction de la température T et du désaccord $\Delta\omega_{ij}$. La zone de prépondérance des mécanismes liés à la rugosité se ressert progressivement autour de la résonance lorsque la température augmente.

2.2.3 Taux tunnels

On se place désormais dans un cas de figure où l'interaction entre deux sousbandes i et j est calculée dans la base *localisée* (Figure 2.10-[a]). Cette fois, les contributions tunnel vont devoir être calculées explicitement et de manière perturbative. Ces résultats sont initialement calculés dans un article historique de Kazarinov et Suris [83], sous la forme d'une expression au premier ordre, à l'aide d'un formalisme matrice densité et de l'expression des cohérences quantiques entre les différentes sousbandes. Au premier ordre, il est trouvé que le courant particulaire net \mathcal{J}_T s'écrit :

$$\mathcal{J}_T = 2\Omega_T^2 \frac{\gamma}{(\omega_i - \omega_j)^2 + \gamma^2} (n_i - n_j) \quad (2.29)$$

où γ représente l'élargissement total lié au transport, et où tout effet de non-parabolicité est négligé (pas de dispersion en k). L'expression est intéressante, car elle permet de passer d'une formulation quantique du transport (qui fait intervenir les cohérences de la matrice densité) à une formulation semi-classique (qui fait intervenir les populations des sousbandes).

Plus tard, Willenberg [84] raffine le résultat en une expression au second ordre que nous utilisons ici. À noter que les résultats de Willenberg sont retrouvés grâce au formalisme des fonctions de Green [85]. Au second ordre, \mathcal{J}_T s'écrit :

$$\mathcal{J}_T = 2\Omega_T^2 \sum_k \frac{\gamma_i(k) \left(n_i(k) - n_j(q_+) \right) + \gamma_j(k) \left(n_i(q_-) - n_j(k) \right)}{(\omega_i^k - \omega_j^k)^2 + (\gamma_i(k) + \gamma_j(k))^2} \quad (2.30)$$

où $n_i(k)$ est la population dans la sousbande i de l'état k et $\gamma_i(k)$ est l'élargissement en énergie causé par les différents mécanismes de diffusion intrasousbande affectant cet état k . Les états q_{\pm} représentent les états tels que $\omega_i(k) = \omega_j(q_+)$ et $\omega_i(q_-) = \omega_j(k)$. On représente schématiquement ce processus tunnel dans la Figure 2.10-[c] : bien que le couplage tunnel Ω_T soit entre des états de même vecteur d'onde k , le transport étant assisté par les mécanismes de diffusion, une transition électronique s'effectue à énergie conservée.

De l'expression du courant tunnel net \mathcal{J}_T Eq.(2.30), on peut dégager deux contributions de courant particulaire contra-propageant, $\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}^{\text{Tunnel}}$ et $\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i}^{\text{Tunnel}}$, desquelles on peut extraire des taux de transition :

$$\mathcal{J}_T = \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}^{\text{Tunnel}} - \tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i}^{\text{Tunnel}} \quad (2.31)$$

$$\Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Tunnel}} = \frac{\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}^{\text{Tunnel}}}{n_i} \quad (2.32)$$

Ces taux viennent s'ajouter aux taux diffusifs présentés à la section précédente :

$$\Gamma_{i \rightarrow j} = \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Abs LO}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Em LO}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{LA}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Rugosité}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Alliage}} + \Gamma_{i \rightarrow j}^{\text{Tunnel}} \quad (2.33)$$

On a donc réussi à transformer un mécanisme de transport cohérent en un taux de transition ISB équivalent, traité de la même manière que les taux de diffusion décrits précédemment. Attention, les taux diffusifs (LO, rugosité...) sont ici calculés dans une base différente (la base localisée) que dans la section précédente, et prendront donc des valeurs différentes des résultats présentés Figure 2.8, calculés dans la base délocalisée. La Figure 2.10-[b] présente la

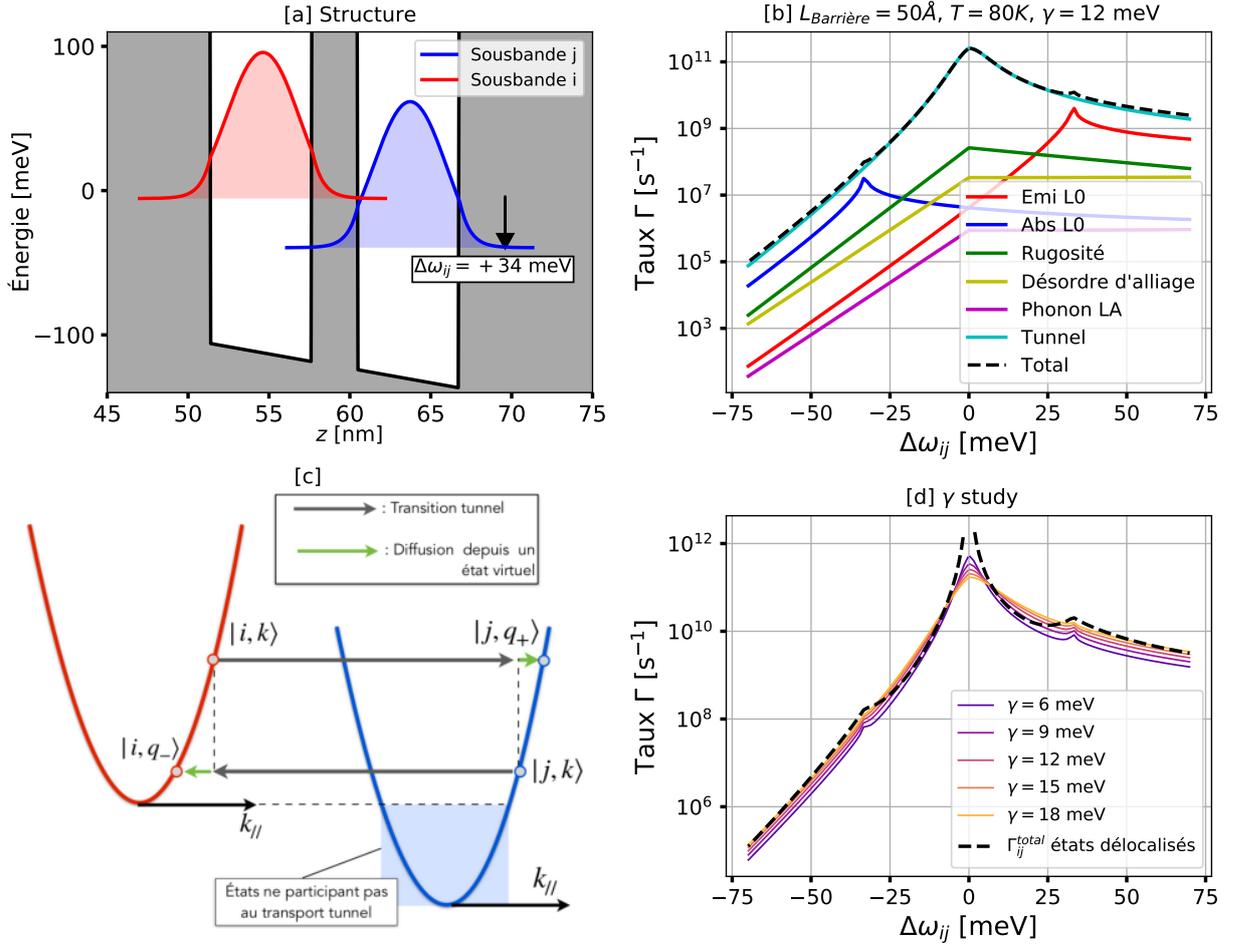


FIGURE 2.10 – [a] Structure modèle constituée de deux sousbandes, représentées dans une base localisée. Appliquer une tension V_{App} sur la structure permet de créer un désaccord d'énergie $\Delta\omega_{ij}$ entre les deux sousbandes. [b] Taux de diffusion pour toutes les contributions (émission phonon LO, absorption phonon LO, rugosité d'interface, désordre d'alliage et phonon LA et *tunnel*), en fonction du désaccord d'énergie entre les sousbandes. La courbe en tirets représente la somme totale de ces contributions. [c] Représentation schématique des transitions électroniques par les effets tunnels. [d] Évolution des taux de diffusion en fonction de l'élargissement γ (traits pleins colorés), et comparaison avec le taux de diffusion total calculé avec une base délocalisée.

décomposition de $\Gamma_{i \rightarrow j}$ en ces différents taux, en fonction de la différence d'énergie entre les

deux sousbandes (obtenue par application d'une tension sur la structure). Dans cette vision localisée du transport, les mécanismes tunnels entre les deux sousbandes sont prédominants, quelles que soient les conditions de température et de tension. Ce mécanisme est évidemment maximal lorsque les sousbandes sont résonnantes.

On notera que l'asymétrie des taux de transition tunnel en fonction du signe de $\Delta\omega_{ij}$ s'explique par la nécessité d'un état k de réaliser des transitions à énergie constante. Par conséquent, les états k tels que $\omega_i(k) < \omega_j(k' = 0)$ ne peuvent pas participer au transport tunnel, et les taux s'en retrouvent mécaniquement réduits par rapport à une situation où tous les états k pourraient participer. En d'autres termes, si une sousbande i possède des états k situés à plus faible énergie que l'état $k' = 0$ d'une autre sousbande j , ces états k ne peuvent pas participer au transport. La proportion d'états disponibles étant réduite, le courant tunnel s'en trouve mécaniquement réduit. On trouve une discussion détaillée sur cette asymétrie dans [70], p.187.

Dans la suite, on fera l'hypothèse que les élargissements des états k sont tous égaux : $\gamma_i(k) = \gamma_j(k) = \gamma$, quel que soit k , et cette valeur γ est contrainte en entrée du calcul. Dans les systèmes $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$, cette valeur est estimée autour d'une dizaine de meV.

La Figure 2.10-[d] est un exemple de comparaison entre le calcul des taux dans une base délocalisée et une base localisée, pour différentes valeurs de γ . Loin de la résonance, les calculs dans les deux bases évoluent de manière similaire avec la tension, et avec des amplitudes comparables. C'est autour de la résonance que les comportements divergent. Lorsque γ augmente, la forme générale des taux de transition s'aplatit, avec des effets modérés mais non-négligeables : diminution d'amplitude autour de la résonance, augmentation loin de la résonance. À noter qu'autour de la résonance, le taux Γ calculé dans la base localisée converge vers le taux calculé dans la base délocalisée lorsque $\gamma \rightarrow 0$.

2.2.4 Populations électroniques

Dans les sections précédentes, nous avons déterminé les courants particuliers et les taux de transitions inter-sousbandes de chacun des mécanismes perturbatifs, calculés dans chacune des bases de représentation des sousbandes électroniques. Dans cette section, nous allons construire un système d'équations bilans, qui après résolution, nous permettra d'obtenir les populations électroniques de chaque sousbande [44, 71].

On considère une structure de bande constituée de N_p périodes similaires. On fait l'hypothèse que les fonctions d'onde appartenant à une période p n'interagissent qu'avec les fonctions d'onde appartenant aux périodes adjacentes $p - 1$ et $p + 1$ (hypothèse raisonnable si on regarde les calculs de la Figure 2.11 : les interactions sont généralement négligeables si les fonctions d'onde ne sont pas dans des puits adjacents). Si le nombre de périodes est suffisamment élevé (en pratique, $N_p > 5$ environ), on peut également négliger les contributions des contacts de part et d'autre de la structure (généralement des puits larges $\approx 100\text{nm}$ d'InGaAs). La Figure 2.11 est une représentation d'une structure de bande typique d'un QCD, dans laquelle on a représenté les taux d'interactions les plus importants. Les traits gras représentent les taux d'interactions prédominants, dans le cas d'une structure

bien conçue. Les taux non représentés sont généralement négligeables.

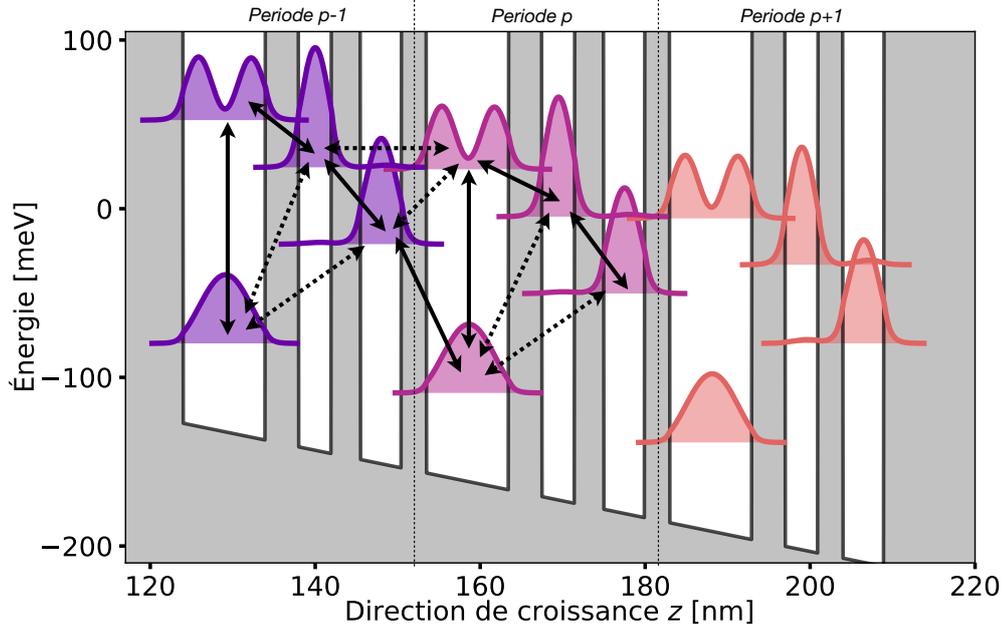


FIGURE 2.11 – Représentation d'une structure de bande classique d'un QCD InGaAs/AlInAs. Les flèches pleines indiquent les transitions électroniques principales, les flèches en pointillées les transitions de plus faible amplitude.

On considère N sousbandes par périodes, qu'on indice de la manière suivante : les sousbandes appartenant à la période $p - 1$ seront indicées entre 1 et N , celles de la période p entre $N + 1$ et $2N$ et celles de $p + 1$ entre $2N + 1$ et $3N$. L'évolution de la population d'une sousbande i appartenant à la période p composée de N sousbandes est donc donnée par l'équation bilan :

$$\frac{dn_i}{dt} = \underbrace{\sum_{j=1}^N \left(\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} \right)}_{\text{Contributions de } p-1} + \underbrace{\sum_{\substack{j=N+1 \\ j \neq i}}^{2N} \left(\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} \right)}_{\text{Contributions } p} + \underbrace{\sum_{j=2N+1}^{3N} \left(\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} \right)}_{\text{Contributions } p+1} \quad (2.34)$$

Le système étant périodique, $\tilde{\Gamma}_{(i \in p) \rightarrow (j \in p+1)} = \tilde{\Gamma}_{(i \in p-1) \rightarrow (j \in p)}$, et on peut donc restreindre le calcul des taux particuliers à seulement deux périodes adjacentes. En ré-indexant l'équation (2.34), on obtient donc :

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j=N+1}^{2N} \left(\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i+N} - \tilde{\Gamma}_{i+N \rightarrow j} \right) + \sum_{\substack{j=N+1 \\ j \neq i}}^{2N} \left(\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} \right) + \sum_{j=N+1}^{2N} \left(\tilde{\Gamma}_{j+N \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j+N} \right) \quad (2.35)$$

Par périodicité, on a également $n_{(i \in p)} = n_{(i \in p+1)}$, ce qui permet de restreindre le système d'équation (2.34) à une unique période (et donc de passer de $3N$ équations à N équations) :

$$\boxed{\frac{dn_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i} + \tilde{\Gamma}_{j+N \rightarrow i} + \tilde{\Gamma}_{j \rightarrow i+N} - (\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} + \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j+N} + \tilde{\Gamma}_{i+N \rightarrow j}) \right)} \quad (2.36)$$

On obtient donc un système d'équations de taille N non-linéaire, puisque les courants particuliers $\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}$ sont des fonctions implicites des populations des sousbandes i et j (ils dépendant des statistiques de distribution f , voir Eq.(2.22)). Une première manière de linéariser le système est d'utiliser la statistique f_{MB} de Maxwell-Boltzmann : utilisable pour de fortes températures et lorsque le niveau de Fermi est très inférieur aux niveaux électroniques, elle permet de factoriser explicitement les termes de population :

$$\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j} = \Gamma_{i \rightarrow j} n_i \quad (2.37)$$

tel que, dans ce cas, les $\Gamma_{i \rightarrow j}$ sont totalement indépendants des populations n_i, n_j . En introduisant :

$$\gamma_{j \rightarrow i} = \Gamma_{j \rightarrow i+N} + \Gamma_{j+N \rightarrow i} + \Gamma_{j \rightarrow i+N} \quad (2.38)$$

$$\gamma_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\Gamma_{i \rightarrow j} + \Gamma_{i \rightarrow j+N} + \Gamma_{i+N \rightarrow j}) \quad (2.39)$$

l'équation (2.34) prend la forme matricielle suivante (pour N sousbandes par période) :

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \dots \\ n_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\gamma_1 & \gamma_{2 \rightarrow 1} & \gamma_{3 \rightarrow 1} & \dots & \gamma_{N \rightarrow 1} \\ \gamma_{1 \rightarrow 2} & -\gamma_2 & \gamma_{3 \rightarrow 2} & \dots & \gamma_{N \rightarrow 2} \\ \gamma_{1 \rightarrow 3} & \gamma_{2 \rightarrow 3} & -\gamma_3 & \dots & \gamma_{N \rightarrow 3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{1 \rightarrow N} & \gamma_{2 \rightarrow N} & \gamma_{3 \rightarrow N} & \dots & -\gamma_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \\ n_N \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

Dans la suite, on considère un régime de fonctionnement stationnaire. Pour que notre système d'équations soit correctement défini, on remplace la dernière équation par l'équation de conservation de la charge $\sum_{i=1}^N n_i = n_{\text{dop}}$, qui stipule simplement que la somme des densités de population des sousbandes électroniques est égale à la densité de dopants électriques n_{dop} introduits sur une période (et dans l'hypothèse de totale ionisation). Expérimentalement, il est commun d'observer des variations de l'ordre de $\pm 20\%$ sur les valeurs de dopage. Le système d'équation Eq.(2.40) devient donc un simple système d'équations linéaires portant sur les populations :

$$\begin{bmatrix} -\gamma_1 & \gamma_{2 \rightarrow 1} & \gamma_{3 \rightarrow 1} & \dots & \gamma_{N \rightarrow 1} \\ \gamma_{1 \rightarrow 2} & -\gamma_2 & \gamma_{3 \rightarrow 2} & \dots & \gamma_{N \rightarrow 2} \\ \gamma_{1 \rightarrow 3} & \gamma_{2 \rightarrow 3} & -\gamma_3 & \dots & \gamma_{N \rightarrow 3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \\ n_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ n_{\text{dop}} \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

Un même système d'équation peut être construit dans le cas d'une statistique de Fermi-Dirac, à condition d'utiliser un schéma de résolution auto-cohérent : à partir d'une certaine distribution initiale $\{n_i^0\}$, on calcule les taux de transition $\Gamma_{i \rightarrow j} = \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow j}(n_i^0, n_j^0)/n_i^0$, puis on résout le système d'équations (2.41) appliqué à une nouvelle itération des populations $\{n_i^1\}$. Avec ces nouvelles populations, on reprend les étapes précédentes, et on calcule les de nouvelles populations jusqu'à convergence.

2.3 Équation de Poisson

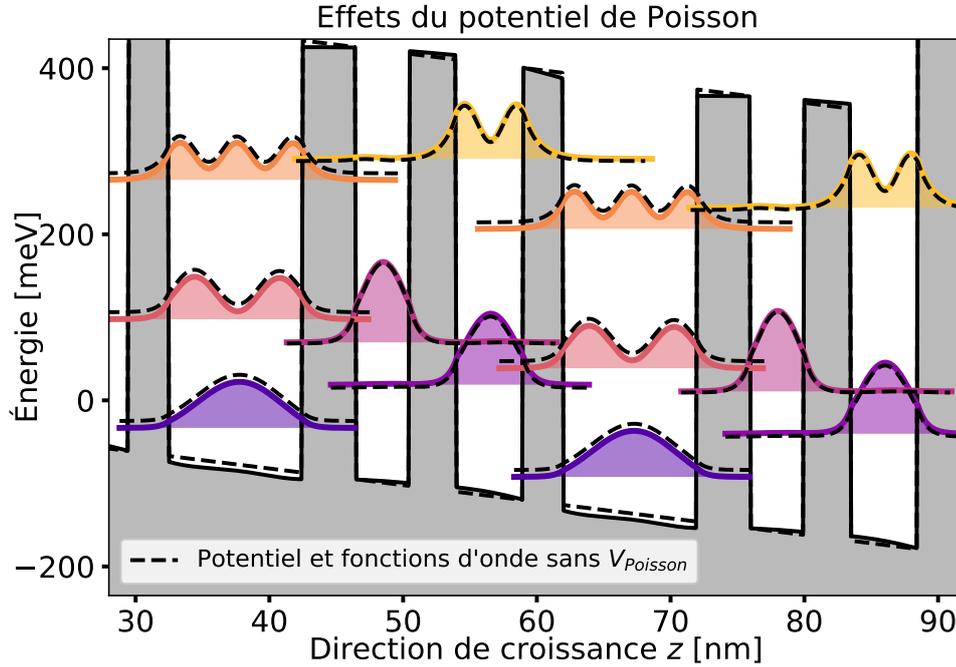


FIGURE 2.12 – Représentation du potentiel et des fonctions d'onde avec (traits pleins et colorés) et sans (traits pointillés) la prise en compte du potentiel de Poisson. Les puits les plus larges sont dopés à $n_{\text{dop}}^{2\text{D}} = 2e12 \text{ cm}^{-2}$, et la structure est calculée pour $T = 300\text{K}$.

Dans la section précédente, on a obtenu les populations électroniques stationnaires de chaque sousbande. Si la conservation de la charge électrique totale du système est assurée, les mouvements de charge dus au transport ISB peuvent provoquer des fluctuations locales de la neutralité électrique et engendrer des variations de potentiel. L'équation de Poisson sur le potentiel Φ généré par ces charges nettes est :

$$\frac{d^2 V_{\text{Poisson}}(z)}{dz^2} = \frac{n_{\text{dop}}(z) - n(z)}{\epsilon(z)\epsilon_0} \quad (2.42)$$

où $\epsilon(z)$ est la permittivité relative du matériau de la couche située en z , et $n(z)$ est la densité électronique en z donnée par :

$$n(z) = \sum_{i=1}^N n_i |\phi_i(z)|^2 \quad (2.43)$$

À l'aide de la méthode des différences finies appliquée à un maillage de la direction de croissance z , on peut dresser un système linéaire d'équations portant sur le potentiel V_{Poisson} . Une fois calculé, le potentiel de Poisson peut être réinjecté dans l'Hamiltonien \mathcal{H}_0 : on recalcule alors les fonctions d'onde $\phi_i(z)$, les taux $\Gamma_{i \rightarrow j}$ et les populations n_i . On ré-injecte ces populations dans l'équation de Poisson (2.43), et on continue ce calcul itératif auto-cohérent

jusqu'à convergence. À la convergence, on a finalement une distribution de potentiel, de fonctions d'onde et de populations, représentative du système. La Figure 2.12 représente les effets du potentiel de Poisson : les traits pleins et les fonctions d'onde représentées en couleur sont calculées après convergence, pour un dopage du puits principal $n_{2D} = 2e12 \text{ cm}^{-2}$, et les traits pointillés représentent la même structure, mais sans l'ajout du calcul de V_{Poisson} . Les effets du potentiel de Poisson sont évidemment d'autant plus marqués que le dopage de la structure est fort et que la température est élevée. La Figure 2.13 récapitule et illustre les différentes étapes du calcul auto-cohérent d'une hétérostructure périodique :

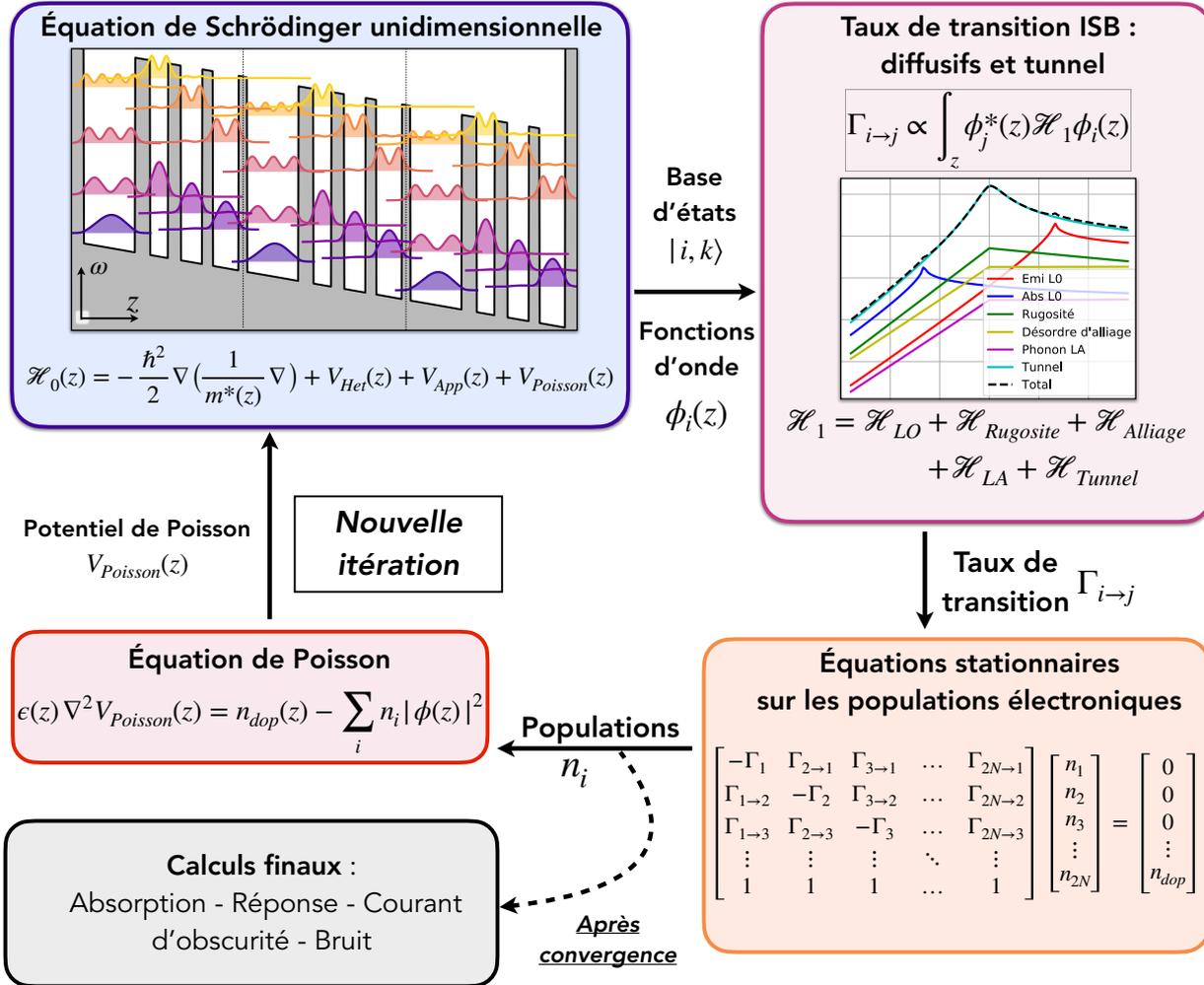


FIGURE 2.13 – Illustration des différentes étapes de calcul d'une hétérostructure périodique.

2.4 Performances d'un QCD

Dans les sections précédentes, nous avons progressivement construit le formalisme théorique permettant la description du fonctionnement de nos dispositifs ISB, et en particulier des QCDs. L'objectif des sections suivantes est d'appliquer ce formalisme à la description de

données expérimentales, en calculant les principales grandeurs physiques de nos systèmes : courant d’obscurité, absorption et photo-réponse.

Dans un premier temps, nous allons donc décrire le principe de calcul de ces différentes grandeurs et nous les illustrerons en présentant quelques jeux de mesures expérimentales. La comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux se fera ensuite. La problématique du reste de ce chapitre s’articule donc autour de notre volonté de modéliser nos systèmes ISB de manière prédictive et quantitative.

2.4.1 Courant d’obscurité et énergie d’activation

Courant d’obscurité

Le courant d’obscurité J_{Dark} , que l’on prendra surfacique (d’unité $A.cm^{-2}$), est la conséquence de l’activation thermique des porteurs présents dans le niveau bas des puits dopés et leur transport à travers la structure. Il est calculé à partir du bilan de flux particulaire traversant une tranche z_0 de la structure : on compte comme positif un flux particulaire provenant d’une fonction d’onde i dont le barycentre z_i est tel que $z_i < z_0$, et dont la destination est une fonction d’onde j dont le barycentre z_j est tel que $z_j > z_0$:

$$J_{\text{dark}} = q \sum_{\substack{i \\ z_i < z_0}} \sum_{\substack{j \\ z_j > z_0}} (\Gamma_{i \rightarrow j} n_i - \Gamma_{j \rightarrow i} n_j) \quad (2.44)$$

La Figure 2.14 présente des courbes expérimentales de densité surfacique de courant d’obscurité² (courbes pointillées), en fonction d’un champ électrique appliqué F et pour plusieurs valeurs de température. Nous prendrons comme convention qu’un champ électrique négatif correspond à une chute de tension négative du potentiel (si $z_1 < z_2$, alors $V_{\text{App}}(z_1) > V_{\text{App}}(z_2)$). Deux structures de QCD sont étudiées (l’agencement des périodes est décrit dans la légende de la Figure 2.14), un QCD conçu pour une détection à $\lambda = 9 \mu m$, et un autre pour $\lambda = 8 \mu m$. Quelques observations :

- À l’équilibre thermodynamique ($F = 0$), le courant d’obscurité est nul. Cette observation expérimentale sera reproduite par la micro-reversibilité des équations de populations, qui impose un courant d’obscurité net nul, quel que soit la température.
- On observe un comportement asymétrique du courant d’obscurité avec le signe du champ électrique appliqué, conséquence de l’asymétrie de la structure de bande :
 - À champ électrique positif, on déverse les électrons du puits $A1$ dans la cascade de la période précédente, dont les niveaux s’alignent progressivement. Ce régime de courant exponentiel (assimilable au fonctionnement d’une diode polarisée en direct) génère des courants importants, incompatibles avec le bon fonctionnement d’un détecteur.
 - Le régime de polarisation négative est plus intéressant. Sous cette polarisation, le courant est principalement dominé par la transition ISB entre le niveau bas du puits optique $A1$, et le niveau haut $A2$: si la structure de bande est bien conçue, les transitions parasites diagonales $A1 \rightarrow A3$ et $A1 \rightarrow A4$ sont négligeables proche de $F = 0$. Pour la transition $A1 \rightarrow A2$, les mécanismes d’absorption de phonon

2. Merci à G. Quinchard (III-Vlab, pour la structure 1) et M. Jeannin (C2N, pour la structure 2) pour ces caractérisations électriques.

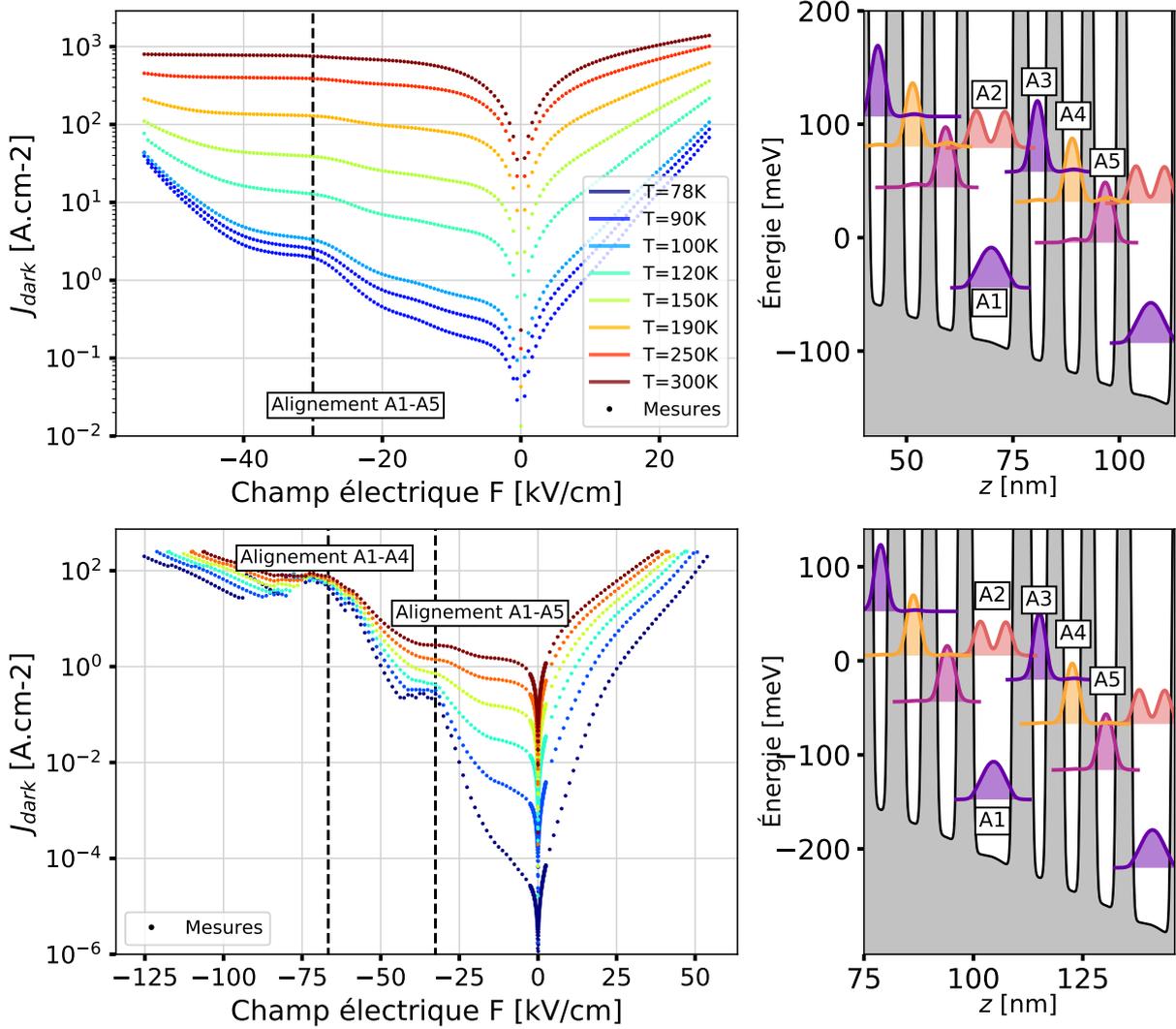


FIGURE 2.14 – Densités de courant surfacique en fonction du champ électrique F appliqué, pour différentes températures, mesurées pour deux structures (ligne 1 et 2). Les structures de bandes sont également représentées. **Structure 1** : 107/36/39/38/42/28/53/25 (en gras les puits d'InGaAs, en normal les barrières, en souligné le puits optique dopé à $n_{2D} = 5e11 \text{ cm}^{-2}$). **Structure 2** : 90/45/33/39/39/34/47/46, dopé à $n_{2D} = 3e11 \text{ cm}^{-2}$.

LO prédominant : seuls les électrons situés à au moins un phonon $\omega_{LO} = 33 \text{ meV}$ de la sousbande $A2$ participent au transport (Figure 2.15). Ces contributions sont donc d'autant plus importantes que la température du système augmente (la distribution f de Fermi-Dirac s'étale vers les hautes énergies) et que le nombre d'électrons dans la sousbande $A1$ est grand (un niveau de Fermi plus haut offset la distribution vers les hautes énergies). Cette prédominance des mécanismes LO est également la raison pour laquelle on observe un quasi-plateau de courant dans les régions $F = [-30 : 0] \text{ kV.cm}^{-1}$: le courant étant majoritairement imputable au transport entre les deux sousbandes d'un même puits $A1$ et $A2$, il est peu influencé par l'action d'un champ électrique.

- À plus fort champ, et notamment autour d'environ -40 kV.cm^{-1} pour les deux structures, et autour de -70 kV.cm^{-1} pour la seconde structure, on observe un pic de courant d'obscurité. Ces pics sont la signature d'un alignement du niveau bas A1 avec le niveau de la cascade A5 (puis A4 pour la seconde structure et le second pic). Cet alignement est responsable de l'activation d'un canal de courant tunnel résonnant entre les deux sousbandes. Cet effet est d'autant plus prononcé à faible température, lorsque l'amplitude du courant généré par les phonons LO est faible.

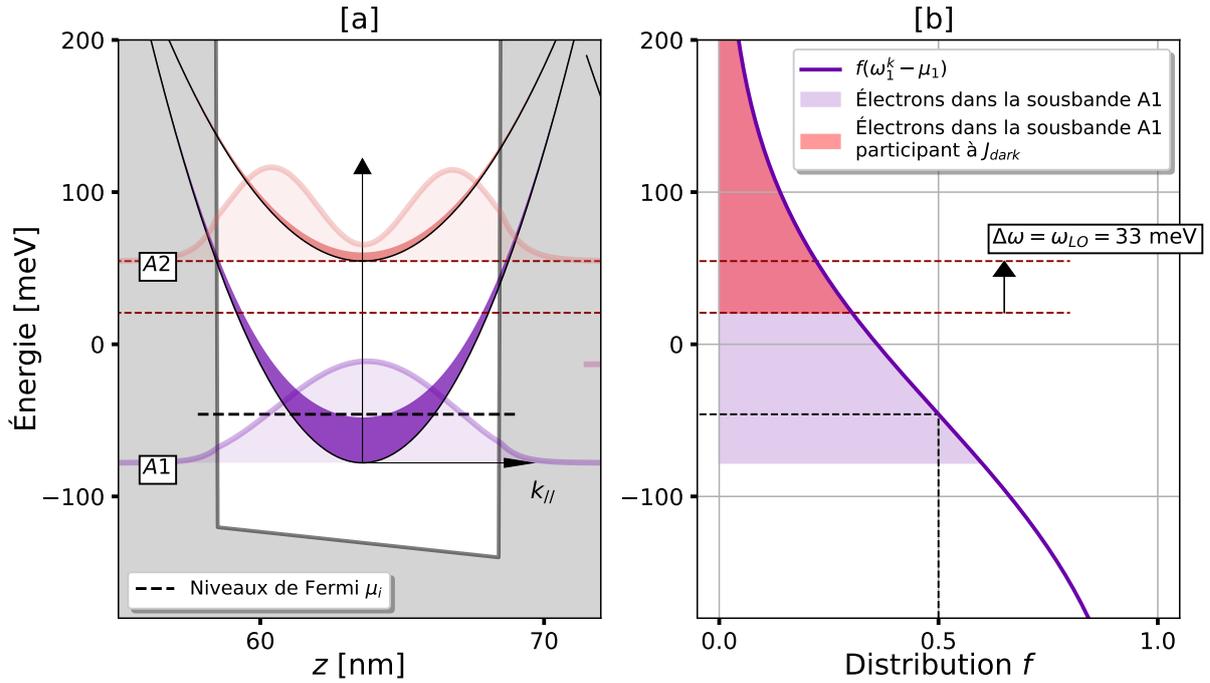


FIGURE 2.15 – [a] Représentation schématisée de la dispersion des deux sousbandes. Les zones pleines représentent la distribution électronique au sein de chaque sousbande. [b] Représentation des distributions d'électrons au sein de la sousbande fondamentale et de la fraction de cette population qui participe activement au transport par diffusion de phonons LO, avec illustration des niveaux d'énergie importants.

Dans le chapitre suivant, nous verrons comment le courant d'obscurité, et plus précisément les courants d'obscurité contra-propageants, interviennent dans les performances de nos QCDs, par l'intermédiaire du bruit, la grandeur physique qui quantifie les fluctuations de nos grandeurs physiques mesurables, et qui conditionne *de facto* notre capacité à les mesurer.

Énergie d'activation

L'énergie d'activation E_A est l'énergie thermique à fournir à un électron pour qu'il puisse être activé et contribuer au transport sous obscurité. On l'évalue par une loi d'Arrhenius d'activation thermique :

$$J_{\text{dark}}(F, T) = J_0(F) \exp\left(-\frac{E_A(F)}{k_B T}\right) \quad (2.45)$$

L'énergie d'activation est intrinsèquement liée à deux grandeurs :

- l'énergie de transition ISB ω_{ISB} : pour activer thermiquement un électron, il faut qu'il soit capable de passer de la sousbande fondamentale à la sousbande excitée.
- la position du niveau de Fermi μ : si le dopage est élevé, les électrons se distribuent loin dans la sousbande fondamentale, et l'énergie d'activation s'en trouve diminuée. La position moyenne de cette distribution est l'énergie de Fermi.

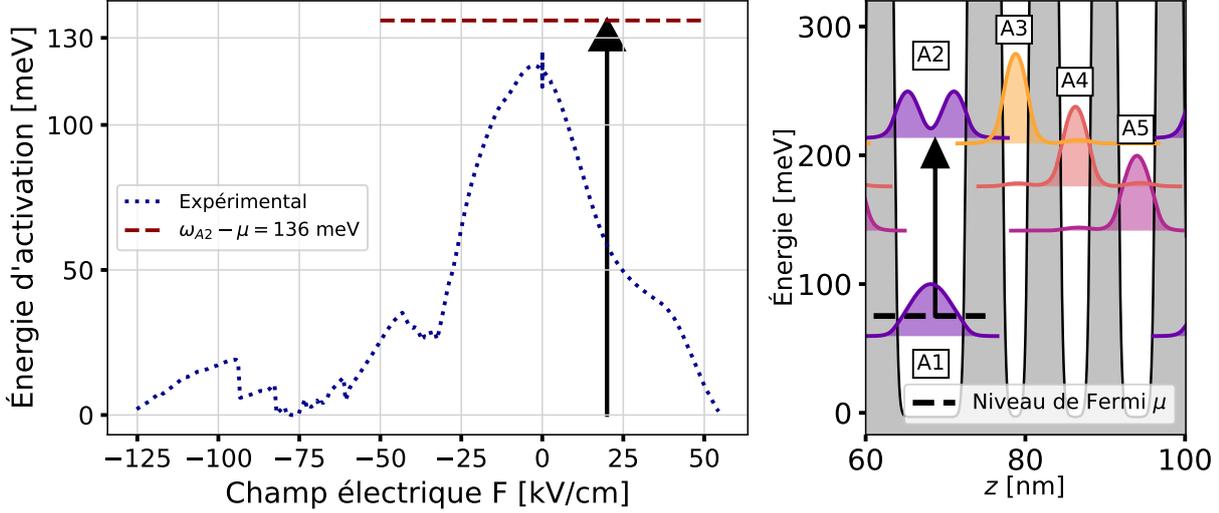


FIGURE 2.16 – Énergie d'activation en fonction du champ électrique F appliqué, données expérimentales (trait pointillé). La différence d'énergie entre le niveau de Fermi et le niveau excité $A2$ de la transition ISB est représenté par la flèche. La structure de bande du dispositif étudié est également tracée ($n_{2D} = 3e11 \text{ cm}^{-2}$).

En pratique, l'énergie d'activation est donc souvent approximée par :

$$E_A = \omega_{A2} - \mu \quad (2.46)$$

où ω_{A2} est l'énergie de la sousbande excitée. À 0V, lorsque la transition *dark* prédominante est la transition ISB, la relation précédente donne généralement une bonne approximation de l'énergie d'activation. En revanche, lorsqu'on applique une tension au bord du dispositif, et qu'on active des transitions supplémentaires, la formule précédente n'est généralement plus valide et on utilise l'équation (2.45).

La Figure 2.16 représente l'énergie d'activation E_A en fonction du champ appliqué F , extraite des données expérimentales de courant d'obscurité de la structure 2 étudiée précédemment (voir Figure 2.14). On constate que proche de l'équilibre thermodynamique $F = 0$, la valeur de l'énergie d'activation est effectivement proche de la différence $\omega_{A2} - \mu$ entre le niveau excité et le niveau de Fermi (environ 136 meV contre 130 meV). Lorsqu'on s'éloigne de l'équilibre thermodynamique, les transitions diagonales s'activent, et la valeur de l'énergie d'activation chute. En particulier, autour de -36 et -70 kV.cm^{-1} , l'énergie d'activation s'affaisse : ces énergies correspondent aux alignements $A1-A5$ et $A1-A4$, déjà observés dans le cas des pics de courant d'obscurité.

2.4.2 Absorption et réponse

Absorption

Dans cette section, on s'intéresse au phénomène d'absorption dans les puits quantiques dopés d'un QCD. Si en toute rigueur on peut calculer les contributions optiques pour chaque couple de transition i, j , on ne s'intéressera qu'à la contribution entre l'état fondamental $|0\rangle$ et l'état excité $|1\rangle$ d'un puits dopé, prédominante dans une structure standard et bien conçue d'un QCD.

Un photon incident à une énergie ω peut être absorbé par un électron du niveau fondamental $|0\rangle$, et générer une transition vers le niveau excité $|1\rangle$. Un photo-électron dans le niveau haut de la transition peut également se désexciter, et émettre un photon³. Ces deux mécanismes sont associés aux Hamiltoniens \mathcal{H}_{Abs} et \mathcal{H}_{Em} , et leurs courants particuliers respectifs $\tilde{\Gamma}_{0\rightarrow 1}^{\text{Abs}}$ et $\tilde{\Gamma}_{1\rightarrow 0}^{\text{Em}}$, calculés par la méthode des perturbations :

$$\tilde{\Gamma}_{0\rightarrow 1}^{\text{Abs}} = \int dk' \int dk \underbrace{\left| \langle j, k' | \mathcal{H}_{\text{Abs}}^{k, k'} | i, k \rangle \right|^2}_{\text{Probabilité de transition}} \underbrace{\mathcal{L}(\omega_i^k - \omega_j^{k'} - \omega, \Gamma)}_{\text{Densité population } i} \underbrace{\rho_{2\text{D}}^i(k) f(\omega_i^k - \mu_i)}_{\text{Densité états vacants } j} \underbrace{\left(1 - f(\omega_j^{k'} - \mu_j) \right)}_{\text{Densité états vacants } j} \quad (2.47)$$

expression très similaire aux courant particuliers dus aux mécanismes diffusifs de l'équation (2.25), la fonction Dirac $\delta(\omega_i^k - \omega_j^{k'})$ étant remplacée par une fonction Lorentzienne d'élargissement non-nul Γ :

$$\mathcal{L}(\omega_i^k - \omega_j^{k'} - \omega) = \frac{\Gamma^2}{(\omega_i^k - \omega_j^{k'} - \omega)^2 + \Gamma^2} \quad (2.48)$$

où $\frac{1}{\Gamma}$ représente le temps de vie fini associé à la transition ISB, généré par la décohérence des mécanismes inter et intra-sousbandes. On définit alors l'absorption linéique α_{abs} (souvent exprimée en cm^{-1}) :

$$\alpha_{\text{abs}} = \frac{\omega}{L_p} \frac{(\tilde{\Gamma}_{0\rightarrow 1}^{\text{Abs}} - \tilde{\Gamma}_{1\rightarrow 0}^{\text{Em}})}{P_{\text{inc}}} \quad (2.49)$$

où P_{inc} désigne la puissance incidente du signal optique, et L_p la longueur d'une période. En pratique, pour calculer l'absorption α_{abs} , on calcule d'abord les taux de transition associés au pompage optique $\Gamma_{0\rightarrow 1}^{\text{Abs}}$ et $\Gamma_{1\rightarrow 0}^{\text{Em}}$. On les injecte ensuite dans les équations de bilan de population (2.35), et on re-calcule les populations sous éclairage, ce qui nous permet d'exprimer les courants particuliers $\tilde{\Gamma}$ et l'absorption.

3. On se place dans l'approximation du champ tournant : les termes anti-résonnants (absorption d'un photon qui génère une désexcitation d'électron, et émission d'un photon qui génère l'excitation d'un électron) sont négligés par rapport aux mécanismes résonnants.

Réponse

La photo-réponse \mathcal{R} d'un détecteur décrit la capacité de ce détecteur à convertir une puissance incidente lumineuse en un courant électrique mesurable. Elle s'exprime de la manière suivante :

$$\mathcal{R}(\omega) = q \frac{J_{\text{lum}} - J_{\text{dark}}}{P_{\text{inc}}} \quad (2.50)$$

où J_{lum} désigne le courant calculé de la même manière que dans l'équation (2.44), mais avec les mécanismes optiques activés, et où q représente la charge électrique d'un électron. Ce photo-courant est le résultat d'une modification du transport dans la globalité de la structure (modification des populations de toutes les sousbandes), et non juste le résultat du transport entre les sousbandes de la transition ISB optique. Pour illustrer que la réponse est effectivement une fonction qui dépend du transport dans l'intégralité de la structure, elle est souvent ré-écrite sous la forme suivante :

$$\mathcal{R}(\omega) = q \frac{L_p p_E}{\omega N_p} \alpha_{\text{abs}}(\omega) \quad (2.51)$$

où N_p est le nombre de périodes dans la structure. p_E est la probabilité d'extraction sur une période, c'est-à-dire la probabilité qu'un électron excité dans le niveau excité de la transition optique soit extrait, via la cascade électronique, dans le niveau fondamental de la période suivante⁴. Il est importante de noter que l'électron n'a pas besoin de naviguer à travers toutes les périodes de la structure pour générer un courant électrique : une vision naïve du transport voudrait que l'efficacité quantique interne soit égale à $p_E^{N_p}$ (N_p extraction successives), ce qui est faux. La simple extraction d'un photo-électron sur la distance d'une période suffit à créer un déplacement de charge, et donc à générer un courant. Le facteur $1/N_p$ illustre cette idée : le courant électrique généré est subtilement relié à la longueur d'une période [86], c'est-à-dire $1/N_p$ de la longueur totale du dispositif (cf. [87] pour une discussion plus en profondeur sur l'efficacité quantique et sa dépendance à N_p). Nous verrons dans la section 2.5.1 comment calculer p_E .

En pratique, photo-réponse et absorption doivent être calculées pour chaque valeur spectrale ω , et pour chaque itération, un système d'équations portant sur les populations sous éclairage doit être résolu, ce qui peut rapidement devenir coûteux en temps de calcul. La Figure 2.17 présente des spectres expérimentaux normalisés de photo-réponse, mesurés à $T = 78K$, pour plusieurs champs électrique F appliqués. Deux structures sont étudiées :

- Les spectres de photo-réponse de la première structure (première ligne) ne présentent qu'un seul pic de résonance, situé autour de $\omega = 164$ meV, ce qui correspond à l'espacement entre les deux niveaux du puits optique dopé $A1$ et $A2$. Ce pic de résonance est constant quel que soit le champ électrique appliqué : la transition ISB est peu affectée par les effets du champ, les fonctions d'onde étant situées dans le même puits. On note également que les élargissements optiques des spectres sont constants avec le champ appliqué.

4. $1 - p_E$ représente donc la probabilité qu'un électron dans le niveau excité de la transition optique se désexcite dans le niveau fondamental de la même transition, où il est perdu.

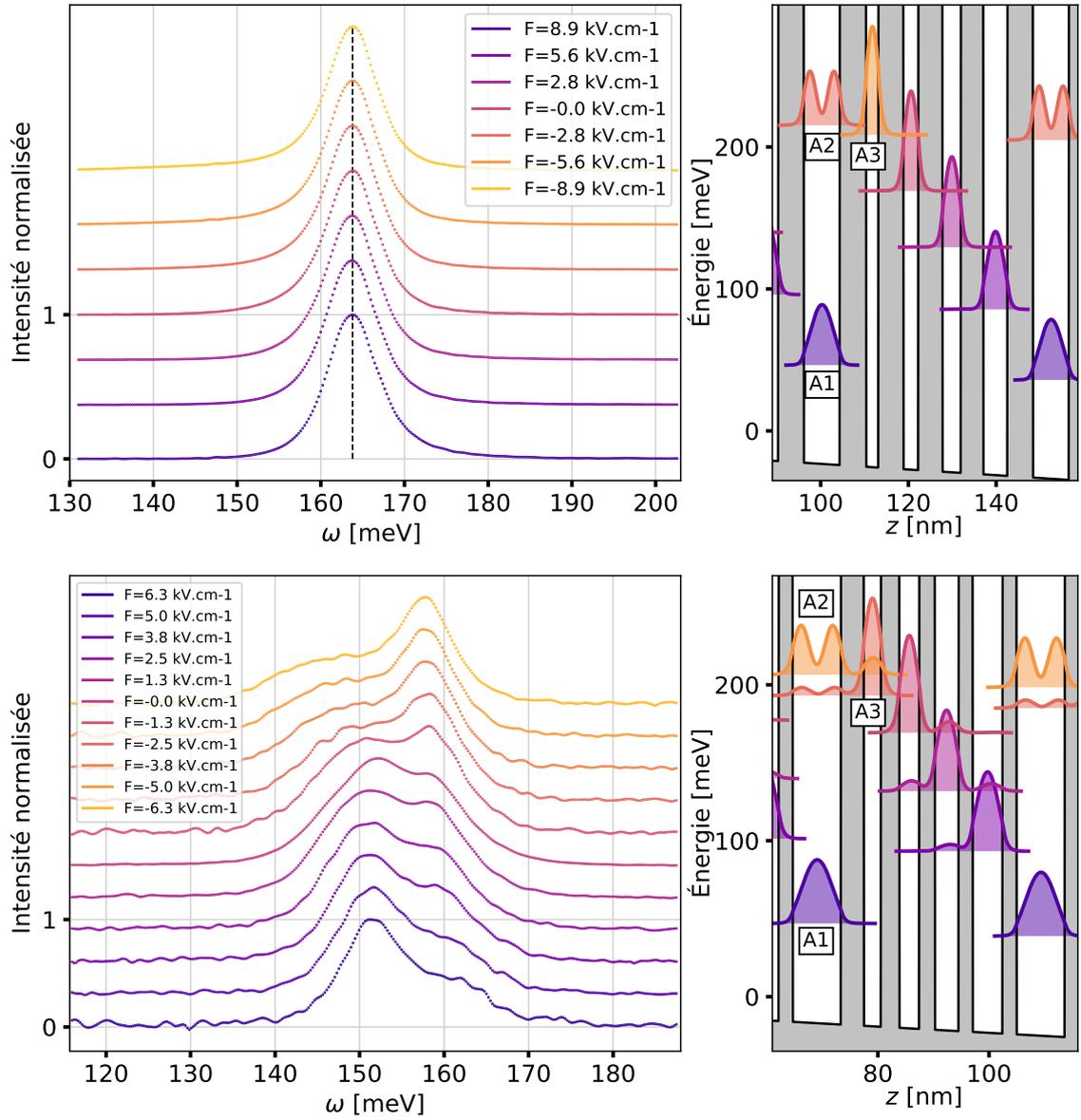


FIGURE 2.17 – Mesures de photo-courant normalisées (traits pointillés) pour différentes valeurs de champ électrique F appliqué, pour deux structures de QCD, dont les premiers niveaux de la cascade sont [première ligne] peu couplés ($\Omega_T = 1$ meV) [seconde ligne] couplés ($\Omega_T = 4.3$ meV). Les mesures ont été réalisées à 78K.

- Pour la seconde structure, on observe deux pics de résonances, dont les positions et les amplitudes relatives dépendent du champ électrique appliqué. Pour un champ de signe négatif, le pic situé à plus haute énergie est d'amplitude plus élevée que le pic situé à basse énergie. Cette tendance s'inverse autour de $F = 0$ et s'accroît pour les

champs de signe positif. À $F = 0$, les pics sont d'amplitudes égales, et espacés d'un peu moins d'une dizaine de meV.

Ces différences de comportement spectraux s'interprètent facilement lorsqu'on met en vis-à-vis les structures de bande. Dans la première structure, la barrière qui sépare $A2$ et $A3$ est épaisse (60 Å) : les deux sousbandes étant éloignées spatialement, elles sont peu couplées (on calcule $\Omega_T = 1$ meV). Une représentation localisée est adaptée : les deux sousbandes sont localisées dans leur puits respectifs, et interagissent via des mécanismes de type tunnel résonnant. Seule la sousbande $A2$ est couplée au rayonnement optique incident et on a donc un seul pic de résonance dans le spectre de photo-réponse.

Dans la seconde structure, la barrière séparant $A2$ et $A3$ est moins épaisse (seulement 41 Å). Cette fois-ci, le couplage tunnel est plus important ($\Omega_T = 4.3$ meV). La représentation localisée adoptée précédemment n'est plus possible : les deux sousbandes interagissent suffisamment via le couplage tunnel pour se délocaliser dans les puits adjacents. Dans cette base, la force d'oscillateur est partagée entre les deux sousbandes, avec pour conséquence l'apparition d'un second pic dans les spectres d'absorption et de réponse. Les deux pics sont centrés sur les niveaux des sousbandes délocalisées. La variation du champ électrique entraîne deux effets sur les spectres : 1) les sousbandes $A1$ et $A2$ se désalignent, ce qui affecte la position des pics 2) l'amplitude de l'interaction tunnel est modifiée⁵, ce qui modifie l'amplitude relative des pics. Loin de la résonance entre $A1$ et $A2$, les sousbandes sont peu affectées par le couplage tunnel. La sousbande $A1$ est majoritairement localisée dans le puits optique, et contient l'essentiel de la force d'oscillateur. Cela se manifeste par une forte amplitude de la résonance associée à $A1$, relativement au pic $A2$. C'est ce qu'on observe à fort champ négatif : la sousbande $A1$ est plus haute en énergie que $A2$, et c'est bien le pic de haute énergie qui est prépondérant. On a le raisonnement inverse à fort champ positif, où la sousbande $A2$ passe au-dessus de $A1$. À résonance, les champs sont équitablement délocalisés, et les pics sont de même amplitude.

2.5 Capacité prédictive et évolution du modèle

À ce stade du chapitre, nous avons présenté l'intégralité du modèle de transport électronique qui a été développé au sein de l'équipe MIR du III-Vlab, *avant* le début de ces travaux de thèse. L'objectif du reste de ce chapitre est d'illustrer les capacités de calcul de ce modèle en l'appliquant à des données expérimentales. Si au début de ces travaux de thèse, le modèle convergeait déjà vers de bons accords entre théorie/expérience, nous discuterons tout de même de certaines de ses lacunes et de son incapacité à reproduire certaines observations expérimentales. Dans un second temps, nous présenterons alors les évolutions du modèle qui ont été implémentées durant cette thèse pour remédier à ces lacunes, et nous verrons comment ces nouveaux développements permettent d'obtenir d'excellents accords entre simulations et expériences.

La Figure 2.18 illustre les capacités prédictives du modèle *avant les nouveaux développements* implémentés pendant ces travaux de thèse, dans le cas de mesures de courant d'obscurité [a] et de mesures de photo-courant [b]. Le modèle donnait déjà de bons résultats :

5. Attention : Ω_T reste inchangé lorsque le champ varie, mais le désalignement des niveaux affecte la capacité des fonctions d'onde à se délocaliser dans les puits adjacents.

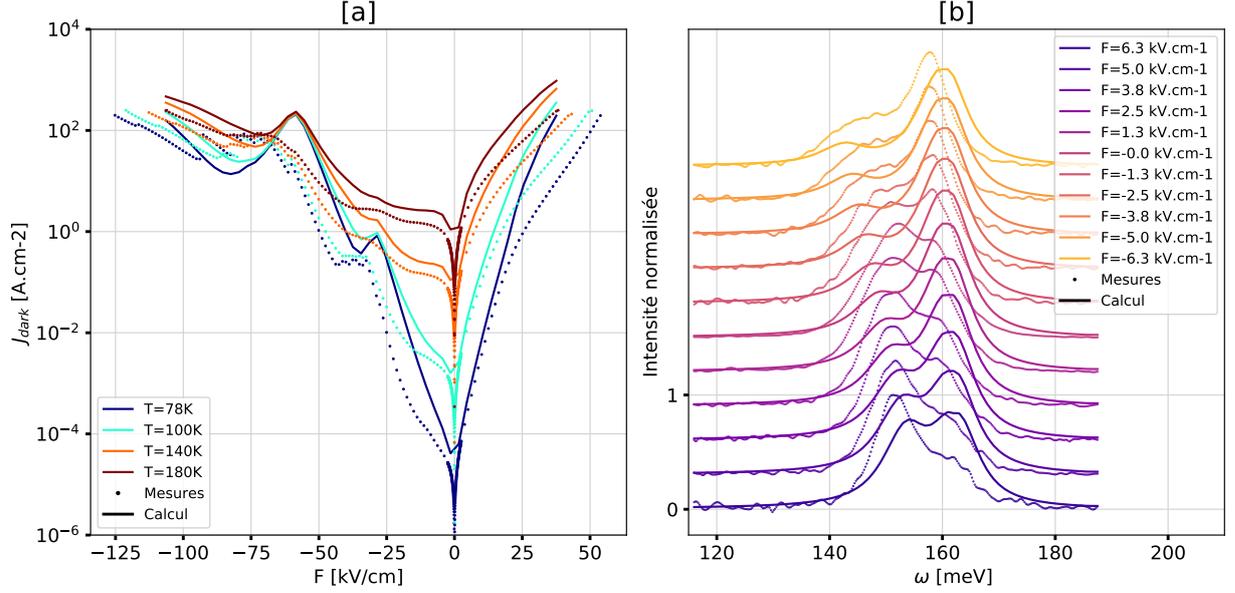


FIGURE 2.18 – Comparaisons expériences/calculs *avant raffinement du modèle*. [a] Densités de courant surfacique en fonction du champ électrique F appliqué, pour différentes températures. Superposition des mesures (lignes pointillées) et des calculs (traits pleins). La structure de bande correspondante à ces mesures est celle déjà présentée Figure 2.14 (structure 2). [b] Mesures de photo-courant normalisées (traits pointillés) et calculées (traits pleins) à partir de l'équation (2.50), pour différentes valeurs de champ électrique F appliqué. La structure de bande correspondante à ces mesures est celle déjà présentée Figure 2.17 (structure 2, seconde ligne). Les mesures ont été réalisées à 78K.

dans les deux types de mesure, les grandes tendances d'évolution en température et en tension sont approximativement reproduites. Cependant, certaines caractéristiques plus fines de ces mesures ne sont que médiocrement reproduites : niveaux de courant et positions des pics dans les courbes de courant, amplitudes relatives des pics dans les courbes de photo-courant et décalage global des spectres vers les hautes énergies. À cela s'ajoute que les données de photo-courant sont représentées en amplitudes normalisées, le calcul étant incapable de reproduire fidèlement l'évolution de ces amplitudes. Bien que seuls deux jeux de mesures soient présentés dans la Figure 2.18, ces observations s'appliquaient à l'ensemble des données expérimentales à notre disposition.

Ces différences entre mesures et simulations sont les motivations principales des développements qui suivent. Nous présenterons donc successivement plusieurs de ces nouveaux développements, et nous étudierons plus tard leurs effets sur les capacités du modèle à *reproduire et prédire* les données expérimentales.

2.5.1 Probabilité d'extraction

La probabilité d'extraction p_E est une notion fondamentale pour la compréhension des détecteurs à cascade quantique. Elle se définit comme la probabilité qu'un électron promu dans le niveau excité du puits optique d'une période p soit extrait, c'est-à-dire qu'il se

désexcite jusqu'au niveau fondamental du puits optique de la période suivante $p + 1$, via la cascade de niveaux électroniques. Elle donne une idée intuitive et quantitative du bon alignement d'une cascade. Une probabilité p_E supérieure à 0.6 est généralement considérée comme une bonne extraction. Avant ces travaux de thèse, cette grandeur n'était pas calculée. Dans la suite, on détaille le calcul de cette probabilité d'extraction.

Dans la suite, on utilisera les probabilités de passage p_{ij} d'un état i vers un état j , qu'on exprime à partir des taux de transition $\Gamma_{i \rightarrow p}$ ⁶ entre l'état i et tous les états p reliés à i , tel que :

$$p_{ij} = \frac{\Gamma_{i \rightarrow j}}{\sum_p \Gamma_{i \rightarrow p}} \quad (2.52)$$

Méthode combinatoire : 3 niveaux par période

Une première approche intuitive de la probabilité d'extraction peut se faire par une méthode combinatoire. Pour développer de l'intuition sur le calcul de la probabilité d'extraction, on commence par étudier un système modèle simplifié, à 3 niveaux, représenté Figure 2.19. On utilise les notations $p_{R1} = p_{23}$, $p_{L1} = p_{32}$, ... pour simplifier la lecture

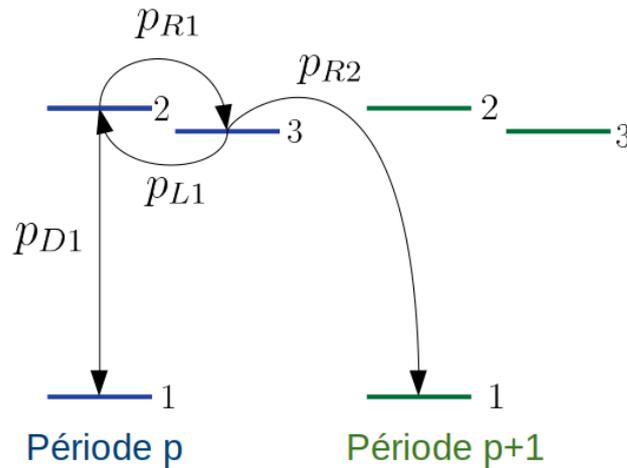


FIGURE 2.19 – Représentation schématique d'un système à 3 niveaux par périodes et des probabilités de transition d'un niveau à l'autre.

des équations qui vont suivre. Dans le cas de ce système modèle, on fait les hypothèses simplificatrices suivantes :

- les états sont limités à des interactions avec des états de puits adjacents ;
- un électron qui atteint l'état fondamental d'une des deux périodes p et $p + 1$ ne peut plus remonter dans la cascade : les probabilités de transition des états 1 vers les états de la cascade sont négligées. Par conséquent, un électron qui atteint l'état 1 de la période $p + 1$ est considéré comme *extrait*, et un électron qui atteint l'état 1 de la période p est considéré comme *perdu*.

6. Ce sont bien les taux de transition Γ qui sont utilisés, et non pas les courant particuliers $\tilde{\Gamma}$.

Dans cette situation, on peut dénombrer l'ensemble des chemins possibles que peut emprunter un photo-électron qui serait extrait depuis le niveau 2 de p vers le niveau 1 de $p + 1$:

$$p_E = p_{R1}p_{R2} + p_{R1}p_{L1}p_{R1}p_{R2} + p_{R1}(p_{L1}p_{R1})^2p_{R2} + \dots \quad (2.53)$$

Chacun des chemins fait au minimum intervenir un passage de 2 vers 3 (p_{R1}) et un passage de 3 vers le prochain niveau fondamental (p_{R2}). Ces chemins se distinguent en revanche par le nombre de boucles effectuées par l'électron entre les niveaux 2 et 3 ($p_{L1}p_{R1}$). p_E apparaît donc ici comme étant une simple somme des termes d'une suite géométrique de raison $p_{L1}p_{R1}$. On a donc :

$$p_E = \frac{p_{R1}p_{R2}}{1 - p_{L1}p_{R1}} \quad (2.54)$$

Méthode combinatoire : 4 niveaux par période

On complexifie légèrement notre système modèle en rajoutant un 4ème niveau dans les périodes du système (Figure 2.20). Le dénombrement des chemins empruntables par un

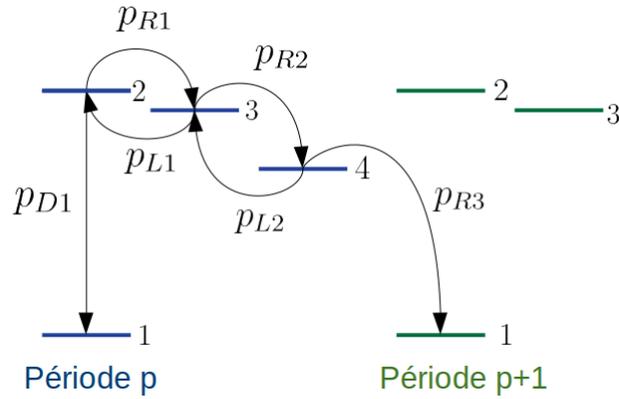


FIGURE 2.20 – Représentation schématique d'un système à 3 niveaux par période et des probabilités de transition d'un niveau à l'autre.

électron extrait est légèrement plus complexe. Au cours de son extraction, l'électron peut effectuer des déplacements cycliques, des *boucles*, $p_{R1}p_{L1}$ et $p_{R2}p_{L2}$, en plus des trois sauts absolument nécessaires $p_{R1}p_{R2}p_{R3}$. À nombre fixé n de boucles que réalise l'électron avant d'être extrait, on peut calculer la probabilité d'extraction $p_E(n)$ à n fixé en dénombrant les différents chemins empruntables :

$$p_E(n) = p_{R1}p_{R2}p_{R3} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (p_{L1}p_{R1})^{n-k} (p_{L2}p_{R2})^k \quad (2.55)$$

$$= p_{R1}p_{R2}p_{R3} (p_{L1}p_{R1} + p_{L2}p_{R2})^n \quad (2.56)$$

car si on effectue k boucles $p_{L2}p_{R2}$, on fera nécessairement $n - k$ boucles $p_{L1}p_{R1}$, à n fixé. Les coefficients binomiaux dénombrent les chemins possibles à k fixé. Finalement :

$$p_E = \sum_n p_E(n) = \frac{p_{R1}p_{R2}p_{R3}}{1 - (p_{L1}p_{R1} + p_{L2}p_{R2})} \quad (2.57)$$

Chaîne de Markov

Précédemment, on a pu développer un calcul de p_E pour des structures à nombre de niveaux réduits, et dans le cadre d'hypothèses simplificatrices (déplacements entre niveaux adjacents), basé sur le dénombrement des chemins possibles pour un photo-électron initialement dans le niveau excité du puits optique.

Malheureusement, pour un nombre supérieur de niveaux dans la période, il devient particulièrement complexe de dénombrer correctement l'ensemble des chemins empruntables (l'utilisation des coefficients *multinomial* - extension des coefficients *binomial* - ne sont pas directement applicables et comptent des chemins en trop). De plus, si l'on ajoute la possibilité de faire des transitions entre deux niveaux non-adjacents dans la cascade, le dénombrement devient impossible analytiquement.

On propose ici une autre approche, basée sur une chaîne de Markov, capable de prendre en compte toutes les transitions, dans n'importe quelle structure de QCD. On trouve dans [88] une discussion sur une procédure de calcul proche de celle qui va être développée par la suite.

Dans le cadre de l'hypothèse des sousbandes thermalisées, présentée Section 2.2.1, le passage d'un électron d'un niveau à un autre est un processus Markovien : il ne dépend pas de l'historique du trajet de l'électron, mais uniquement du niveau où il se situe avant son prochain passage. En conséquent, on peut associer à notre système une matrice de passage P , décrivant l'évolution d'un état du système n vers un état $n + 1$, une itération correspondant à une transition de l'électron⁷. De par la nature Markovienne du processus, P reste égale à chaque itération. L'élément de matrice P_{ij} est simplement la probabilité p_{ij} de passer d'un état j vers un état i .

Soit p_n le vecteur de probabilité associé à l'état n du système. Pour N niveaux dans la structure, $p_n[i]$, $i \in [1, N]$ correspond à la probabilité d'être dans le niveau i à l'itération n . À l'état initial du système, l'électron est dans le niveau 2 (il vient d'être promu par l'absorption d'un photon), on a donc $p_0[i] = \delta_{2i}$. Le vecteur de probabilité p_n se calcule par multiplications successives de P :

$$p_n = P^n p_0 \quad (2.58)$$

La probabilité d'extraction se déduit de la limite à l'infini de p_n . Si i_E est l'indice du niveau où l'électron est extrait :

$$p_E = \lim_{n \rightarrow \infty} p_n[i_E] \quad (2.59)$$

On donne la représentation matricielle de P , pour N niveaux, où le niveau 1 représente le

7. En réalité, la matrice de passage correspond à la propagation non pas du photo-électron, mais de la perturbation autour de l'état stationnaire induite par le processus de photo-absorption. [89] montre cependant que ce sont effectivement les taux *électroniques* $\Gamma_{i \rightarrow j}$ qui décrivent la propagation de ces perturbations. Par conséquent, dans la suite nous utiliserons un abus de langage qui assimile ces perturbations aux électrons.

niveau fondamental de la période p et N le niveau fondamental de $p + 1$:

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ p_{21} & 0 & p_{23} & p_{24} & \dots & p_{2N} \\ p_{31} & p_{32} & 0 & p_{34} & \dots & p_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{(N-1)1} & p_{(N-1)2} & p_{(N-1)3} & p_{(N-1)4} & \dots & p_{(N-1)N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

On note que la somme des termes d'une ligne i de P vaut 1 :

$$\sum_j p_{ij} = 1 \quad \forall i \quad (2.61)$$

Dans la Figure 2.21-[b], on présente une étude paramétrique 2D de la probabilité d'extraction. Pour une structure QCD typique d'InGaAs/AlInAs (représentée en Fig. 2.21-[a]), on fait varier l'épaisseur de la première barrière de la cascade L_0^B et l'épaisseur du premier puits L_1^{QW} , et on calcule p_E pour chaque situation. Quelques observations :

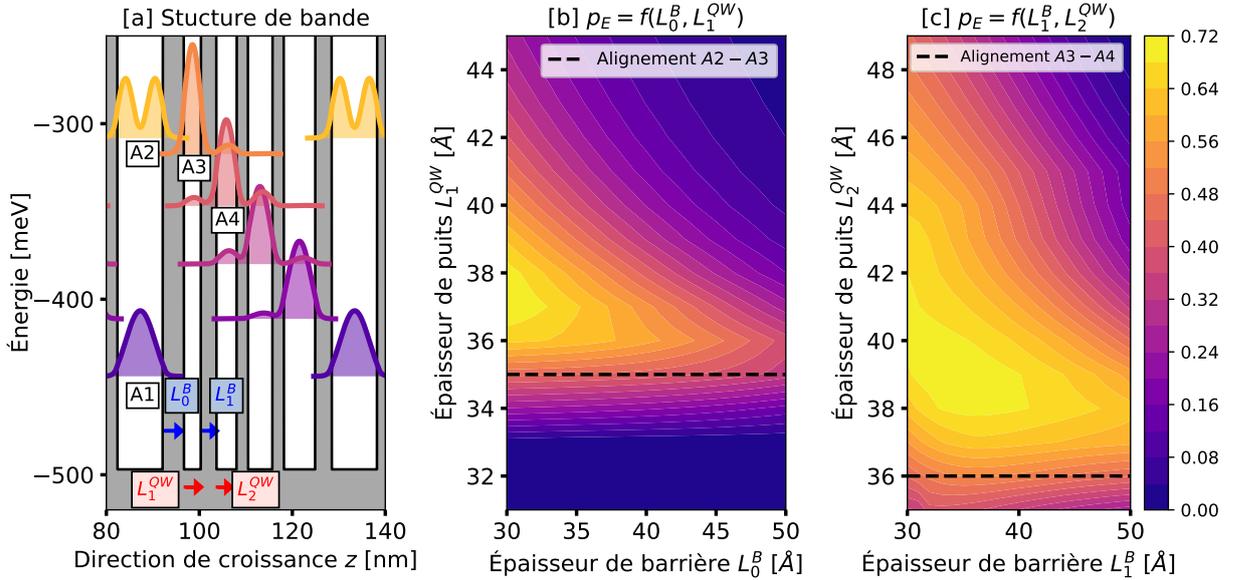


FIGURE 2.21 – [a] Structure de bande du système étudié, avec un puits optique dopé à $n_{2D} = 2e11 \text{ cm}^{-2}$. Pour l'étude paramétrique de p_E , on fera varier l'épaisseur de la première barrière de la cascade, L_0^B (représentée par une flèche bleue) ainsi que l'épaisseur du premier puits de la cascade L_1^{QW} (représentée par une flèche rouge). L'interaction entre A2 et A3 est calculée dans une base d'états localisée. [b] Cartographie 2D de la probabilité d'extraction en fonction de L_1^{QW} et L_0^B . [c] Cartographie 2D de la probabilité d'extraction en fonction de L_2^{QW} et L_1^B . Les calculs sont effectués par incrément de 1 Å pour les deux dimensions.

- Quelle que soit la valeur du puits L_1^{QW} , augmenter la taille de barrière L_0^B réduit l'amplitude de p_E : le taux d'extraction $\Gamma_{A2 \rightarrow A3}$ diminue tandis que le taux vers le niveau fondamental $\Gamma_{A2 \rightarrow A1}$ reste constant, ce qui mécaniquement fait diminuer la probabilité d'extraction.

- En dessous de la valeur de L_1^{QW} qui correspond à l’alignement entre les sousbandes $A2$ et $A3$ (ici $\approx 35 \text{ \AA}$), la probabilité d’extraction s’effondre. En effet, pour ces valeurs, $A3$ est au dessus de $A2$, ce qui se traduit par une chute brutale du taux d’extraction $\Gamma_{A2 \rightarrow A3}$.
- Il est intéressant de constater que les valeurs maximales de p_E à épaisseur de barrière constante ne coïncident pas avec l’alignement parfait des sousbandes $A2-A3$: le maximum de probabilité d’extraction p_E ne coïncide donc pas avec le maximum de taux d’extraction $\Gamma_{A2 \rightarrow A3}$. Il est en effet pertinent d’introduire un léger décalage négatif de la sousbande d’extraction $A3$ et de générer un transport électronique asymétrique : si l’électron passe moins efficacement de la sousbande $A2$ vers la sousbande $A3$ que dans une situation d’alignement, il a en revanche beaucoup plus de mal à remonter depuis $A3$ vers $A2$ que si les sousbandes étaient alignées.

La même étude est réalisée dans la Figure 2.21-[c], mais cette fois ce sont les épaisseurs du puits et de la barrière suivants, L_2^{QW} et L_1^B que l’on fait varier, en prenant $L_0^{QW} = 36 \text{ \AA}$ et $L_1^B = 35 \text{ \AA}$. Les conclusions sont relativement similaires à l’étude précédente : l’augmentation de la barrière diminue p_E , et une asymétrie de la cascade renforce p_E . À noter cependant que la zone où p_E est optimale est plus ”large” que précédemment : plus l’on s’intéresse à des niveaux profonds de la cascade, éloignés du puits optique, moins la cascade est sensible à des écarts d’alignements. En d’autres termes, l’alignement des premiers niveaux extracteurs est décisif, mais l’importance de l’alignement des niveaux suivants décroît le long de la cascade. Attention : la Figure 2.21 pourrait faire croire que diminuer l’épaisseur des barrières est toujours favorable aux performances d’un détecteur. Un tel raisonnement omet complètement l’évaluation du bruit dans la structure, qui augmente lorsque les épaisseurs de barrière diminuent. Nous verrons dans le prochain chapitre que ces considérations sur le bruit permettent d’obtenir un optimum de fonctionnement déterminé par le rapport signal-à-bruit du dispositif.

Nous verrons dans la suite comment ce développement sur le calcul de la probabilité d’extraction p_E va nous permettre de correctement modéliser l’amplitude des courbes de photo-courant.

2.5.2 Masse effective et non-parabolicité

Au début de ces travaux de thèse, le modèle implémenté à l’époque calculait systématiquement des courbes d’absorption et de photo-réponse décalées vers les faibles longueurs d’ondes (hautes énergies) par rapport aux données expérimentales. Nous verrons dans cette partie qu’une bonne modélisation de la dispersion de la masse effective peut expliquer et corriger ces écarts systématiques.

La masse effective est une grandeur introduite dans le cadre de l’approximation de la fonction enveloppe qui incorpore macroscopiquement les effets de courte distance dus au potentiel cristallin. La formulation la plus générale de la masse effective est une fonction non-triviale de l’énergie $\omega_n(k)$ de l’état k d’une sousbande n à laquelle on la considère. Dans la suite, on considère trois modèles simplifiés de masse effective, qu’on applique dans un système composé de deux sousbandes 0 et 1. L’objectif est d’étudier leurs différences :

- **Modèle bandes paraboliques et parallèles** : dans ce modèle le plus simple mais très couramment utilisé, la masse effective est prise égale pour toutes les sousbandes

et tous les états k . Autrement dit, la masse effective n'a pas de dépendance avec l'énergie et elle est la plus souvent prise comme étant égale à la masse effective m_{QW}^* en fond de bande de conduction du puits :

$$m_0^*(k) = m_1^*(k) = m_{\text{QW}}^* \quad \forall k \quad (2.62)$$

C'est ce modèle qui était implémenté lors des débuts de ces travaux de thèse.

- **Modèle bandes paraboliques et non-parallèles** : dans ce modèle, on introduit de la non-parabolicité dans la direction de croissance z , mais pas dans les autres directions perpendiculaires \perp : la masse effective d'une sousbande est constante pour tous les états k de cette sousbande, mais différente d'une autre sousbande :

$$m_0^*(k) = m_0^*(0) = m_{\text{QW}}^* + \alpha\omega_0(k=0) \quad \forall k \quad (2.63)$$

$$m_1^*(k) = m_1^*(0) = m_{\text{QW}}^* + \alpha\omega_1(k=0) \quad \forall k \quad (2.64)$$

avec α le paramètre de non-parabolicité, que l'on peut trouver dans la littérature ou étalonner à partir de mesures expérimentales (on reviendra sur la méthode de calibration du paramètre α dans la section 2.6).

- **Modèle bandes non-paraboliques** : cette fois, toutes les directions sont non-paraboliques. La masse effective dans une sousbande dépend de l'état k auquel elle est considérée :

$$m_0^*(k) = m_{\text{QW}}^* + \alpha\omega_0(k) \quad (2.65)$$

$$m_1^*(k) = m_{\text{QW}}^* + \alpha\omega_1(k)$$

Dispersion

Pour rappel, la dispersion de chaque sousbande est donnée par :

$$\omega_i(k) = \omega_i + \frac{k^2}{2m_i^*(k)} \quad (2.66)$$

où l'on prendra $\hbar = 1$ pour alléger les notations. La Figure 2.22 trace la dispersion des sousbandes (2.66) pour chaque modèle, ainsi que l'énergie de transition ISB $0 \rightarrow 1$. Pour un modèle de sousbandes paraboliques et parallèles (courbe rouge), la différence d'énergie entre les sousbandes est constante. La transition se fait toujours à la même énergie $\Delta\omega_{01}$. Pour les deux autres modèles, la masse effective devenant de plus en plus lourde lorsqu'on monte dans les sousbandes, la différence d'énergie se fait de plus en plus petite. La transition ISB n'est plus constante. L'idée est désormais de calculer les conséquences de cette transition ISB non constante sur les spectres d'absorption.

Densité d'états joints et absorption

Dans cette partie, on développe une expression simple de l'absorption entre deux sousbandes en la décomposant en une somme de contribution de chacun des couples d'états $|0, k\rangle, |1, k\rangle$. On suppose que les transitions optiques se font à vecteur d'onde k conservé, tel

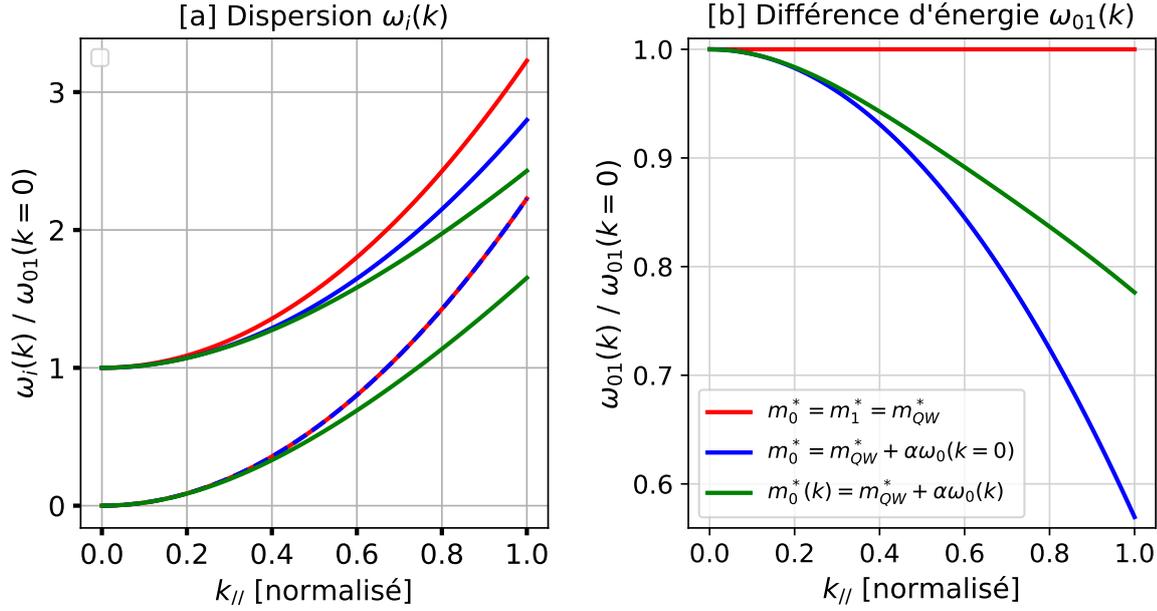


FIGURE 2.22 – [a] Dispersion et [b] différence d'énergie entre les sousbandes fondamentale et excitée, pour les trois modèles de parabolicité.

qu'on peut séparer l'absorption totale \mathcal{A} en une somme de contributions des couples d'états de même k , chaque contribution étant désignée par \mathcal{A}_k :

$$\mathcal{A}_k \propto \frac{\left(f(\omega_0(k)) - f(\omega_1(k)) \right) \rho_{01}(k)}{(\omega - \omega_{01}(k))^2 + (\Gamma_k/2)^2} \quad (2.67)$$

Avec ω la fréquence des photons incidents, f la statistique de Fermi-Dirac (on considère que les deux sousbandes ont le même niveau de Fermi), Γ_k l'élargissement optique associé à la transition, et $\rho_{01}(k)$ la densité d'états joints de la transition. On fait donc l'hypothèse que chaque transition participe à l'absorption par une contribution lorentzienne centrée en $\omega_{10}(k)$, de largeur Γ_k (qu'on prendra constante quel que soit k dans la suite), et d'amplitude donnée par la multiplication de la différence de population et la densité de transitions k avec lesquelles un photon d'énergie ω peut interagir⁸. La densité d'états joints pour une dispersion 2D est simplement donnée par :

$$\rho_{01}(k) = \frac{m_0^*(k)m_1^*(k)}{m_1^*(k) - m_0^*(k)} \quad (2.68)$$

On note que dans le cas des sousbandes parallèles et paraboliques $m_0^*(k) = m_1^*(k)$, $\rho_{01}(k)$ converge vers une fonction dirac $\delta(\omega - \omega_{01})$: un photon à l'énergie $\omega = \omega_{01}$ peut interagir avec toutes les transitions k entre les deux sousbandes (un nombre infini de transitions).

8. On adopte cette vision simplifiée de l'absorption pour étudier qualitativement les effets de la non-parabolicité sur les spectres d'absorption. En pratique, on utilisera les équations développées dans la section 2.4.2.

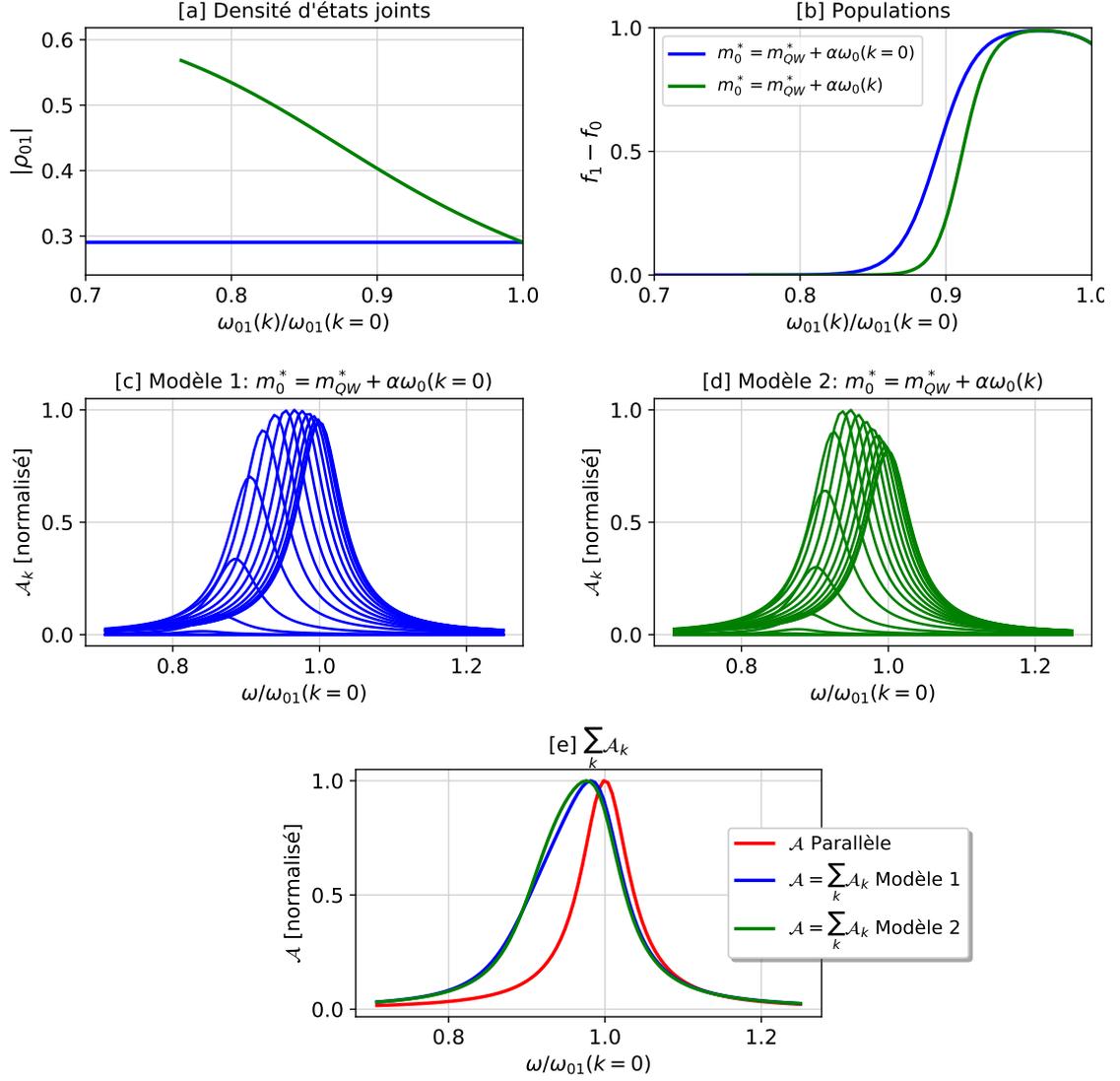


FIGURE 2.23 – [a] Densité d'états joints ρ_{01} et [b] différence de population entre les niveaux excité et fondamental, en fonction de l'énergie de transition ISB ω_{01} , pour les deux modèles de non-parabolicité. Représentation de la décomposition du spectre d'absorption \mathcal{A} en ses différentes composantes \mathcal{A}_k pour le modèle [c] sousbandes paraboliques non-parallèles [d] sousbandes non-paraboliques. [e] Absorption totale \mathcal{A} des modèles de non-parabolicité comparée à l'absorption totale d'un modèle parabolique et parallèle des sousbandes.

Pour calculer l'absorption totale \mathcal{A} , il ne nous reste plus qu'à sommer les contributions \mathcal{A}_k :

$$\mathcal{A} = \sum_k \mathcal{A}_k \quad (2.69)$$

La figure 2.23 illustre les différentes grandeurs présentées précédemment et compare les deux modèles de non-parabolicité. Dans la figure [a], la densité d'états joints ρ_{01} est tracée. Seul le modèle non-parabolique (modèle 2, en vert) donne une densité d'états joints non constante, qui augmente lorsqu'on s'intéresse à des transitions à grand k : c'est le seul

des trois modèles à prendre des masses effectives qui dépendent des états k . En figure [b], on observe un décalage dans l'évolution de la différence de population $f_1 - f_2$, qui est la conséquence de la différence entre les dispersions des deux modèles. Les figures [c] et [d] décomposent le spectre d'absorption \mathcal{A} en ses différentes contributions \mathcal{A}_k , pour les deux modèles. L'amplitude relative des contributions lorentziennes décroît lorsqu'on s'intéresse aux transitions de plus petites énergies.

Finalement, la figure [e] résume l'étude. Lorsqu'on prend les phénomènes de non-parabolicité en compte, les spectres d'absorption (et par conséquent de réponse) sont déformés : on perd le caractère symétrique de l'élargissement, et le pic de résonance se trouve décalé vers les faibles énergies (*red-shift* vers les grandes longueurs d'ondes). Ces deux effets sont à prendre en compte dans la conception de structures QCD lorsque les niveaux de dopage sont importants (supérieur à $n_{2D} = 5e11 \text{ cm}^{-2}$ environ), puisque susceptibles d'affecter la longueur d'onde de transition : lorsqu'on augmente le dopage, on active les transitions à grand k , qui correspondent à de plus petits écarts en énergie (cf. figure 2.22).

La comparaison extensive des deux modèles (modèle 1 et 2, bleu et vert) nécessiterait une exploration simultanée des domaines de dopage et de température accessibles. En pratique, pour des niveaux de dopage usuels (entre 10^{11} et 10^{12} cm^{-2}), le modèle non-parabolique (modèle 2, vert) n'apporte pas des modifications conséquentes relativement à la complexité de calcul qu'il rajoute : dans notre nouveau modèle, on utilisera le modèle 1 (bleu) de bandes paraboliques mais non-parallèles.

2.5.3 Modélisation des interfaces non-abruptes

Les interfaces entre les puits quantiques et les barrières ne sont pas abruptes : il existe un profil de composition continu entre les deux matériaux, qui s'étale sur plusieurs monocouches d'atomes (de l'ordre de quelques Å). La Figure 2.24-[d] est une image réalisée par microscopie à transmission d'électron d'une période de QCD⁹. Les bandes claires représentent les barrières d'AlInAs, les bandes sombres les puits quantiques d'InGaAs. On observe effectivement de faibles contrastes au niveau des interfaces. Ce profil de composition se traduit en une distribution de potentiel non-abrupte, dont les effets sur le positionnement des niveaux d'énergie est non-négligeable. Dans cette partie, on présente une stratégie de modélisation simple pour prendre en compte ces effets de composition.

Dans la suite, on suppose que les variations de compositions sont homogènes selon la direction perpendiculaire à l'axe de croissance : seul l'axe z est affecté par ce gradient de composition. Pour illustrer le phénomène, on se place dans un cas d'étude typique simple, à l'interface $z = 0$ entre deux matériaux massifs (chacun de dimensions L_z telle que $L_z \gg 1$ Å) : pour $z < 0$, on prend un matériau binaire GaAs, pour $z > 0$ un matériau ternaire $\text{Al}_{x_0}\text{Ga}_{1-x_0}\text{As}$, où x_0 désigne la composition visée d'aluminium. À l'interface entre les deux matériaux, on obtient des couches de ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, dont la composition x d'aluminium peut être approximée comme une distribution sigmoïdale selon z [90] :

$$x(z) = \frac{x_0}{1 + e^{-\frac{z}{\sigma}}} \quad (2.70)$$

9. Remerciement à Gilles Patriarche et Konstantinos Pantzas, de la plateforme Renatech du C2N pour nous avoir fourni les images TEM

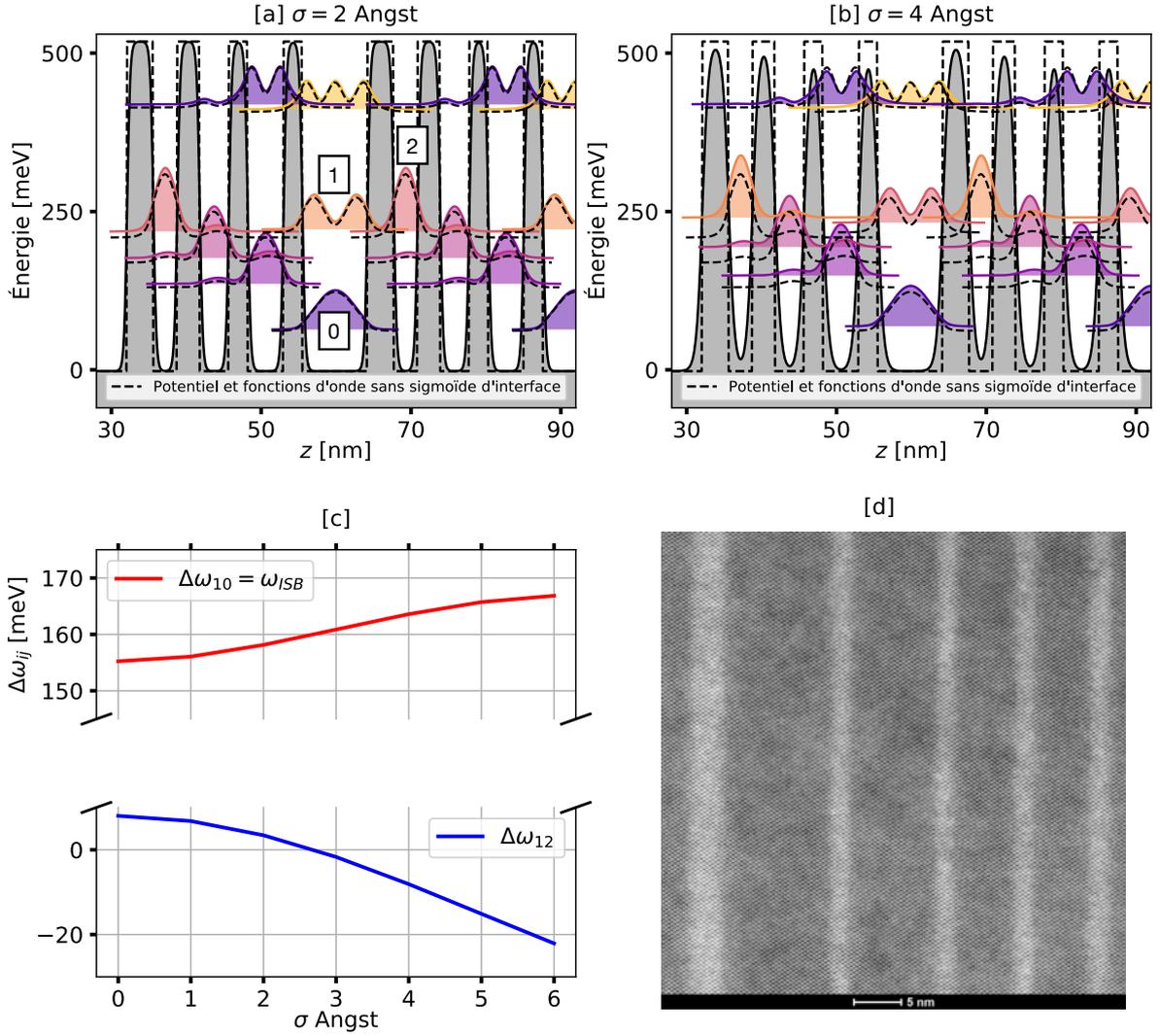


FIGURE 2.24 – Couleur et traits pleins : structure de bande d'un QCD $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ avec prise en compte d'une distribution sigmoïdale de la composition d'aluminium pour un étalement caractéristique [a] $\sigma = 2$ Å [b] $\sigma = 4$ Å. Les traits pointillés représentent le potentiel et les fonctions d'onde avec potentiel carré $\sigma = 0$. [c] Évolution des écarts d'énergie entre les niveaux de la transition ISB (courbe rouge) et les deux premiers niveaux de la cascade électronique (courbe bleue), en fonction de la valeur d'étalement de la sigmoïde d'interface σ . [d] Image réalisée par microscopie à transmission d'électron (TEM) d'une période de QCD. Les bandes claires représentent les barrières d'AlInAs, les bandes sombres les puits quantiques d'InGaAs.

où σ est l'étalement caractéristique de cette distribution de composition. Lorsque $z \rightarrow \infty$, on retrouve bien $x = x_0$, et lorsque $z \rightarrow -\infty$, on a bien $x = 0$. Les propriétés des couches de composition $x \neq 0$ et $x \neq x_0$ sont interpolées entre les couches d' $\text{Al}_{x_0}\text{Ga}_{1-x_0}\text{As}$ et de GaAs. Par conséquent, à l'interface entre ces deux matériaux, on trouve une distribution sigmoïdale du potentiel.

Une analyse similaire peut-être menée sur des matériaux différents : à l'interface entre un système $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, on trouve des quaternaires $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{As}$, dont la composition d'aluminium x suit une distribution sigmoïdale. Dans le cas d'une hétérostructure périodique, et notamment d'un QCD, si les tailles selon z des puits ou des barrières sont comparables à l'étalement σ , il faut sommer les contributions de chaque interface lorsque l'on calcule les compositions. En pratique, la valeur caractéristique de l'étalement σ dépend du déroulement de la croissance épitaxiale.

La Figure 2.24 présente deux structures de bande typique de QCD à $\lambda \approx 8 \mu\text{m}$, sous l'effet de gradients de composition d'amplitudes σ différentes (Figures [a] et [b]). Le potentiel tel que $\sigma = 0$ (interfaces abruptes) est représenté en pointillé, pour distinguer les effets de la sigmoïde sur la position en énergie des niveaux. De manière générale, l'effet du gradient de composition semble décaler les sousbandes vers les hautes énergies ; cependant, l'amplitude de ces décalages dépend de la taille des puits, avec pour conséquence le désalignement relatif des différents niveaux de la cascade.

La Figure 2.24-[c] trace la différence d'énergie entre deux couples différents de niveaux, en fonction de l'amplitude de σ : en haut, en rouge, est tracée l'énergie de transition ISB entre le niveau fondamental du puits optique (le plus large) et son premier niveau excité $\Delta\omega_{10} = \omega_{\text{ISB}}$; en bas, en bleu, est tracé l'écart entre ce premier niveau excité et le premier niveau extracteur de la cascade électronique $\Delta\omega_{12}$.

Lorsque la sigmoïde s'accroît, la transition ISB se *blue-shift* : elle est décalée vers les hautes énergies. L'effet n'est pas négligeable, puisque pour seulement $\sigma = 3 \text{ \AA}$, on a déjà 5% de différence avec la transition ISB calculée dans un potentiel carré.

Les effets de la sigmoïde sont encore plus importants dans l'alignement des niveaux de la cascade. Le premier puits extracteur étant fin par rapport au puits optique, il subit plus intensément les variations de potentiel et se décale plus rapidement vers les hautes énergies. Dans la structure de bande étudiée, le premier niveau extracteur est situé à plus faible énergie que le niveau excité lorsque $\sigma = 0$; lorsque $\sigma = 2.7 \text{ \AA}$, les niveaux s'alignent, et pour $\sigma > 2.7 \text{ \AA}$, le niveau extracteur est au dessus du niveau excité de la transition ISB. La sigmoïde de potentiel a donc des conséquences importantes sur les performances du détecteur : un tel désalignement s'accompagne d'une chute de la probabilité d'extraction et donc du photocourant mesurable. Nous verrons dans la partie 2.6 comment étalonner la valeur de σ pour anticiper les effets de la sigmoïde dans la conception de la structure de bande.

2.5.4 Permittivité du puits quantique, fréquence plasma et absorption

Dans cette section, on présente une approche différente de l'absorption au sein d'un puits quantique : plutôt que de calculer les mécanismes d'absorption via une approche perturbative (présentée section 2.4.2), on va calculer l'absorption $\alpha(\omega)$ au sein d'un puits quantique à l'aide de la permittivité selon l'axe de croissance z du puits quantique, $\epsilon_{\text{QW}}(\omega)$. Comparée à la méthode perturbative, nous verrons que cette méthode fait apparaître naturellement des modifications importantes sur la forme spectrale de l'absorption.

On se place dans une situation simplifiée, où la période d'un QCD est simplement composée d'un puits quantique et d'une barrière, de permittivité ϵ_b . Dans la suite, on suppose ϵ_b

indépendant de la fréquence. Pour simplifier la discussion, on ne considérera qu'une transition ω_{ISB} et on prendra des sousbandes paraboliques et parallèles, telles que la permittivité du puits quantique $\epsilon_{\text{QW}}(\omega)$ s'exprime à l'aide de l'expression semi-classique [91], assimilable à un modèle Drude-Lorentz de la permittivité :

$$\epsilon_{\text{QW}}(\omega) = \epsilon_r \left(1 - \frac{\omega_P^2}{\omega^2 - \omega_{\text{ISB}}^2 + i\omega\Gamma} \right) \quad (2.71)$$

où Γ désigne l'élargissement spectral de cette transition et ω_P est la pulsation plasma 2D :

$$\omega_P^2 = \frac{\Delta n_{12} e^2}{m^* \epsilon_0 \epsilon_r L_{\text{eff}}} \approx \frac{n_{2D} e^2 f_{12}}{m^* \epsilon_0 \epsilon_r L_{\text{QW}}} \quad (2.72)$$

où Δn_{12} est la différence de population entre la sousbande 1 et 2 de la transition ISB, qui s'approxime généralement par n_{2D} , f_{12} est la force d'oscillateur entre les deux sousbandes, et L_{eff} est la longueur caractéristique d'étalement spatial des courants de polarisation entre les deux sousbandes, qu'on approxime par L_{QW}/f_{12} [117].

L'absorption linéique $\alpha(\omega)$ dans les puits quantiques s'écrit en fonction de la distribution spatiale du champ polarisé selon z à l'intérieur des puits E_z , et de la partie imaginaire de la permittivité du puits [92] :

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{2} \Im[\epsilon_{\text{QW}}(\omega)] \int_{\text{QW}} \epsilon_0 |E_z|^2 dz \quad (2.73)$$

Dans l'hypothèse d'une faible variation de l'amplitude du champ sur l'épaisseur d'une période ($k_0 n_{\text{eff}} L_p \ll 1$, avec n_{eff} l'indice effectif de la structure, et L_p l'épaisseur d'une période), on peut considérer le champ E_z constant sur chaque couche. À partir de l'équation (2.73), on obtient alors :

$$\alpha(\omega) \propto \Im[\epsilon_{\text{QW}}(\omega)] |E_{\text{QW}}|^2 L_{\text{QW}} \quad (2.74)$$

Par continuité du déplacement électrique $D(z)$ aux interfaces puits/barrière, on a :

$$\epsilon_b E_b = \epsilon_{\text{QW}} E_{\text{QW}} \quad (2.75)$$

où E_b désigne le champ au sein de la barrière. Par conséquent, en injectant (2.75) dans (2.74) :

$$\alpha(\omega) \propto \Im[\epsilon_{\text{QW}}(\omega)] \frac{|\epsilon_b|^2}{|\epsilon_{\text{QW}}(\omega)|^2} \epsilon_b |E_b|^2 L_{\text{QW}} \quad (2.76)$$

Après quelques manipulations, on obtient :

$$\alpha(\omega) \propto \Im \left[\frac{-1}{\epsilon_{\text{QW}}(\omega)} \right] \quad (2.77)$$

Le résultat peut paraître surprenant, mais *l'absorption au sein d'un puits quantique est proportionnelle à l'inverse de la partie imaginaire de la permittivité du puits*. Développons cette expression pour obtenir la forme spectrale de l'absorption :

$$\frac{-\epsilon_r}{\epsilon_{\text{QW}}(\omega)} = \frac{\omega^2 - \omega_{\text{ISB}}^2 + i\omega\Gamma}{\omega_P^2 + \omega_{\text{ISB}}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (2.78)$$

$$= \frac{(\omega^2 - \omega_{\text{ISB}}^2 + i\omega\Gamma)(\omega_P^2 + \omega_{\text{ISB}}^2 - \omega^2 + i\omega\Gamma)}{(\omega_P^2 + \omega_{\text{ISB}}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2} \quad (2.79)$$

$$= \frac{(\omega^2 - \omega_{\text{ISB}}^2)(\tilde{\omega}_{\text{ISB}}^2 - \omega^2) - \omega^2\Gamma^2 + i\omega_P^2\omega\Gamma}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2} \quad (2.80)$$

où l'on a introduit l'énergie de transition ISB plasma-*shiftée* $\tilde{\omega}_{\text{ISB}}^2 = \omega_{\text{ISB}}^2 + \omega_P^2$. En prenant la partie imaginaire de l'expression précédente, on obtient :

$$\Im \left[\frac{-\epsilon_r}{\epsilon_{\text{QW}}(\omega)} \right] = \frac{\omega_P^2\omega\Gamma}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2} \quad (2.81)$$

Proche de la résonance, $(\tilde{\omega}_{\text{ISB}}^2 - \omega^2)$ se simplifie en $2\omega(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega)$, et on obtient finalement la forme spectrale de l'absorption :

$$\alpha(\omega) \propto \frac{1}{4\omega} \frac{\omega_P^2\Gamma}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (2.82)$$

L'absorption dans les puits quantiques est donc proportionnelle à une fonction lorentzienne centrée non-plus sur la transition ω_{ISB} , mais *sur la transition ISB plasma-*shiftée** $\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = \sqrt{\omega_{\text{ISB}}^2 + \omega_P^2} > \omega_{\text{ISB}}$. L'interaction électron-électron est à l'origine d'un phénomène d'écrantage du champ électromagnétique, qui repousse le maximum d'absorption du dispositif vers les plus petites longueurs d'ondes [93, 94]. Ces effets de renormalisation de la résonance de la transition ISB sont d'autant plus intenses que le dopage dans les puits quantiques est élevé.

C'est ce modèle d'absorption, qui passe par l'évaluation de la permittivité du puits quantique ϵ_{QW} , qui est désormais implémenté. Si les calculs précédents ont été réduits à un seul couple de sousbandes paraboliques et parallèles, on peut facilement les étendre à plusieurs couples et inclure des effets de non-parabolicité. Nous verrons par ailleurs dans le chapitre suivant comment concevoir un puits quantique qui intègre ces deux phénomènes aux effets opposés.

2.5.5 Contacts et simulation aperiodiques

Dans l'intégralité du chapitre, nous avons présenté une description *périodique* du transport électronique, qui sous-entend un nombre suffisamment grand de périodes d'hétérostructure ($N_p > 5$ environ) pour négliger de manière pertinente les effets des contacts de part et d'autre de la structure. Il existe cependant un intérêt croissant pour le développement de structures fines (à petit nombre de périodes) [95], dans un but d'exaltation de l'efficacité quantique interne (p_E/N_p). Ces dispositifs sont généralement conçus pour fonctionner dans un régime de fonctionnement hétérodyne [96] qui minimise l'impact du bruit d'obscurité,

plus important dans le cas de structures fines. Dans ce contexte, on développe un modèle de transport aperiodique qui prend explicitement en compte l'influence des contacts sur le transport électronique.

De part et d'autre de la structure, on place des contacts, c'est-à-dire des couches épaisses (de l'ordre de la centaine de nanomètres) souvent du même matériau que les puits quantiques de la région active. Ces couches jouent le rôle de séparateur physique entre la région active et les couches extérieures du détecteur : lorsqu'on englobe le détecteur dans une cavité électromagnétique, les contacts permettent de limiter la diffusion des métaux qui constituent la cavité, dans la région active (ce qui aurait des effets parasites sur les performances du détecteur). Ces couches permettent également d'ajuster l'épaisseur verticale d'une cavité électromagnétique, sans avoir à changer le nombre de périodes dans la zone active. De manière générale, les contacts sont des couches susceptibles d'affecter à la fois le transport électronique et les propriétés optiques d'un dispositif. Ces contacts sont généralement généreusement dopés ($n_{3D} \approx 1e17 \text{ cm}^{-3}$) pour assurer un transport peu résistif, tout en s'assurant que les phénomènes d'absorption par porteurs libres, qui surviennent dans ces couches, ne se font pas au détriment des performances du dispositif.

Modèle

On s'intéresse à un système constitué de N sousbandes dans la région active, région entourée par deux contacts épais, qu'on nommera *droit* et *gauche* (D et G dans les notations). On nomme ω_{Di} et ω_{Gi} les énergies des sousbandes qui composent le contact droit (respectivement gauche). Les contacts étant généralement épais, ces niveaux sont très rapprochés, et forment un quasi-continuum d'états. Par conséquent, on fait l'hypothèse que les mécanismes ISB de diffusion y sont très efficaces et que les populations électroniques se thermalisent rapidement par rapport au temps caractéristique d'interaction avec le niveau discret de la zone active. On peut donc supposer qu'il existe un niveau de Fermi μ_G pour tous les niveaux du contact gauche (μ_D pour le contact droit), ce qui nous permet de simplifier les expressions des densités de population électronique n_D et n_G des deux contacts :

$$n_D = \sum_{i \in D} n_i \quad (2.83)$$

$$n_i = \int_{\omega_i}^{\infty} \rho_{2D}^i f(\omega, \mu_D) d\omega \quad (2.84)$$

Dans la suite, pour simplifier les calculs et clarifier le développement du modèle, on approxime la statistique de Fermi-Dirac en une statistique de Maxwell-Boltzmann¹⁰. Un développement similaire est possible en gardant une statistique de Fermi-Dirac mais au prix de détails techniques qui ne sont pas importants dans le développement du modèle. On écrira donc les populations n_D et n_G comme :

$$n_D = \sum_{i \in D} \frac{m_i^*}{\pi \hbar^2} \frac{e^{-\beta(\omega_i - \mu_D)}}{\beta} \quad (2.85)$$

10. Cette approximation est le plus souvent incorrecte pour les sousbandes des contacts les plus basses en énergie.

avec $\beta = 1/k_B T$. Dans nos équations de transport, on va donc faire le choix de ne suivre que la population totale des contacts plutôt que les populations de chaque sousbandes prises individuellement. On fait également l'hypothèse que les contacts ne peuvent pas interagir entre eux à travers la région active : la séparation physique est suffisamment épaisse (au minimum 1 période) pour que les taux de diffusion entre les sousbandes des deux contacts soient négligeables. Les équations bilans de population s'écrivent alors (n_i désignant les populations des sousbandes composant la région active, entre les contacts) :

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\Gamma_{j \rightarrow i} n_j - \Gamma_{i \rightarrow j} n_i) + (\tilde{\Gamma}_{G \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow G}) + (\tilde{\Gamma}_{D \rightarrow i} - \tilde{\Gamma}_{i \rightarrow D}) \quad (2.86)$$

$$\frac{dn_G}{dt} = \sum_{i=1}^N (\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow G} - \tilde{\Gamma}_{G \rightarrow i}) + J \quad (2.87)$$

$$\frac{dn_D}{dt} = \sum_{i=1}^N (\tilde{\Gamma}_{i \rightarrow D} - \tilde{\Gamma}_{D \rightarrow i}) - J \quad (2.88)$$

où les $\tilde{\Gamma}_{G,D \rightarrow i}$ représentent les courants particuliers depuis l'ensemble des sousbandes des contacts vers une sousbande i de la région active, et J représente le courant particulière entrant et sortant des contacts. Les $N+3$ inconnues des équations de population du transport apériodique sont donc :

$$\begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \vdots \\ n_N \\ n_G \\ n_D \\ J \end{bmatrix} \quad (2.89)$$

De la même manière que pour les équations de transport périodique, on ferme le système d'équations grâce à une relation de conservation de la charge. Soit q_{tot} la charge totale à l'intérieur du système (entre 0 et L_{tot}), Φ le potentiel et $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ la permittivité. On a par l'équation de Poisson :

$$q_{\text{TOT}}(t) = \int_0^L \rho(z, t) dz = \int_0^L \epsilon \frac{d^2 \Phi}{dz^2}(z, t) dz = \epsilon \left[\frac{d\Phi}{dz}(L, t) - \frac{d\Phi}{dz}(0, t) \right] \quad (2.90)$$

La conservation de la charge se fait par l'ajout de contraintes sur les conditions aux bords. En fixant que les dérivées du potentiel en $z = 0$ et $z = L_{\text{tot}}$ sont égales, on impose que la charge à l'intérieur du système est conservée. On fait une hypothèse supplémentaire : loin de la région active, aux bords du domaine, le contact est peu affecté par le transport, et retrouve sa structure de bande à l'équilibre :

$$\frac{d\Phi}{dz}(L) = \frac{d\Phi}{dz}(0) = 0 \quad (2.91)$$

On en déduit donc :

$$\boxed{n_{dop} = n_G + n_D + \sum_{i=1}^N n_i} \quad (2.92)$$

où n_{dop} est la somme de tous les dopants ajoutés à la structure. À ce stade, on a donc :

- $N+1$ équations non-redondantes sur les bilans de population (2.88) ;
- une équation de conservation de la charge.

Il nous manque une équation pour fermer et résoudre le système d'équations portant sur nos $N + 3$ inconnues. Cette dernière équation est imposée par la chute de potentiel appliquée V entre les deux contacts, et notamment leur niveau de Fermi :

$$\mu_D - \mu_G = qV \quad (2.93)$$

Pour convertir l'équation (2.93) en une équation qui porte explicitement sur les populations, on part de l'écriture des populations dans les contacts (2.85) :

$$n_D = \sum_{i \in D} \rho_{2D}^i \frac{e^{-\beta(\omega_i - \mu_D)}}{\beta} \quad (2.94)$$

$$= \frac{e^{\beta\mu_D}}{\beta} \sum_{i \in D} \rho_{2D_i} e^{-\beta\omega_i} \quad (2.95)$$

$$= \frac{e^{\beta\mu_D}}{\beta} \chi_D \quad (2.96)$$

où on a introduit $\chi_D = \sum_{i \in D} \rho_{2D_i} e^{-\beta\omega_i}$. De la même manière, on définit χ_G tel que :

$$n_G = \frac{e^{\beta\mu_G}}{\beta} \chi_G \quad (2.97)$$

En appliquant l'équation (2.93), on obtient :

$$n_D = \frac{e^{\beta(\mu_G + qV)}}{\beta} \chi_D \quad (2.98)$$

Dans l'équation précédente, on identifie n_G grâce à l'équation (2.97).

$$\boxed{n_D = n_G \frac{\chi_D}{\chi_G} e^{\beta qV}} \quad (2.99)$$

On a donc réussi à réunir $N + 3$ équations pour $N + 3$ inconnues. Cette résolution des équations du transport s'effectue dans un schéma de type Schrödinger-Poisson auto-cohérent. Il nous reste une dernière subtilité à traiter, qui est la manière dont le potentiel se distribue sur la structure. En traitement périodique, l'hypothèse est faite que le potentiel électrique appliqué se distribue de manière homogène tout le long de la structure. Ici, on va imposer des conditions aux limites du système, et la distribution de potentiel va être calculée via l'équation de Poisson par la méthode des différences finies. On rajoutera une dernière contrainte : par définition, les contacts sont d'épais réservoirs électroniques, et devraient être faiblement affectés par le transport et l'interaction avec la zone active. Une manière

d'implémenter une telle hypothèse est d'imposer que la différence d'énergie entre le bas de la bande de conduction au bord du système, $\Phi(L = 0)$ (contact gauche) et $\Phi(L = L_{\text{tot}})$ (contact droit), et les niveaux de Fermi respectifs des contacts μ_G et μ_D soit constante :

$$\mu_G - \Phi(L = 0) = C_G \quad (2.100)$$

$$\mu_D - \Phi(L = L_{\text{tot}}) = C_D \quad (2.101)$$

où C_G et C_D sont des constantes qui dépendent du dopage introduit dans les contacts. Comme on a déjà imposé une contrainte sur la différence d'énergie entre les niveaux de Fermi (2.93), la contrainte de l'équation (2.101) se transforme en :

$$\boxed{\Phi(L = L_{\text{tot}}) - \Phi(L = 0) = qV} \quad (2.102)$$

À noter que les bords externes de la structure, souvent des couches métalliques, ne sont pas explicitement décrits. Ce modèle pré-suppose donc un régime ohmique entre les contacts de semi-conducteurs et ces bords métalliques.

Étude paramétrique sur le nombre de période N_p

Dans cette section, on étudie un système modèle de QCD, dont la structure de bande est représentative d'un QCD standard. L'idée ici est d'étudier l'évolution du courant d'obscurité avec le nombre de périodes N_p dans la structure, et de comparer les résultats issus d'un calcul avec des conditions aux limites périodiques, pour des périodes composées de la même structure de bande. Les contacts gauche et droit sont des couches épaisses $L = 500$ Å, dont on étudiera deux situation de dopage volumique $n_{3D} = 5e16 \text{ cm}^{-3}$ (traits pleins) et $n_{3D} = 1e17 \text{ cm}^{-3}$ (des niveaux de dopage standards). Pour chaque structure, on applique un champ électrique entre -20 et $+20 \text{ kV.cm}^{-1}$, et on étudie $N_p = 1, 3, 5$ et 7 . Tous les calculs sont réalisés à $T = 80K$. Les résultats sont présentés dans les figures 2.25 et 2.26.

La figure 2.25-[a] représente une structure de bande pour $N_p = 1$, la figure [b] pour $N_p = 5$. Comme attendu, les effets sur le potentiel de la structure de la prise en compte des contacts sont principalement observables aux interfaces avec les contacts. Les périodes situées au centre de la structure semblent peu affectées et la distribution du potentiel y est homogène. On notera que l'on a limité le nombre de fonctions d'onde à calculer dans la structure : prendre en compte les contacts augmente significativement le nombre de fonctions d'onde à considérer (les contacts sont un quasi-continuum de fonctions d'onde). Mécaniquement la dimension des équations de transport et le nombre de taux de transition ISB à calculer augmentent, de telle manière que, combinée à une convergence lente de l'auto-cohérence Schrödinger-Poisson, une itération de calcul est généralement de l'ordre de la demi-heure. Réaliser une étude paramétrique est donc une opération coûteuse en temps de calcul, et on limitera généralement le nombre de fonctions d'onde dans les contacts. Des calculs supplémentaires utilisant le modèle apériodique sur des structures QCDs réelles peuvent être trouvés en Annexe [C].

Les effets des contacts sont plus remarquables lorsqu'on s'intéresse à la densité de courant sous obscurité (figure 2.26-[a]). L'amplitude absolue du courant semble d'autant plus

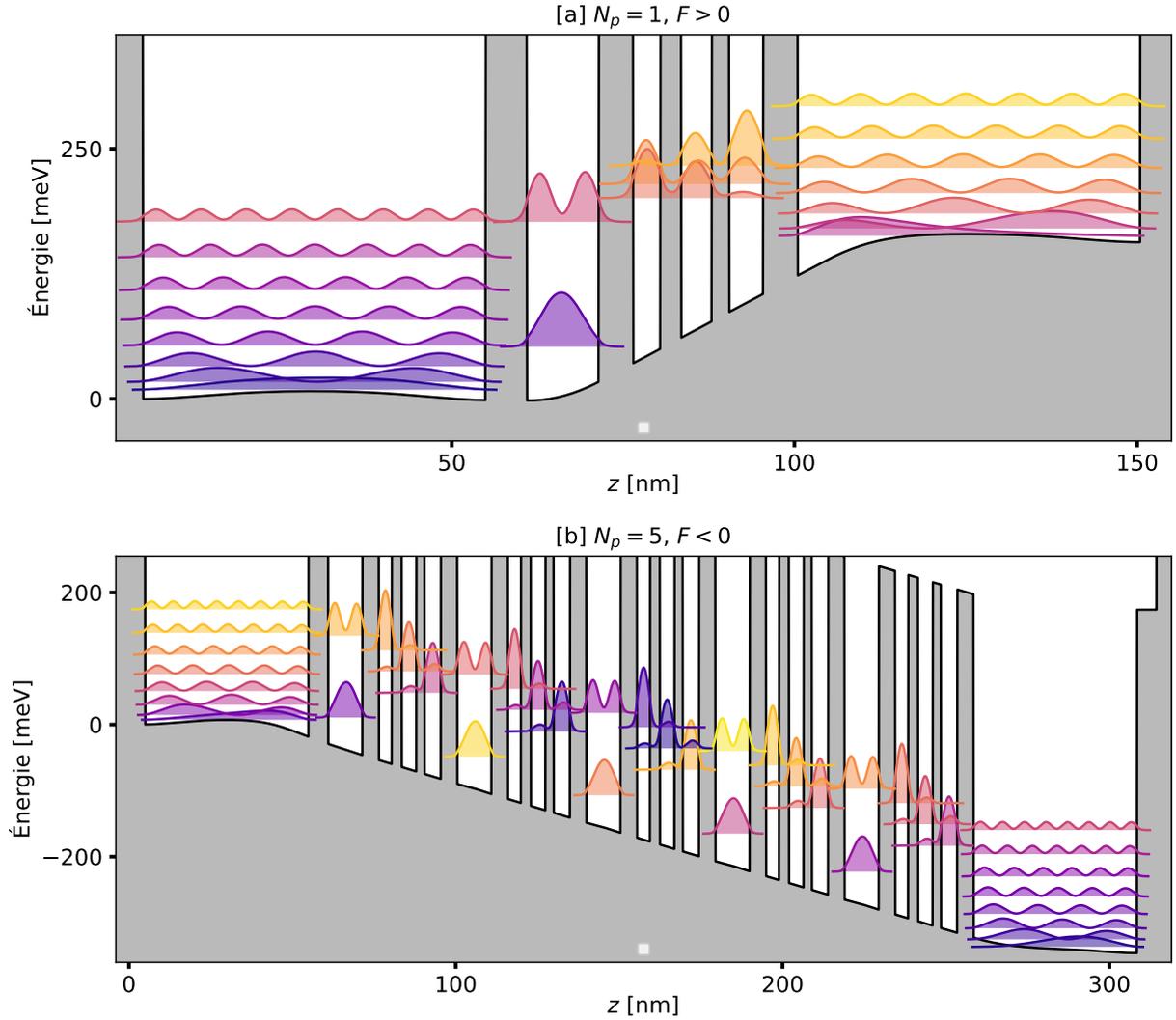


FIGURE 2.25 – Structures de bande pour deux situation de nombre de période N_p et de champ appliqué F [a] une période $N_p = 1$, champ $F > 0$ [b] 5 périodes $N_p = 5$, champ $F < 0$.

importante que le nombre de périodes est faible. Pour $N_p = 1$, et à courant positif, on observe de nombreux “rebonds” dans les courbes de courant : ce sont les signatures spectrales des croisements entre les fonctions d’onde du contact et celles de la cascade, qui génèrent des pics de courant tunnel, similaires à ceux observés dans la figure 2.14. On observe que l’amplitude de ces signatures spectrales diminue lorsqu’on augmente le nombre de périodes, puisque seule la période adjacente au contact est concernée par ces interactions tunnels.

La figure [b] s’intéresse à la convergence des résultats de calcul a périodique en fonction du nombre de période N_p : on trace la somme des différences quadratiques des densités de courant calculées pour un modèle périodique et a périodique. On attend en effet que les résultats a périodiques convergent vers les résultats périodiques à grand nombre de périodes. Le dopage volumique n_{3D} semble influencer l’amplitude des courbes de courant, mais n’af-

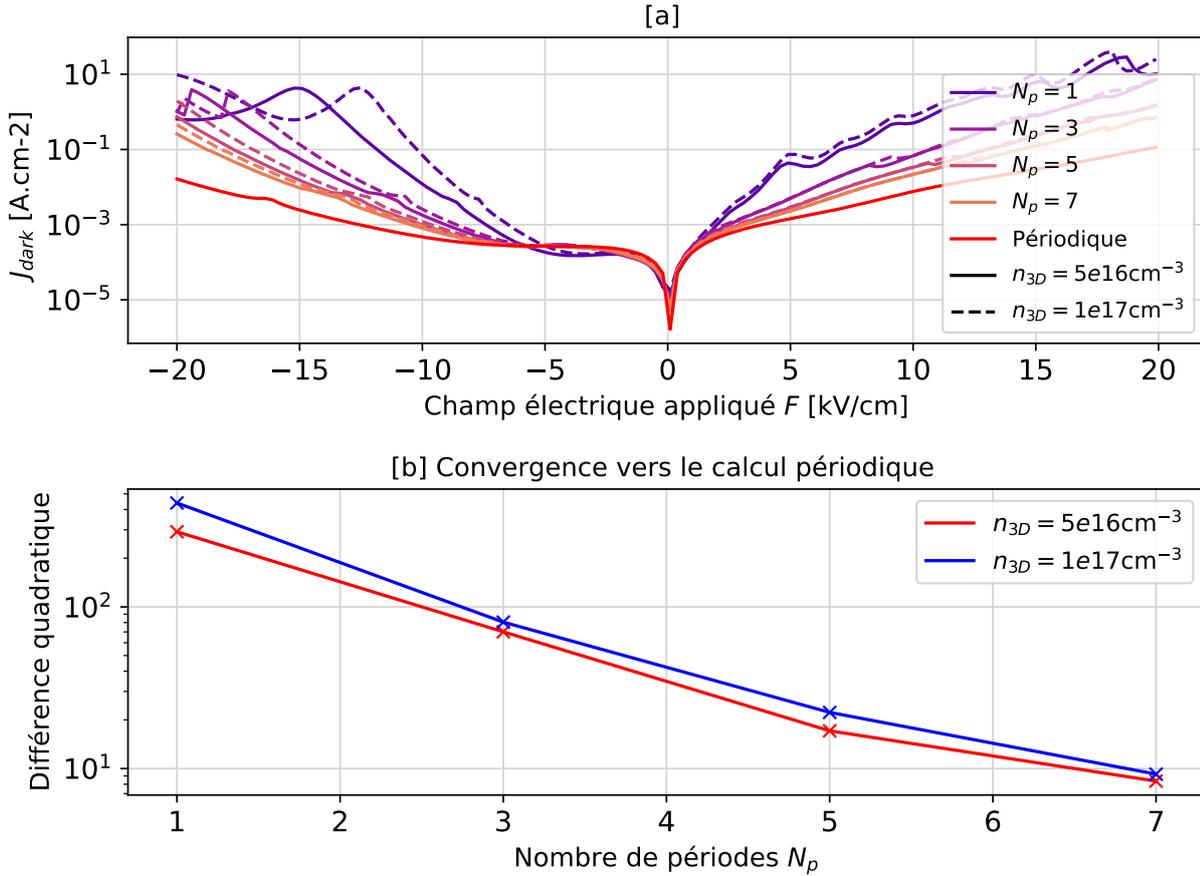


FIGURE 2.26 – [a] Courant d’obscurité en fonction du champ appliqué F , pour différents nombres de périodes N_p (de 1 à 7), et pour deux dopages volumiques des contacts différents. Le calcul périodique est également représenté (courbe rouge). [b] Étude de la convergence des calculs de courant d’obscurité

fecte pas les tendances en fonction du nombre de périodes.

On note que ces résultats ne sont pas comparés à des résultats expérimentaux et restent donc, en ce sens, préliminaires. Dans le chapitre suivant, nous verrons certaines stratégies de conception pour optimiser l’interaction contacts/région active.

2.5.6 Application des évolutions du modèle aux données expérimentales

Dans cette partie, on concrétise les développements présentés dans les parties précédentes en les appliquant à des données expérimentales de courant d’obscurité et de photo-courant. Les résultats sont présentés dans la Figure 2.27. Ces résultats sont donc à comparer aux résultats de modélisation *antérieurs*, déjà présentés dans la Figure 2.18.

Les calculs du photo-courant sont réalisés à partir de l’équation (2.51) : la forme spectrale

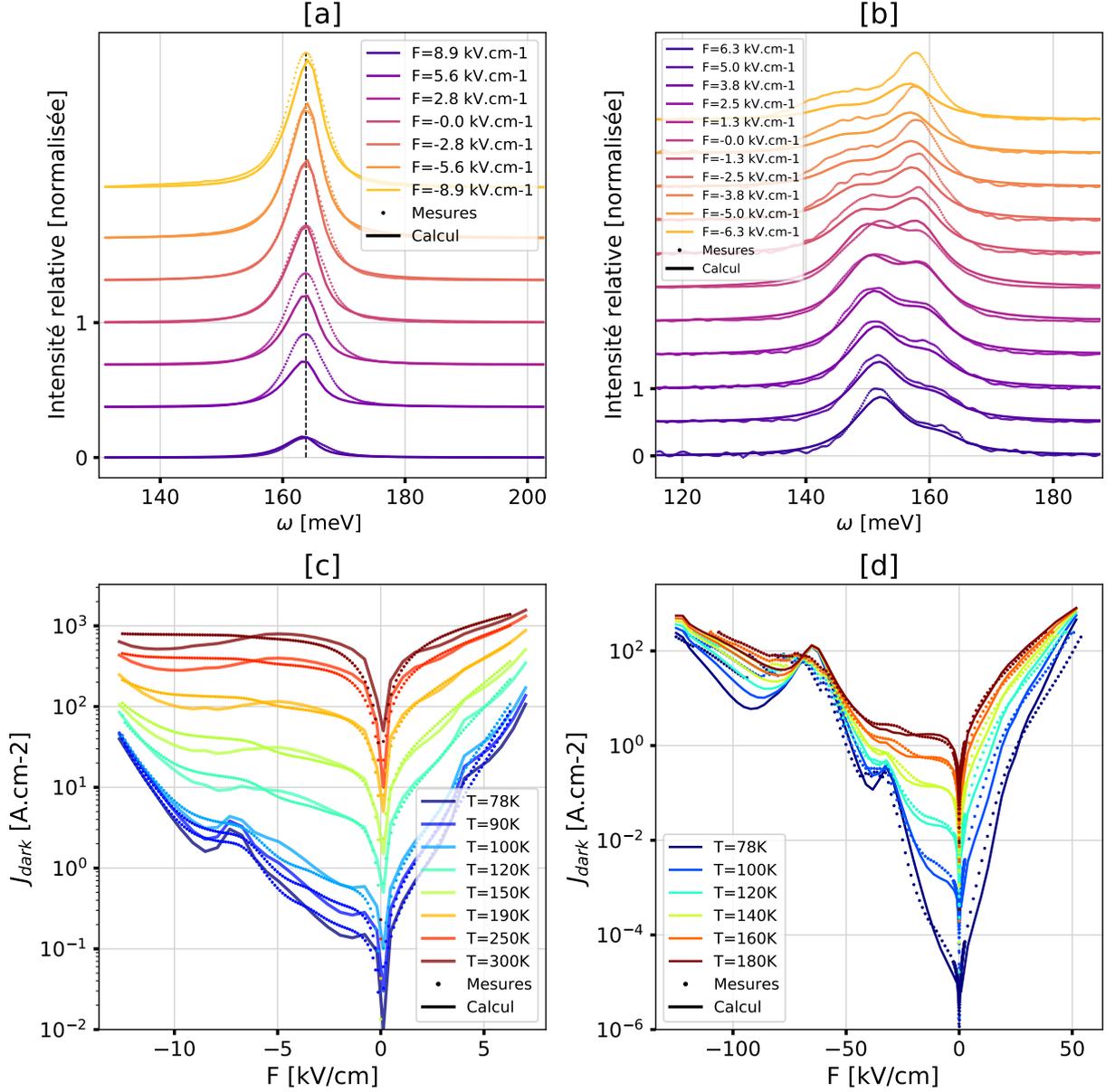


FIGURE 2.27 – Comparaisons expériences/simulations *après développement du modèle*. [a] et [b] : Mesures de photo-courant normalisées (traits pointillés) et calculées (traits pleins) à partir de l'équation (2.51), pour différentes valeurs de champ électrique F appliqué. Les structures de bande correspondantes à ces mesures sont celles déjà présentées Figure 2.17. Les mesures ont été réalisées à 78K. [c] et [d] : Densités de courant surfacique en fonction du champ électrique F appliqué, pour différentes températures. Superposition des mesures (lignes pointillées) et des calculs (traits pleins). Les structures de bande correspondantes à ces mesures sont celles déjà présentées Figure 2.14.

est déterminée par le calcul d'absorption $\alpha(\omega)$ et c'est le calcul de la probabilité d'extraction p_E qui détermine l'amplitude relative des spectres. Ces calculs sont comparés aux mesures de deux échantillons [a] et [b], présentant des situations de couplage tunnel Ω_T différentes,

déjà discutées dans la partie 2.4.2 (deux pics de photo-réponse sont discernables sur [b]). Aucun paramètre n'est ajusté lors des simulations : ni le dopage, ni les largeurs des puits. Les accords obtenus sont très bons : la position des pics, l'amplitude globale des spectres et l'amplitude relative des pics qui s'anticroisent (pour [b]) sont quantitativement reproduits pour l'ensemble de la gamme de champ électrique appliqué. On insiste sur la qualité de ces résultats : à notre connaissance, il existe peu de résultats présentés dans la littérature sur un tel accord entre photo-courant expérimentaux et simulations [97].

Des constatations similaires se font pour le courant d'obscurité. L'accord entre les simulations et les mesures expérimentales est excellent sur une très large plage de température et de champ électrique. Les résonances dues au transport tunnel entre deux niveaux alignés sont bien reproduites en amplitude et en champ, et les niveaux de courant sont bien meilleurs que dans la Figure 2.18. Pour les deux structures, les paramètres nominaux de l'épitaxie ont été utilisés : ni le dopage, ni les largeurs des puits et des barrières ne sont ajustés. Ces résultats sont donc à la fois indicateur d'une bonne modélisation du transport, mais aussi d'une excellente qualité des couches épitaxiées.

Par rapport à l'implémentation initiale, la capacité prédictive de notre modèle de transport a donc été fortement décuplée par ces nouveaux développements. Ces excellents résultats sont notamment obtenus grâce à une nouvelle procédure de calibration de notre modèle, qu'on développera dans la partie suivante.

2.6 Calibration des paramètres matériaux

La conception d'un dispositif s'inscrit nécessairement dans une logique de prédictibilité et de fiabilité des simulations. Dans notre environnement de conception, nous avons identifié trois paramètres de modélisation qui sont des sources majeures d'incertitudes, susceptibles de désaligner l'intégralité des niveaux d'énergie dans la structure et d'altérer nos capacités prédictives :

- la valeur d'offset de bande V_{BO} .
- l'amplitude α de dispersion de la masse effective en fonction de la position en énergie dans la structure de bande (cf. équation (2.66)). On rappelle que les effets de non-parabolicité ont une conséquence sur la position et la forme des spectres d'absorption et de réponse, avec une tendance à déplacer les spectres vers les faibles énergies (*red shift*).
- l'étalement σ de la sigmoïde de potentiel. L'étalement du potentiel aura pour effet de déplacer les pics d'absorption et de réponse vers les hautes énergies (*blue shift*).

En amont d'une campagne de conception et d'épitaxie, il est impératif de calibrer ces trois grandeurs sur des structures de tests. Le procédé de calibration est le suivant ¹¹ : on épitaxie des répétitions de puits quantiques de différentes dimensions, sur lesquels on vient réaliser des mesures optiques multi-passage sur une large plage de fréquence ω . Le signal de transmission donne alors des informations précieuses sur l'absorption spectrale des différentes tailles de puits quantiques. On vient ensuite simuler ces spectres de transmission en utilisant un code dédié, et on calibre les paramètres matériaux décrits précédemment (offset

11. Le crédit revient à Alexandre Delga pour l'élaboration et l'implémentation de ce procédé de calibration.

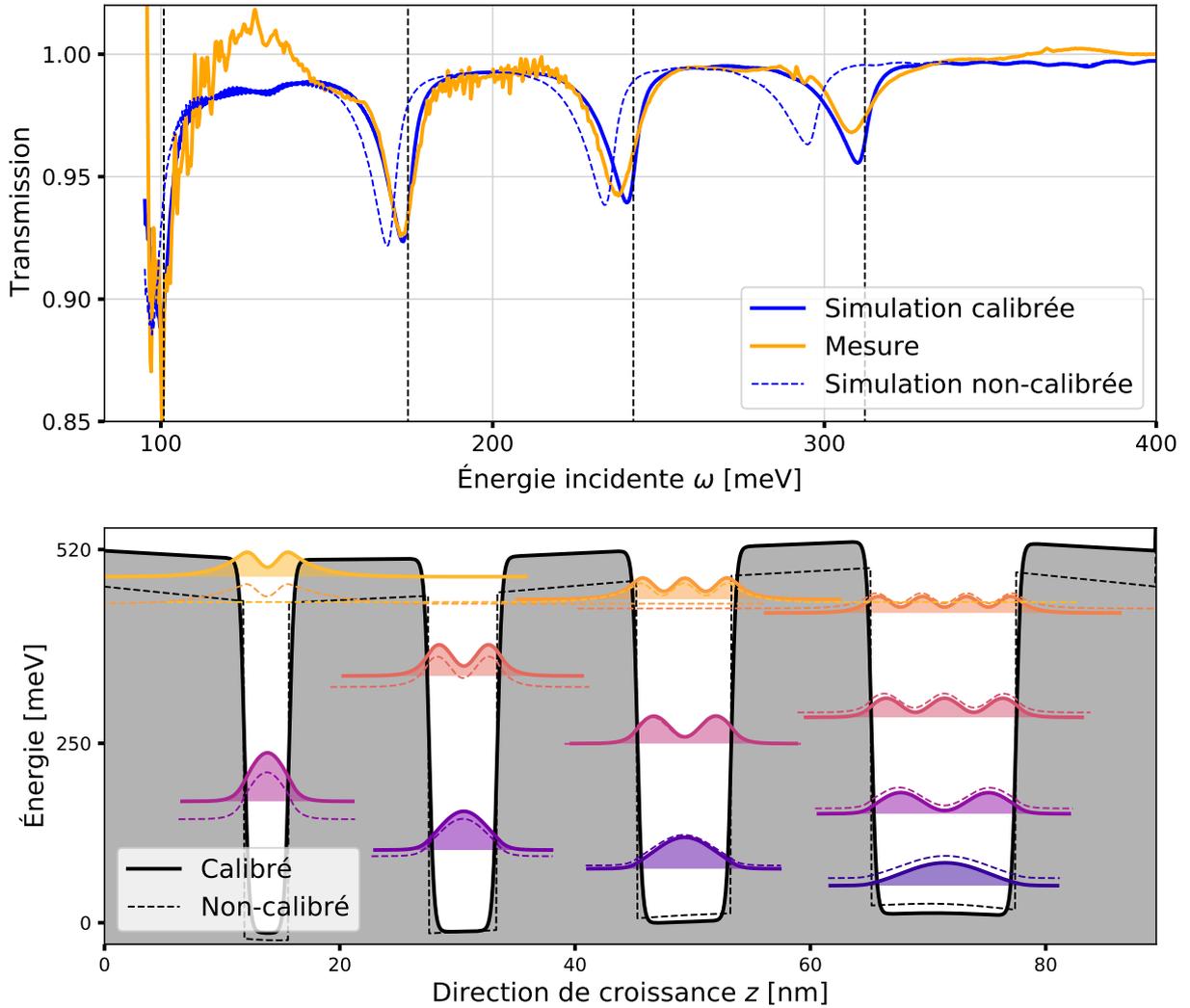


FIGURE 2.28 – [a] Spectre de transmission calculé et mesuré d’une structure de calibration [b] Structure de bande de l’échantillon de calibration, constitué d’une répétition de puits quantiques d’épaisseurs différentes. Les traits pleins et pointillés illustrent la différence de calcul entre un modèle calibré et un modèle non-calibré.

de bande V_{BO} , amplitude de la non-parabolicité α et étalement de la sigmoïde σ) à l’aide d’une procédure de fit : les spectres (amplitudes, positions et formes) sont fittés à l’aide des trois paramètres décrits précédemment. La figure 2.28 présente les spectres de transmission théorique et mesuré (Fig. [a]), la structure de bande du dispositif étudié (Fig. [b]), ainsi que les différences entre un modèle calibré et non-calibré.

Les résultats de calibration sont ensuite ré-injectés dans notre modèle, en amont de la conception des composants réels. À long terme, s’il n’est pas nécessaire de recalibrer les effets de non-parabolicité et les valeurs d’offset de bande, cette procédure sera tout de même utile pour déterminer la valeur d’étalement σ du potentiel, qui est une donnée propre à un bâti d’épitaxie, et qui est donc susceptible de varier selon les procédés utilisés lors de la crois-

sance. Si les résultats présentés ici sont obtenus pour des structures d'InGaAs/AlInAs en accord de maille sur l'InP, cette méthode de calibration pré-conception s'adapte évidemment à n'importe quel matériau et structure.

2.7 Bilan

Dans ce Chapitre, nous avons décrit l'environnement théorique de ce travail de thèse pour traiter le transport électronique et le fonctionnement d'un détecteur à cascades quantiques dans un régime de couplage faible lumière-matière. Progressivement, sur la base d'hypothèses (fonction enveloppe et sousbandes thermalisées principalement), nous avons construit notre modèle de transport : construction de l'Hamiltonien d'hétérostructure, choix de la base de représentation des fonctions d'onde, calcul des taux de diffusion ISB, résolution des équations bilans de population électroniques. Nous avons ensuite présenté les différentes grandeurs physiques mesurables des QCDs, leurs liens avec les performances et comment les calculer.

En comparant des simulations à des données expérimentales sur le courant d'obscurité et la photo-réponse de QCDs, nous avons mis en évidence la nécessité d'implémenter des évolutions de modèle, dans le but d'obtenir une meilleure capacité prédictive de nos outils de simulation.

Nous avons alors successivement étudié différents phénomènes et mécanismes physiques (probabilité d'extraction, masse effective, interfaces non-abruptes de potentiel...) dont la bonne modélisation permet d'améliorer les capacités de prédiction et de reproduction de nos modèles. Enfin, en combinant cette approche à une méthode de calibrage de certains paramètres de modélisation, nous avons montré d'excellents accords entre des mesures expérimentales et les simulations issues du développement de ces évolutions de modèle.

Dans le chapitre suivant, nous aborderons le transport sous un angle plus pragmatique : nous verrons dans quel environnement de développement et de simulation s'inscrit notre modèle, et comment les outils qui constituent cet environnement peuvent être mis à profit de la conception et de l'optimisation de structures réelles.

Chapitre 3

Conception d'un détecteur à cascades quantiques en régime de couplage faible lumière-matière

Dans le chapitre 2, nous avons introduit les éléments théoriques nécessaires à la compréhension et modélisation du transport électronique dans les QCDs. Dans cette partie, nous prenons un virage pragmatique : nous allons discuter point par point du processus de conception d'un QCD, de l'environnement électromagnétique dans lequel il sera inclus, jusqu'à la conception des contacts, en passant par l'optimisation de la structure de bande. Le but du chapitre est donc de présenter un procédé de conception robuste, fiable et prédictif, où l'ensemble des étapes de conception est maîtrisé. Chaque paramètre devra être dimensionné sur des critères quantitatifs qui résultent d'une analyse minutieuse de leur influence sur les performances finales du dispositif.

En amont de la conception, l'utilisateur, par contrainte d'une application, détermine la longueur d'onde λ d'opération du QCD : ce sera, avec la température de fonctionnement T , les deux seuls paramètres d'entrée imposés par l'utilisateur. Les différentes étapes de conception dimensionneront successivement tous les autres degrés de liberté de la conception :

- **Conception de l'environnement électromagnétique** : un bon dimensionnement de l'environnement électromagnétique nous permettra d'optimiser l'efficacité d'absorption η_{abs} . Évidemment, la conception dépend de la géométrie envisagée pour cet environnement (géométrie guidée [95, 98], réseaux d'antennes *patch* [99, 96], réseaux de rubans [100]). Dans la suite, nous nous intéresserons exclusivement à des réseaux d'antennes *patches*, dont le dimensionnement nous permettra de déterminer :
 - les dimensions latérales s des cavités et la période p du réseau, qui permettront d'ajuster la résonance et l'efficacité radiative du mode électromagnétique confiné dans la cavité.
 - la dimension verticale L_z du patch, via le nombre N_p de périodes dans la région active.
 - le dopage n_{2D} des puits quantiques optiques. Le dopage est un paramètre primordial de la conception d'un QCD. Ses effets se ressentent sur la plupart des étapes de conception : l'efficacité d'absorption, les effets de dépolarisation plasma, la non-parabolicité, le courant d'obscurité, les effets de Poisson sur le potentiel... Il

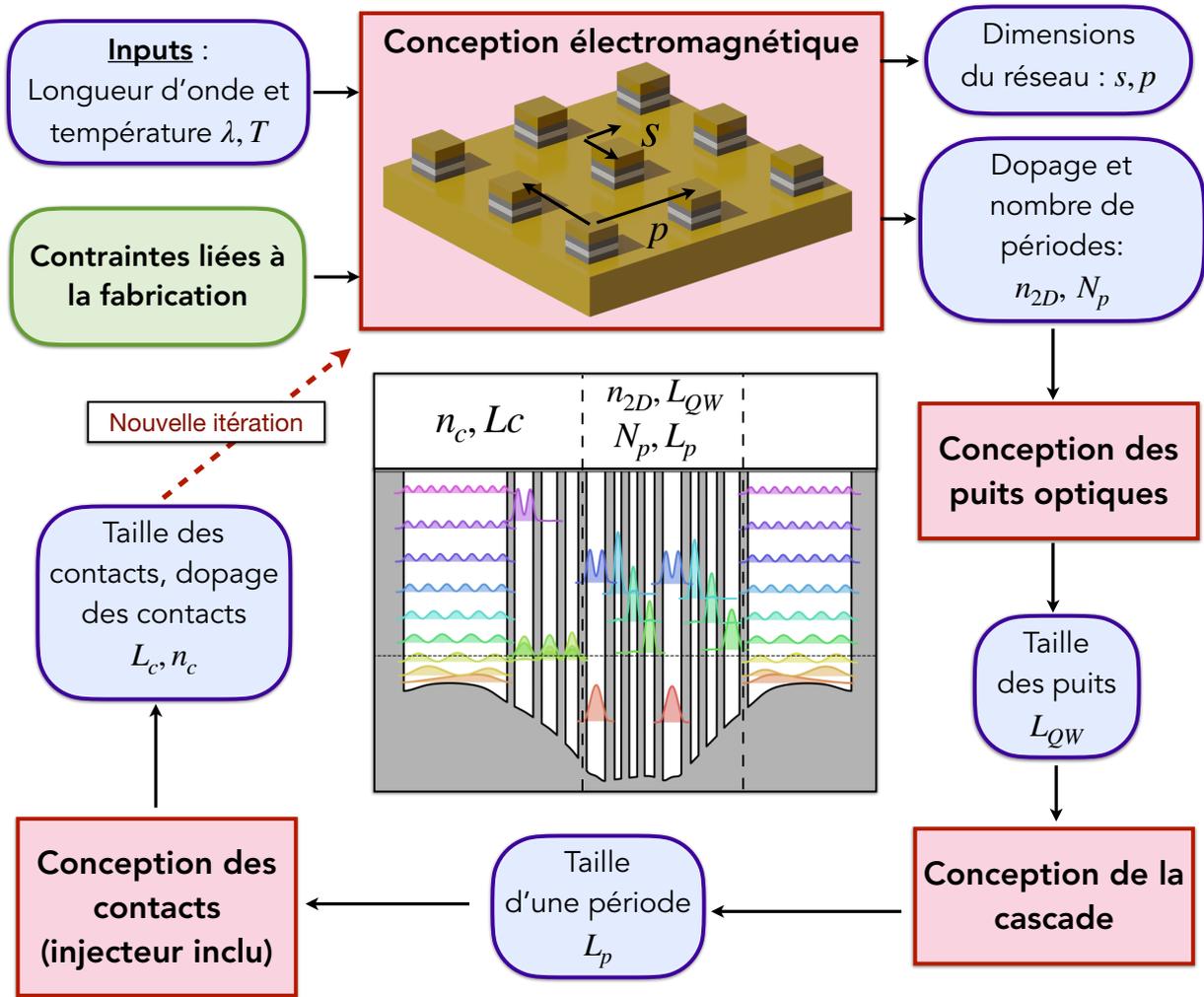


FIGURE 3.1 – Représentation schématique du procédé de conception d’un QCD dans un réseau de cavité patch, avec les différents paramètres à dimensionner successivement. Ce procédé est itératif : à la première itération, on part de valeurs initiales pour certains paramètres (n_c, L_c, L_p notamment).

est primordial de maîtriser à la fois la valeur qu’on lui impose et les effets qu’il génère.

- **Conception de la région active** : le bon dimensionnement de la région active nous permettra d’optimiser l’efficacité quantique interne η_{int} du dispositif en déterminant les paramètres optimaux de :
 - la taille des puits quantiques optiques L_{QW} , qui dépendra de la longueur d’onde cible et du dopage n_{2D} imposés par l’environnement électromagnétique.
 - la taille d’une période L_p , qui sera imposée par la conception et l’optimisation de la structure de bande de la cascade et la connaissance de L_{QW} .
- **Conception des contacts** : bien dimensionner les contacts nous permettra à la fois d’assurer un transport électronique efficace entre ces contacts et la région active, mais également d’optimiser l’efficacité d’absorption. On déterminera en particulier :

- la taille L_c des contacts, et le dopage n_c .
- la structure de bande de l’injecteur, une répétition de puits quantique entre les contacts et la première période de la région active, qui permet d’assurer un transfert de charge contrôlé et de minimiser les interactions parasites entre les fonctions d’ondes des contacts et celles de la région active.

La figure 3.1 résume les étapes de dimensionnement successives d’un QCD en cavité patch. Ce procédé de conception est itératif : en particulier, le dimensionnement de l’environnement électromagnétique nécessite la connaissance a priori des propriétés des contacts (L_c et n_c) ainsi que de la taille d’une période (L_p). La conception se base donc sur des valeurs initiales L_p^0 , L_c^0 et n_c^0 , qui sont réactualisées au cours de la première itération de conception, et ré-injectées pour une seconde itération. Le processus est répété si des écarts considérables sur ces valeurs sont générés entre deux itérations.

3.1 Présentation de l’environnement de développement

La logique de conception présentée précédemment Figure 3.1 est ancrée autour d’outils de conception, que nous présentons dans cette partie.

Dans le chapitre 2, nous avons détaillé les grandes lignes du calcul du transport électronique dans les QCDs en couplage faible lumière-matière. Ce calcul est implémenté dans METIS (pour *Mesoscopic Electronic Transport in ISB Systems*), le logiciel de transport développé depuis plusieurs années au sein du III-V Lab, dans l’équipe moyen-IR¹ [44]. Le cœur du logiciel repose sur une implémentation en C++.

Si METIS est un logiciel très puissant, son utilisation brute n’est ni intuitive ni ergonomique. Pour répondre à cette problématique d’ergonomie, l’équipe de développement renforce depuis quelques années la maturité du logiciel en l’incluant progressivement dans un environnement de développement et de simulation fiable, ergonomique, et suivi, largement basé sur des interfaces développées en Python plus simples d’utilisation. Dans cette section, on présente brièvement ce nouvel environnement, qui a été notamment élargi durant ce travail de thèse. La Figure 3.2 le schématise.

- **Interface de sortie (metPy)** : développé sur la base du Python et des outils Jupyter Notebook, metPy est l’interface de sortie de METIS. Elle prend en entrée les sorties brutes de METIS, organisées dans un fichier de type NETCDF (.nc) similaire à un dictionnaire Python, et trace les résultats du calcul sans qu’aucune manipulation ne soit nécessaire. On peut ainsi tracer structure de bande, courant d’obscurité, absorption, photo-réponse, bruit ... rapidement et de manière interactive.
- **Interfaces d’automatisation (meTools)** : meTools regroupe l’ensemble des outils de calcul qui gravitent autour de METIS et généralement développés sur la base de Python et de Jupyter Notebook. Il comprend des outils d’automatisation de calcul (par exemple, pour des études paramétriques), des outils d’optimisation, des outils de calibrations du code ... On reviendra plus en détail sur certains de ces outils dans ce chapitre (section 3.3.2). MeTools fournit une plateforme d’interaction ergonomique avec METIS et simplifie son utilisation pour l’utilisateur.

1. Virginie Trinité en est la principale développeuse.

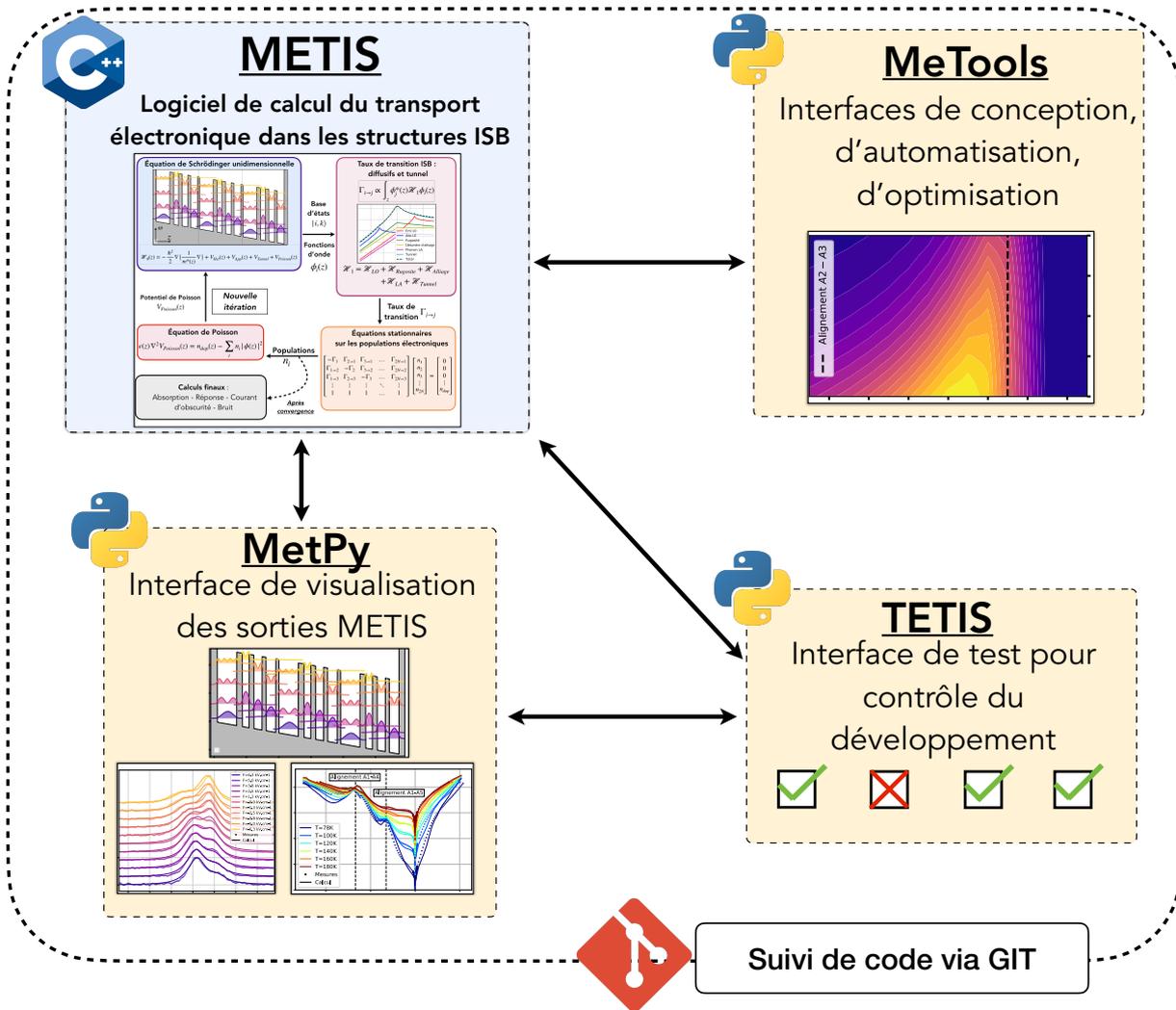


FIGURE 3.2 – Environnement de développement et de simulation pour la conception de structures ISB.

- **Interface de test et suivi de code (TETIS et GIT)** : METIS est un code “maison” et transparent, qui s’oppose à un code industriel et boîte-noire : utilisateurs et développeurs ont un contrôle total et une connaissance complète des modèles implémentés, des domaines de validité dans lesquels ils évoluent, et des hypothèses sur lesquels ils reposent. Si une bonne connaissance du transport électronique dans les systèmes inter-sousbandes est nécessaire pour s’appropriier le code, METIS a l’excellent mérite de fournir des résultats maîtrisés et fiables. Le code est facilement interfaçable et modulable, ce qui est parfaitement adapté à un environnement de recherche, où les modèles sont continuellement raffinés. En contrepartie de cette flexibilité, METIS reste un logiciel en développement permanent : des *bugs* sont fréquemment introduits involontairement durant les phases de développement. Pour limiter ces erreurs, une interface de test a été développée pendant cette thèse : TETIS. Lorsque une nouvelle version de METIS atteint un stade de développement avancé, on lance une série de calculs pré-définis, dont les fichiers d’entrées sont stockés dans TE-

TIS. Ces calculs couvrent un maximum de degrés de liberté : les différents modules de METIS sont tous testés et l'espace des phases des paramètres est exploré (de manière pertinente et efficace). Les résultats de ces calculs sont comparés méthodiquement à des résultats de référence, calculés par la dernière version de METIS validée. L'objectif de cette comparaison est de détecter les dérives potentiel du code, l'introduction non-volontaire de modifications, et de manière générale de s'assurer de la fiabilité du code et de son bon fonctionnement. Les temps de calculs sont également comparés, et il est possible de réaliser un diagnostic d'utilisation pour traquer les oublis de libération de mémoire.

METIS est également suivi par un logiciel d'archivage de version, GIT, qui permet le développement de plusieurs branches en parallèle et la centralisation des versions sur un serveur.

3.2 Conception de l'environnement électromagnétique

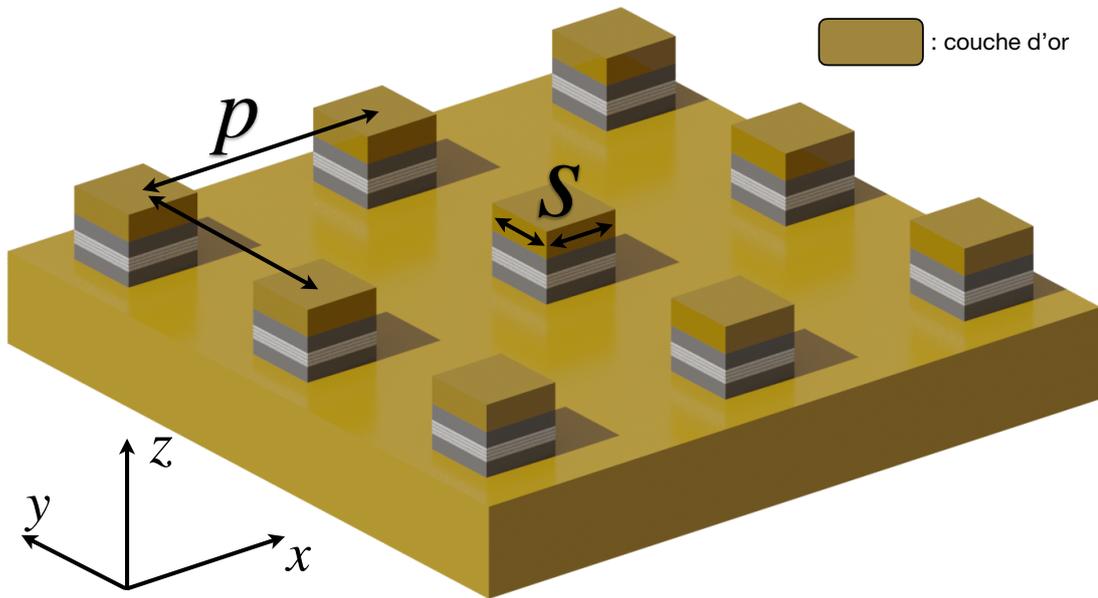


FIGURE 3.3 – Représentation schématique d'un réseau d'antennes patchs, de période de réseau p et de largeur latérale s .

Dans le chapitre précédent, nous avons décrit les règles de sélection ISB, règles qui imposent que seule la composante du champ électromagnétique polarisée selon l'axe de croissance z est mise à contribution pour l'absorption dans les transitions ISB. Cette contrainte de polarisation est un facteur limitant de l'efficacité d'absorption et donc des performances d'un QCD. Dans cette partie, on présente un environnement électromagnétique qui permet de s'affranchir de cette contrainte : le QCD sera embarqué au sein d'une cavité électromagnétique que l'on nommera *patch* [101, 96], qui en plus de redresser la polarisation du champ, permet d'augmenter l'aire effective de collection de photons par rapport à l'aire électrique du dispositif (c'est-à-dire l'aire d'une section de la zone active du QCD) via un *effet antenne* que nous décrirons section 3.2.4.

3.2.1 Introduction à la géométrie patch : modes TM_{lmn} et distribution du champ

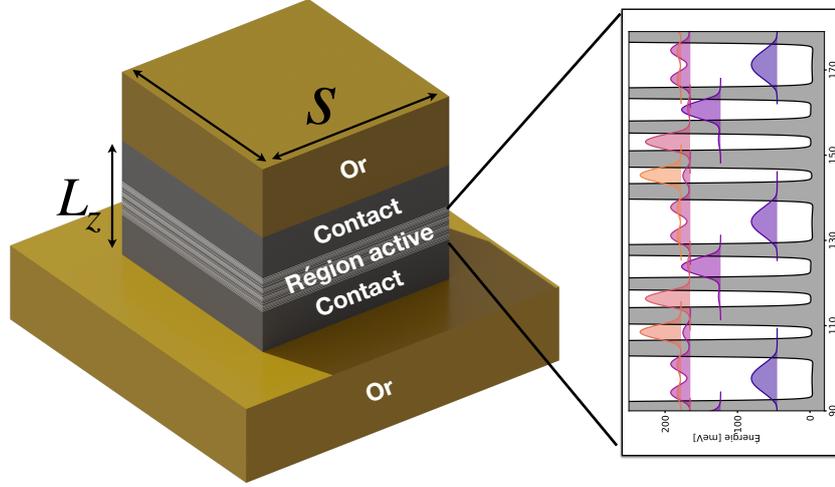


FIGURE 3.4 – Représentation schématique d'une cavité patch et des différentes couches qui la composent.

La Figure 3.4 est une représentation schématique d'une cavité patch. La région active d'épaisseur L_z (les périodes de QCD et les contacts de semi-conducteur) constitue le cœur de la cavité, embarquée entre un plan ($z = 0$) et une couche d'or ($z = L_z$). On s'intéresse généralement à des dimensions latérales de patch de tailles égales, telles que $L_x = L_y = s$.

L'étude extensive des propriétés électromagnétiques d'un réseau d'antennes patches est un sujet particulièrement complexe. On se contente ici de présenter un modèle simplifié, avec pour objectif principal de dégager un maximum de compréhension intuitive du fonctionnement des réseaux d'antennes patches. Pour une compréhension plus en profondeur, le lecteur est invité à se référer aux travaux [102, 101, 103, 104], dont s'inspirent les paragraphes suivants.

En appliquant des conditions aux bords simples (PMC, pour *conducteur magnétique parfait*, sur les flancs latéraux, et PEC, pour *conducteur électrique parfait*, sur les flancs verticaux), on peut résoudre l'équation d'Helmholtz qui porte sur la distribution du champ électromagnétique au sein de la structure $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$:

$$(\Delta + \mathbf{k}^2)\mathbf{E}(x, y, z) = 0 \quad (3.1)$$

où $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ est le vecteur d'onde du mode considéré. On obtient des ondes stationnaires pour le champ électrique [103] :

$$\begin{aligned} E_x(x, y, z) &= E_x^0 \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) \\ E_y(x, y, z) &= E_y^0 \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \\ E_z(x, y, z) &= E_z^0 \cos(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Les conditions aux bords du système permettent de discrétiser les modes électromagnétiques accessibles en modes TM_{lmn} transverses magnétiques, indicés par les nombres entiers l, m, n :

$$k_x = \frac{l\pi}{L_x} \quad k_y = \frac{m\pi}{L_y} \quad k_z = \frac{n\pi}{L_z} \quad (3.3)$$

Ainsi, les fréquences de résonance ν_{lmn} de la cavité sont entièrement déterminées par les paramètres géométriques L_x, L_y et L_z :

$$\nu_{lmn} = \frac{c_0}{2n_{\text{eff}}} \sqrt{\left(\frac{l}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n}{L_z}\right)^2} \quad (3.4)$$

Dans la suite, nous ferons un choix de conception important : l'épaisseur verticale L_z sera toujours inférieure à la longueur d'onde λ de détection ($L_z < \lambda$), avec pour conséquence que seuls les modes $\text{TM}_{lm,n=0}$ seront supportés au sein de la cavité. En appliquant $l = 0$, (donc $k_z = 0$) aux équations de (3.2), on obtient :

$$\begin{aligned} E_x(x, y, z) &= 0 \\ E_y(x, y, z) &= 0 \\ E_z(x, y, z) &= E_z^0 \cos(k_x x) \cos(k_y y) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Pour un mode $\text{TM}_{lm,n=0}$, l'intégralité du champ électrique est donc polarisé selon la direction z , qui est la polarisation du champ utile pour l'absorption dans les puits quantiques. En prenant une cavité telle que $L_z < \lambda$, on a donc réussi à s'affranchir des règles de sélection ISB, puisque l'intégralité du champ est concentré selon la bonne polarisation z . Le redressement de la polarisation du champ électromagnétique pour satisfaire les règles de sélection est une des raisons principales de ce choix d'environnement électromagnétique.

La distribution du champ électrique $E_z(x)$ selon x génère un profil de distribution de charges électriques au sein des plans métalliques. Cette distribution de charges génère elle-même un dipôle électrique orienté dans la direction du plan métallique (selon x pour le mode TM_{01}). C'est en excitant ce dipôle électrique qu'une onde incidente peut se coupler au mode électromagnétique confiné du patch. Ce dipôle est donc naturellement plus à même d'être excité par des ondes planes sous incidence normale et polarisées selon le plan des couches métalliques. À l'inverse, la distribution symétrique du mode TM_{20} génère deux dipôles électriques dans les plans métalliques, dont les directions sont opposées. En incidence normale, on ne peut donc pas exciter le mode TM_{20} [102].

En pratique, nos cavités patchs sont conçues avec des dimensions latérales égales, $L_x = L_y = s$. Les deux premiers modes dominants (c'est-à-dire les modes de plus faible énergie) sont donc dégénérés, TM_{01} et TM_{10} (on a retiré l'indice $n = 0$ de l'écriture). On peut choisir d'exciter l'un des deux modes selon la polarisation de l'onde incidente. On a donc (pour le TM_{10}) :

$$E_z(x) = E_z^0 \cos\left(\frac{\pi}{s}x\right) \quad (3.6)$$

$$\nu_{10} = \frac{c_0}{2n_{\text{eff}}s} \quad (3.7)$$

Dans la suite, et tout le long de ce travail de thèse, c’est ce mode TM_{10} que l’on choisit d’exciter, puisque c’est celui avec le plus petit nombre de nœud de vibration (le TM_{01} fonctionne également).

On rappelle que les résultats précédents découlent d’approximations réductrices (notamment les hypothèses sur les conditions aux bords). La distribution du champ électrique est bien plus complexe, et la résolution des équations de Maxwell de manière numérique est nécessaire pour obtenir des résultats pertinents. En particulier, l’interface air-semiconducteur n’est pas parfaitement réfléchissante et le champ E_z déborde généralement sur une longueur de l’ordre de L_z sur les flancs du patch. De la même manière, la distribution du champ E_z est uniforme selon z uniquement *par couches de matériaux* : à l’interface entre deux couches, le champ subit une discontinuité provoquée par les différences de permittivité diélectrique des matériaux. Dans la suite, nous utiliserons donc les résultats de calcul d’un logiciel développé au sein de l’équipe du III-V lab² pour calculer plus finement la distribution et l’absorption du champ dans les différentes couches de la structure. La figure 3.5-[a] est le résultat du calcul de la distribution des champs parallèles et perpendiculaires à z à l’aide de ce logiciel. On comprend bien que l’approximation du champ entièrement polarisé selon z et parfaitement constant dans cette direction est simplificatrice. On observe en particulier une exaltation de l’intensité du champ dans les couches de puits quantiques dopés : cet effet est connu et exploité, et on le retrouve sous le nom “*epsilon near zero*” dans la littérature [105].

Dans la suite, on détaille le calcul de la dissipation et de l’absorption au sein de la cavité. On distinguera deux canaux de dissipation de l’énergie W_c contenue dans la cavité :

- la dissipation *non-radiative* causée par les différents mécanismes d’absorption dans la cavité, dont on regroupera les contributions dans un taux de dissipation non-radiatif γ_c (exprimé en meV). Ce taux de dissipation quantifie l’interaction du mode électromagnétique confiné avec les différents mécanismes de dissipation internes à la cavité : l’absorption par porteurs libres dans les couches semiconductrices des barrières, des contacts, mais aussi dans les couches de métaux (mécanismes qui seront assimilés à des pertes nettes), et l’absorption générée dans la transition ISB des puits optiques (assimilée à des pertes utiles).
- la dissipation *radiative* du mode électromagnétique confiné vers l’extérieur de la cavité, quantifiée par le taux de dissipation radiatif Γ_c , qui dépend de la géométrie du patch et de son agencement en réseau. Il sera calculé dans la section 3.2.3.

Dans les sections suivantes, on détaille le calcul de γ_c et Γ_c , ce qui nous permettra par la suite de quantifier l’efficacité d’absorption η_{abs} .

3.2.2 Calcul des taux de dissipation non-radiatifs

À chaque couche i , on attribue un modèle d’indice $n_i(\omega) = \sqrt{\epsilon_i(\omega)}$, qui décrit le comportement optique de la couche. Les indices n_i seront approximés comme uniformes par couches, selon z . Les contributions des différents mécanismes sont sommées : on ajoute une contribution de type Drude-Lorentz pour l’absorption due au gap et aux phonons, et de type Drude pour l’absorption par porteurs libres. La permittivité ϵ_{QW}^z selon z des puits

2. le mérite revient à Thomas Poletti et Alexandre Delga pour le développement du code

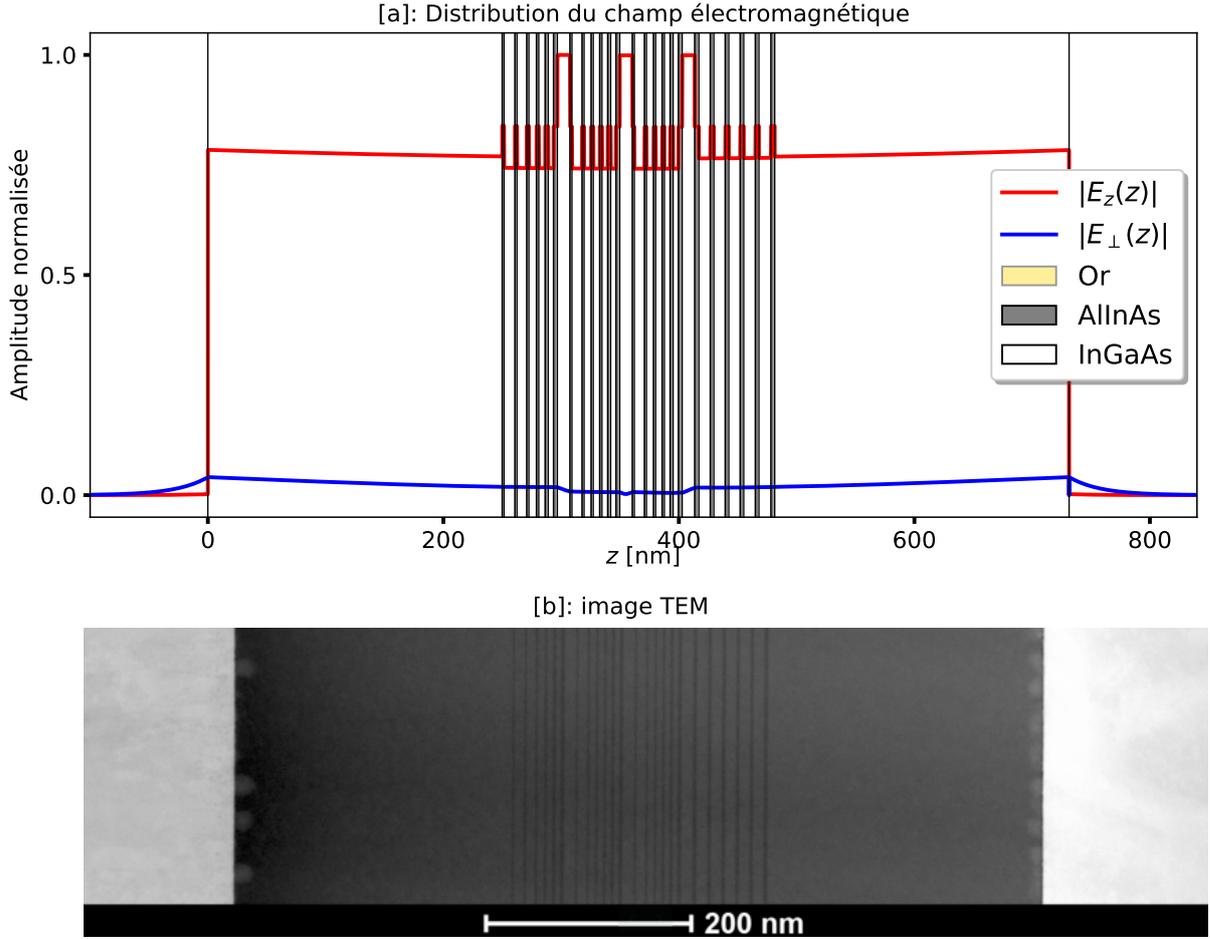


FIGURE 3.5 – [a] Distribution du champ électromagnétique dans les deux directions de polarisation au sein de la cavité. On constate bien l'exaltation du champ E_z dans les puits quantiques par rapport au reste de la structure. [b] Image TEM, fournie par la plateforme Renatech du C2N, d'une coupe verticale d'une antenne patch. La structure simulée est la même que la structurée imagée au TEM.

quantiques est calculée par METIS en prenant en compte la non-parabolicité des bandes :

$$\epsilon_{\text{QW}}^z(\omega) = \epsilon_r \left(1 - \sum_k \frac{\omega_P^2}{\omega^2 - \omega_{\text{ISB}}(k)^2 + i\omega\gamma_{\text{ISB}}} \right) \quad (3.8)$$

$$\omega_P^2 = \frac{e^2 \Delta n_{\text{ISB}}}{\epsilon_r \epsilon_0 m^*(k_F) L_{\text{eff}}} \quad (3.9)$$

où $m^*(k_F)$ est la masse effective calculée à l'énergie de Fermi, Δn_{ISB} est la différence de population entre les sousbandes fondamentales et excitées de la transition ISB, L_{eff} est l'extension spatiale effective des courants de polarisation et ϵ_r est la permittivité du puits quantique en l'absence d'électrons. La figure 3.6 trace successivement la partie réelle, imaginaire et le spectre d'absorption associé à $\epsilon_{\text{QW}}^z(\omega)$, pour un puits quantique de longueur d'onde ciblée $\lambda = 10 \mu\text{m}$, et un dopage $n_{2\text{D}} = 5e11 \text{ cm}^{-2}$. Les résultats sont comparés à un modèle de type Drude-Lorentz classique (qui correspond à une dispersion parabolique et parallèle des

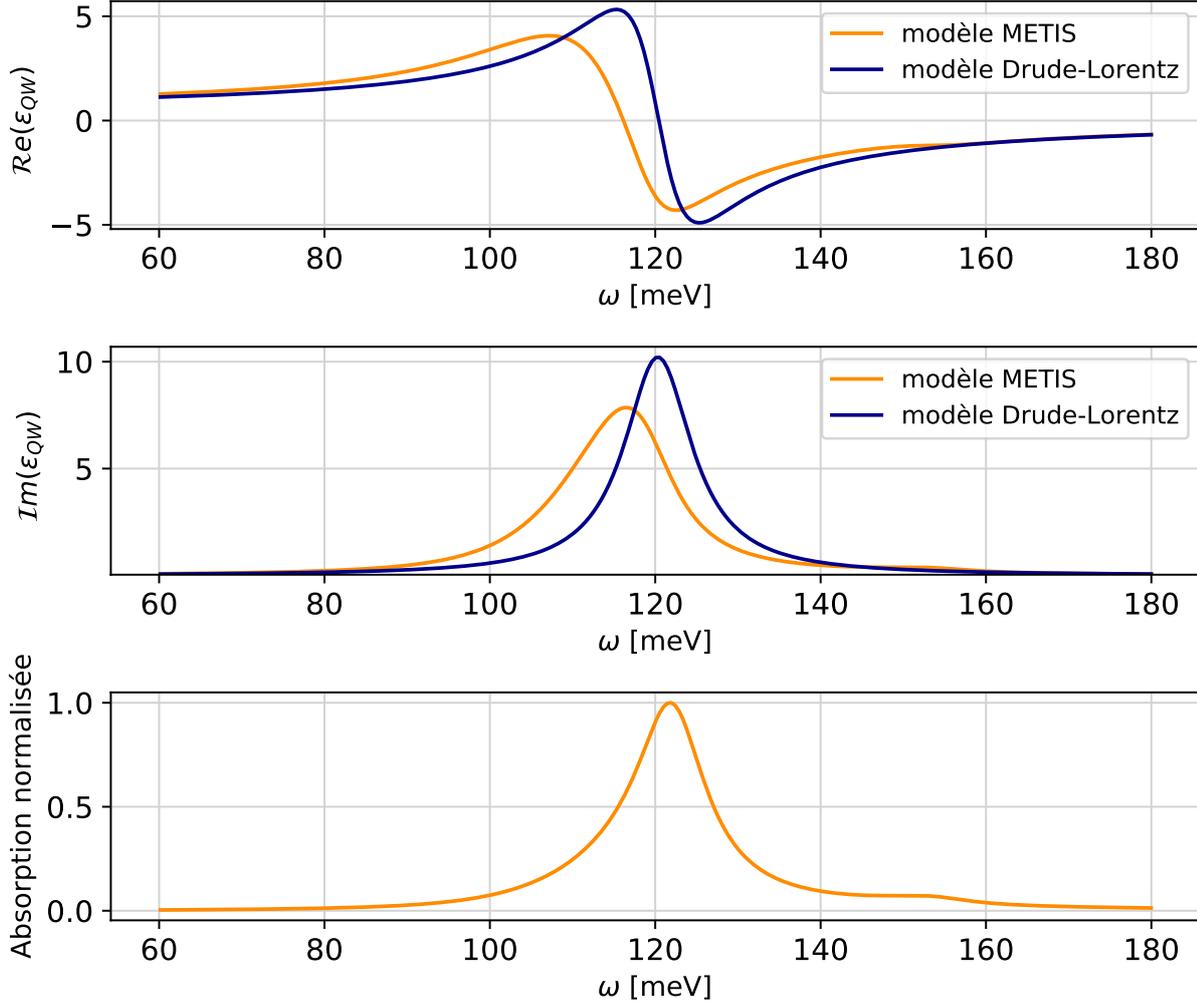


FIGURE 3.6 – Partie [a] réelle et [b] imaginaire de la permittivité des puits quantiques dopés, calculées pour un modèle METIS prenant en compte les effets de non-parabolicité (courbe orange) et un modèle classique de type Drude-Lorentz (courbe bleue). [c] Absorption normalisée correspondante.

sousbandes).

En supposant que les permittivités ϵ_i sont constantes par couches, le taux de dissipation non-radiatif total dans la cavité γ_c s'exprime à l'aide de l'absorption linéique α_c [92] :

$$\alpha_c = \frac{\omega}{2} \sum_i^{N_{\text{couches}}} \frac{\mathfrak{Im}(\epsilon_{\perp}^i) \int_i \epsilon_0 |E_{\perp}^i|^2 dz + \mathfrak{Im}(\epsilon_z^i) \int_i \epsilon_0 |E_z^i|^2 dz}{\int_{\perp} \langle S_z \rangle d\mathbf{r}_{\perp}} \quad [\text{m}^{-1}] \quad (3.10)$$

$$\gamma_c = \frac{c_0}{n_{\text{eff}}} \alpha_c \quad [\text{s}^{-1}] \quad (3.11)$$

où l'on a distingué les contributions à l'absorption dans le plan des couches (\perp , en bleu), des contributions selon l'axe de croissance z (en rouge). S_z est la composante orientée selon

z du vecteur de Poynting, et n_{eff} désigne l'indice effectif de la cavité considérée dans son intégralité. À noter que si γ_c désigne un taux de dissipation (en s^{-1}), on l'exprimera souvent en meV.

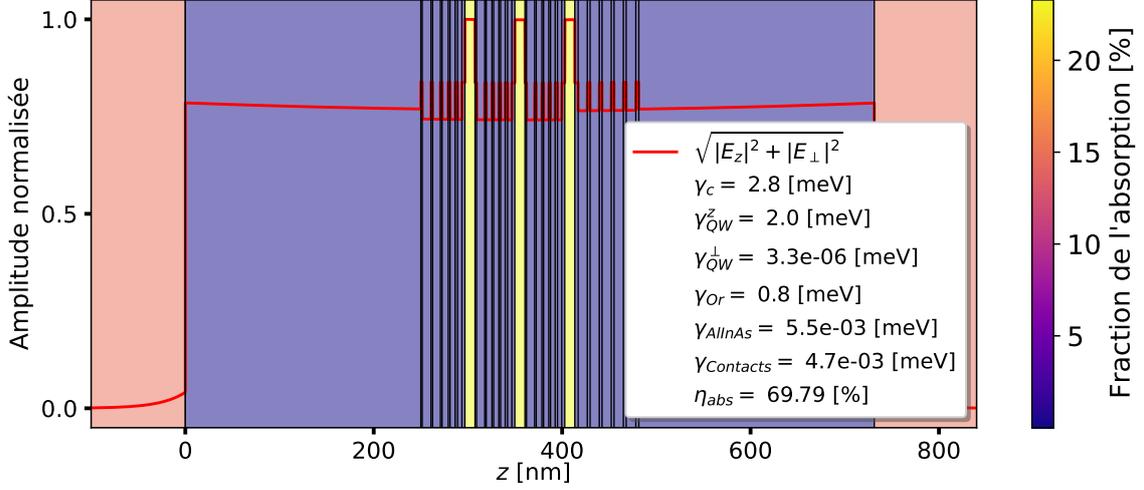


FIGURE 3.7 – Représentation du module du champ (courbe rouge) et de la répartition des pertes par absorption dans les différentes couches de la structure. Les pertes sont majoritairement réparties dans les puits quantiques dopés et les couches d'or.

À l'aide d'un logiciel de simulations électromagnétiques en matrices de transfert, développé au sein de l'équipe, on calcule la distribution des pertes γ_c , décomposées en différentes couches (respectivement, absorption des puits quantiques selon z , absorption des puits quantiques direction perpendiculaire, absorption dans les couches d'or, absorption dans les barrière d'AlInAs, absorption dans les contacts) :

$$\gamma_c = \gamma_{QW}^z + \gamma_{QW}^\perp + \gamma_{Or} + \gamma_{AllnAs} + \gamma_{Contacts} \quad (3.12)$$

On peut alors définir l'efficacité d'absorption $\eta_{\text{abs}}^{\text{nr}}$ non-radiative :

$$\eta_{\text{abs}}^{\text{nr}} = \frac{\gamma_{QW}^z}{\gamma_{QW}^z + \gamma_{QW}^\perp + \gamma_{Or} + \gamma_{AllnAs} + \gamma_{Contacts}} \quad (3.13)$$

Cette efficacité d'absorption décrit donc la capacité de notre empilement à convertir la puissance *injectée dans la cavité* en puissance permettant de générer des photo-porteurs dans la transition ISB. Autrement dit, $\eta_{\text{abs}}^{\text{nr}}$ décrit la probabilité qu'un photon *déjà présent dans la cavité* soit absorbé dans la transition ISB et promeuve un électron dans le niveau excité. On distinguera cette efficacité de l'efficacité de la cavité à convertir un photon issu d'une excitation incidente extérieure en un photon de cavité.

La figure 3.7 représente la distribution de l'efficacité d'absorption au sein de la structure. L'essentiel des pertes est concentré dans les puits quantiques optiques. Malgré la rapide décroissance du champ dans les couches d'or, les pertes métalliques sont responsables de la majorité des pertes inutiles. Il est particulièrement intéressant de noter que les contacts,

pourtant dopés à $1e17 \text{ cm}^{-3}$ et de tailles conséquentes, nuisent de manière négligeable à l'efficacité d'absorption. En d'autres termes, augmenter ou diminuer la taille des contacts, notamment pour ajuster la taille verticale de la cavité, ne se fait pas nécessairement au détriment de l'efficacité d'absorption. Une épaisseur de contact conséquente est également nécessaire pour éloigner significativement la région active des couches d'or, dont la diffusion dans les contacts est visible dans l'image TEM³ de la figure 3.5-[b]. À noter également que la structure présentée dans les figures 3.5 et 3.7 est une structure qui résulte de plusieurs itérations du processus de conception décrit en introduction du chapitre (figure 3.1).

3.2.3 Calcul des taux de dissipation radiatifs

Dans cette partie, on discute de l'efficacité d'interaction entre une onde électromagnétique incidente, donc une excitation externe, et le réseau de cavités patchs : l'objectif ici est de dimensionner la période p et de comprendre son influence sur l'efficacité d'absorption du dispositif.

Calcul de Γ_c

Le calcul des pertes radiatives d'un réseau 2D de patch est détaillé en Annexe [B], et repose sur l'extension en 2D du calcul de C.Balanis [103] pour un réseau de patch 1D. Le calcul se résume de la manière suivante : un patch peut être assimilé à deux fentes rayonnantes (les deux faces latérales qui rayonnent du champ). Connaissant le champ rayonné d'une fente $E_\phi^{1\text{Fente}}$, on peut facilement calculer le champ rayonné $E_\phi^{2\text{Fentes}}$, résultant de l'interférence des champs émis par deux fentes (donc d'un patch), via un facteur de réseau $\text{AF}^{2\text{Fentes}}$ (une grandeur qui intègre toute l'information relative à l'interférence des deux champs). De la même manière, le champ $E_\phi^{\text{Réseau2D}}$ résultant de l'interférence des champs émis par les patchs d'un réseau 2D se calcule par l'intermédiaire d'un nouveau facteur de réseau $\text{AF}^{\text{Réseau2D}}$. À partir de l'expression de $E_\phi^{\text{Réseau2D}}$, on peut calculer la puissance radiative dissipée vers l'extérieur $P_r^{\text{Réseau2D}}$ par le réseau 2D :

$$P_r^{\text{Réseau2D}} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\eta_0} \underbrace{|\text{AF}^{\text{Réseau2D}} \underbrace{\text{AF}^{2\text{Fentes}} E_\phi^{1\text{Fente}}(r, \theta, \phi)}_{E_\phi^{2\text{Fentes}}}|^2}_{E_\phi^{\text{Réseau2D}}} r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \quad (3.14)$$

(3.15)

où η_0 est l'impédance du vide. En exprimant l'énergie stockée dans une cavité patch W_c :

$$W_c = \iiint_V \epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} |E_z(x)|^2 dV \quad (3.16)$$

$$= \epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} |E_0^z|^2 \int_0^s \cos^2\left(\frac{\pi}{s}x\right) dx \int_0^s dy \int_0^{L_z} dz \quad (3.17)$$

$$= \frac{\pi \epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} |E_0^z|^2}{2} s^2 L_z \quad (3.18)$$

3. Remerciements à Gilles Patriarche et Konstantinos Pantzas, de la plateforme Renatech du C2N pour nous avoir fourni les images TEM

on peut exprimer Γ_c à partir de l'énergie totale stockée dans les patches du réseau $N^2 W_c$, avec N^2 le nombre de patches dans le réseau :

$$\Gamma_c = \frac{P_r^{\text{Réseau2D}}}{2N^2 W_c} \quad (3.19)$$

L'évaluation de l'équation (3.19) se fait numériquement (cf. Annexe [B]). Les résultats numériques correspondent de manière satisfaisante à l'expression analytique calculée par [101] (Eq. 2.57), expression évaluée au couplage critique :

$$\Gamma_c = \frac{8c_0 L_z}{n_{\text{eff}}^2 p^2} \quad (3.20)$$

où dans l'hypothèse d'une cavité parfaite, on a négligé le facteur de correction a introduit par l'auteur de [101]. En particulier, la dépendance en $\frac{1}{p^2}$ est retrouvée. Nous allons voir dans la suite comment exploiter ce résultat et comment le taux de dissipation radiatif est relié à la capacité de la cavité à se coupler avec l'excitation incidente.

Résonateur et couplage critique

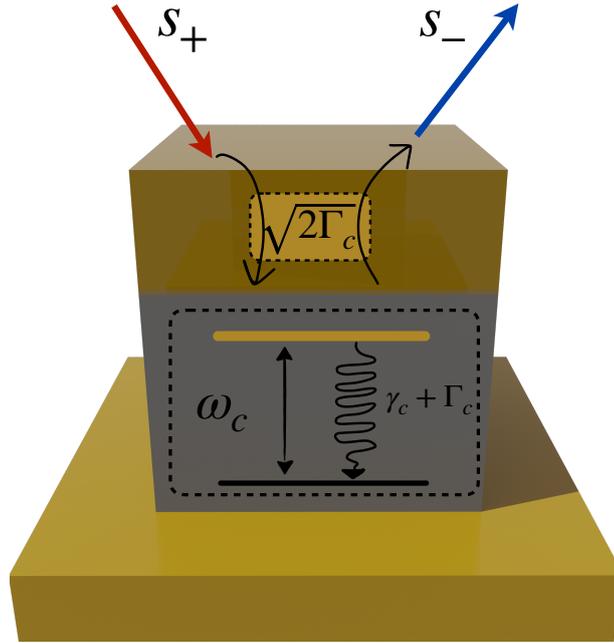


FIGURE 3.8 – Représentation schématique d'un réseau d'antennes patch assimilé à un résonateur de fréquence propre ω_c , présentant des pertes radiatives Γ_c et non-radiatives γ_c , optiquement pompé par une onde incidente de puissance $|s_+|^2$.

Pour comprendre et modéliser simplement le comportement spectral de notre cavité, on va utiliser un formalisme simple mais puissant, qui repose sur le cadre plus général de la théorie des modes couplés [106, 107, 108]. L'idée ici, que l'on reprendra tout au long de ce manuscrit, est d'assimiler notre réseau d'antennes patch à un résonateur d'amplitude a_c et de fréquence de résonance ω_c (cf. Figure 3.8). Ce résonateur interagit avec le monde

extérieur (continuum électromagnétique, phonons...) et dissipe donc de l'énergie de manière radiative (Γ_c) et non-radiative (γ_c) dans ces différents canaux de dissipation. Pour injecter de l'énergie dans le résonateur, on le soumet à une onde incidente (ici une excitation harmonique de fréquence ω) de puissance $|s_+|^2$. Après interaction avec le résonateur, l'onde incidente est réfléchiée, et la puissance réfléchiée est notée $|s_-|^2$. L'amplitude a_c du résonateur cavité obéit à l'équation d'évolution suivante :

$$\boxed{\frac{da_c}{dt} = \underbrace{i\omega_c a_c}_{\text{Évolution unitaire}} - \underbrace{(\gamma_c + \Gamma_c)a_c}_{\text{Dissipation}} + \underbrace{\kappa_c s_+ e^{i\omega t}}_{\text{Excitation}}} \quad (3.21)$$

où κ_c représente la qualité du couplage avec l'onde incidente. On peut démontrer que la qualité de ce couplage κ_c est intimement lié aux pertes radiatives du résonateur. La démonstration se trouve dans [107], et repose sur la conservation des flux de puissance échangés et des arguments sur la symétrie temporelle des équations de la CMT. Dans notre cas à un résonateur :

$$\kappa_c = \sqrt{2\Gamma_c} \quad (3.22)$$

L'équation (3.21) est facilement résolue, et de la définition de l'absorption \mathcal{A}_c et de la réflectivité \mathcal{R}_c , on tire :

$$\mathcal{A}_c(\omega) := 2\gamma_c \frac{|a_c|^2}{|s_+|^2} = \frac{4\Gamma_c\gamma_c}{(\Gamma_c + \gamma_c)^2 + (\omega - \omega_c)^2} \quad (3.23)$$

$$\mathcal{R}_c(\omega) := \frac{|s_-|^2}{|s_+|^2} = \frac{(\Gamma_c - \gamma_c)^2 + (\omega - \omega_c)^2}{(\Gamma_c + \gamma_c)^2 + (\omega - \omega_c)^2} \quad (3.24)$$

Les représentations spectrales de l'absorption et de la réflectivité sont donc de classiques fonctions Lorentziennes \mathcal{L} ($1 - \mathcal{L}$ pour la réflectivité), centrées sur la résonance ω_c et d'élargissement spectral $\gamma_c + \Gamma_c$.

De l'équation (3.24), on tire une propriété importante du résonateur à la résonance $\omega = \omega_c$: si les pertes radiatives Γ_c sont exactement égales aux pertes non-radiatives γ_c , l'absorption \mathcal{A}_c atteint l'unité (et \mathcal{R}_c zéro). Autrement dit, sous réserve de cette adaptation d'impédance $\gamma_c = \Gamma_c$ et de la résonance entre l'onde incidente et le mode de cavité, l'intégralité de la puissance incidente $|s_+|^2$ est absorbée dans le mode de cavité :

$$\mathcal{A}_c(\omega = \omega_c, \gamma_c = \Gamma_c) = 1 \quad (3.25)$$

$$\mathcal{R}_c(\omega = \omega_c, \gamma_c = \Gamma_c) = 0 \quad (3.26)$$

Cette situation d'injection parfaite est appelée *couplage critique*. Du point de vue de la conception, l'absorption $\mathcal{A}_c(\omega)$ s'interprète donc comme une efficacité d'absorption de la puissance incidente en puissance injectée dans la cavité, que l'on cherche à maximiser. *C'est donc en ajustant la période p du réseau que l'on adaptera Γ_c à γ_c et que l'on se rapprochera de la condition de couplage critique et d'une injection de puissance optimale dans la cavité.*

La figure 3.9 présente des mesures de réflectivité (sous la forme d'absorption $\mathcal{A} = 1 - \mathcal{R}$, traits pleins) d'un système QCD embarqué dans une cavité de type antenne patch.

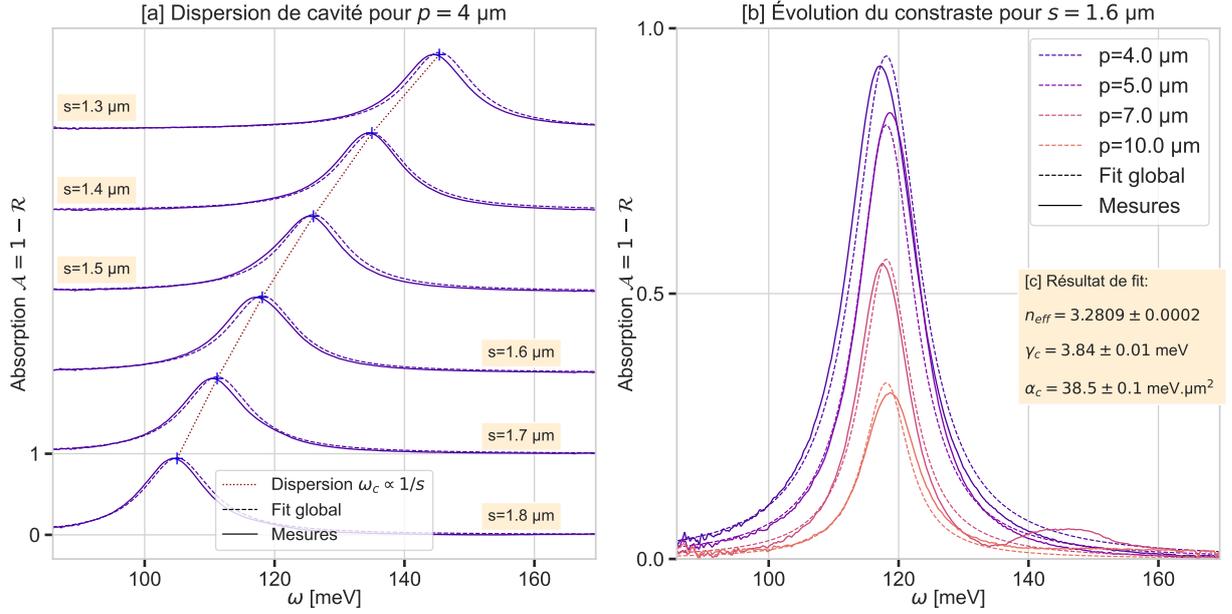


FIGURE 3.9 – Spectres d’absorption mesurés (traits pleins) et calculés (traits pointillés) présentés pour [a] $p = 4 \mu\text{m}$ fixé, s variable [b] $s = 1.6 \mu\text{m}$ fixé, p variable. Les mesures sont réalisées par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR, Bruker Vertex 70) à l’aide d’une paire de miroirs parabolique ($F = 180 \text{ mm}$) et elliptique ($F = 282/42 \text{ mm}$) et d’un photo-détecteur MIR de type DTGS. Le spectre d’un miroir d’or est utilisé comme référence pour la normalisation des spectres. Les calculs sont eux obtenus après une procédure de fit *global*, sur l’ensemble des données expérimentales (voir Annexe [C] pour l’ensemble des spectres mesurés). La dispersion est calculée via l’indice effectif n_{eff} Eq. (3.7), les pertes radiatives via α_c Eq.(3.20) et les pertes non-radiatives γ_c sont fixées pour l’ensemble des couples (p, s) . L’insert [c] donne les paramètres issus du fit.

- **Figure [a]** : on fixe $p = 4 \mu\text{m}$, et on regarde l’évolution des spectres lorsque s varie. Comme prévu par l’équation (3.7), la résonance du mode de cavité se décale de manière inversement proportionnelle à s . En revanche, le contraste à résonance n’est pas affecté.
- **Figure [b]** : on fixe $s = 1.6 \mu\text{m}$, et on regarde l’évolution des spectres lorsque p varie. On observe une augmentation du contraste lorsque p diminue. En effet, en diminuant p , on augmente Γ_c (cf. Eq.(3.20)), ce qui nous permet d’ajuster sa valeur par rapport à γ_c , et donc de nous rapprocher du couplage critique.

Les mesures (traits pleins) sont superposées à un fit numérique (traits pointillés). Les détails de la procédure de fit *global* sont dans la légende de la figure 3.9.

3.2.4 Optimisation électromagnétique

Efficacité d’absorption

L’efficacité d’absorption η_{abs} englobe donc deux composantes :

- $\mathcal{A}_c(\omega)$ (Eq.(3.24)) la fraction de la puissance incidente injectée dans les cavités patch ;

- $\eta_{\text{abs}}^{\text{nr}}$ (Eq.(3.13)) la fraction de la puissance injectée dans les cavités patchs absorbée dans les puits quantiques.

L'efficacité d'absorption s'écrit donc :

$$\eta_{\text{abs}} = \mathcal{A}_c \frac{\gamma_{\text{QW}}^z}{\gamma_{\text{QW}}^z + \gamma_{\text{QW}}^\perp + \gamma_{\text{Or}} + \gamma_{\text{AllnAs}} + \gamma_{\text{Contacts}}} \quad (3.27)$$

Dans les parties précédentes, on a détaillé le calcul numérique de l'efficacité d'absorption. Dans cette partie, on propose d'aborder le problème de manière plus qualitative, pour tenter d'en tirer la substance physique nécessaire à une compréhension intuitive. On se place donc dans une situation de couplage critique $\mathcal{A}(\omega_c) = 1$, et on ré-écrit l'efficacité d'absorption comme étant le rapport de ses contributions principales :

$$\eta_{\text{abs}} \approx \frac{\gamma_{\text{QW}}^z}{\gamma_{\text{QW}}^z + \gamma_{\text{Or}}} \quad (3.28)$$

On peut approximer grossièrement les pertes de la transition ISB γ_{QW}^z et les pertes dans les métaux γ_{Or} à l'aide des paramètres que l'on souhaite dimensionner, à savoir le dopage $n_{2\text{D}}$ et le nombre de période N_p .

- Les pertes dans la transition ISB sont proportionnelles au carré de la pulsation plasma ω_p , donc au dopage, et l'intégration sur le domaine fait apparaître une dépendance au nombre de périodes N_p :

$$\gamma_{\text{QW}}^z \propto n_{2\text{D}} N_p \quad (3.29)$$

- Dans les métaux, les pertes proviennent de la distribution du champ sur une épaisseur de peau δ . La fraction du champ qui participe aux pertes métalliques est donc proportionnelle à $\delta/(L_z + \delta)$, avec $\delta \ll L_z$. On a donc :

$$\gamma_{\text{Or}} \propto \frac{1}{2L_C + N_p L_p} \quad (3.30)$$

où L_C est l'épaisseur des contacts. On obtient de ces considération une expression semi-analytique de l'efficacité d'absorption en fonction des paramètres à dimensionner :

$$\eta_{\text{abs}} \approx \frac{\alpha_0 n_{2\text{D}} N_p}{\alpha_0 n_{2\text{D}} N_p + \frac{\alpha_1}{L_C + N_p L_p}} \quad (3.31)$$

où α_0 et α_1 sont deux constantes.

Efficacité quantique externe

L'efficacité quantique externe, en situation de couplage critique s'écrit alors :

$$\eta_{\text{ext}} = \frac{p_E}{N_p} \eta_{\text{abs}} = p_E \frac{\alpha_0 n_{2\text{D}}}{\alpha_0 n_{2\text{D}} N_p + \frac{\alpha_1}{L_C + N_p L_p}} \quad (3.32)$$

Bruit

La densité spectrale de bruit $S_{1\text{Patch}}$ d'un QCD sous obscurité, embarqué dans une antenne patch de taille latérale s s'écrit principalement sous la forme d'un bruit thermique Johnson [109] :

$$S_{1\text{Patch}} = \frac{2e}{N_p} (J_{\text{dark}}^+ + J_{\text{dark}}^-) s^2 \quad (3.33)$$

où J_{dark}^\pm représente les densités surfaciques de courants d'obscurité contra-propageants. À l'équilibre thermodynamique, $J_{\text{dark}}^+ = J_{\text{dark}}^-$ (et $J_{\text{dark}} = J_{\text{dark}}^+ - J_{\text{dark}}^- = 0$). Pour un QCD standard (c'est-à-dire avec une structure de bande classique), les densités surfaciques de courant d'obscurité J_{dark}^\pm s'approximent par le courant circulant entre les deux sousbandes $|0\rangle$ et $|1\rangle$ de la transition optique :

$$J_{\text{dark}}^+ \approx \Gamma_{1 \rightarrow 0} n_1 \quad (3.34)$$

$$= \Gamma_{1 \rightarrow 0} \frac{\rho_{2\text{D}}}{\beta} \log(1 + e^{-\beta(\omega_{10} - \mu_F)}) \quad (3.35)$$

$$\approx \Gamma_{1 \rightarrow 0} \frac{\rho_{2\text{D}}}{\beta} e^{-\beta(\omega_{10} - \mu_F)} \quad (3.36)$$

$$\approx \Gamma_{1 \rightarrow 0} \frac{\rho_{2\text{D}}}{\beta} e^{\frac{\beta}{\rho_{2\text{D}}} n_{2\text{D}}} e^{-\beta\omega_{10}} \quad (3.37)$$

où l'on a utilisé l'expression de l'énergie de Fermi μ_F lorsque $\mu_F > \omega_0$. On obtient donc pour la densité spectrale de bruit :

$$S_{1\text{Patch}} = \frac{4e}{N_p} \Gamma_{1 \rightarrow 0} \frac{\rho_{2\text{D}}}{\beta} e^{\frac{\beta}{\rho_{2\text{D}}} n_{2\text{D}}} e^{-\beta\omega_{10}} s^2 \quad (3.38)$$

Si on passe d'un patch unique à un réseau de patch, il faut simplement multiplier l'expression de la densité spectrale de bruit $S_{1\text{Patch}}$ par le nombre de patches. Pour une surface A , et une période p , on a donc :

$$S_{\text{Réseau}} = S_{1\text{Patch}} \frac{A}{p^2} = \frac{4e}{N_p} \Gamma_{1 \rightarrow 0} \frac{\rho_{2\text{D}}}{\beta} e^{\frac{\beta}{\rho_{2\text{D}}} n_{2\text{D}}} e^{-\beta\omega_{10}} A \frac{s^2}{p^2} \quad (3.39)$$

De cette expression apparaît clairement l'avantage conséquent de travailler avec un réseau de cavité patch : *la densité spectrale de bruit surfacique est diminuée d'un facteur $\frac{s^2}{p^2}$ par rapport à une structure classique.*

La figure 3.10 trace les différentes figures de mérite abordées précédemment. L'analyse précédente nous permet d'appréhender intuitivement le fonctionnement du dispositif. Il apparaît clairement qu'un compromis entre efficacité quantique externe et bruit doit être trouvé : en pratique, on favorisera donc les structures à faible nombre de périodes ($N_p = 3$), et on limitera le dopage à des valeurs inférieures à $n_{2\text{D}} \leq 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. En plus de restreindre la quantité de bruit d'obscurité dans nos structures, limiter la valeur de dopage nous évitera de rentrer dans le régime de couplage fort lumière-matière (qui apparaît à fort dopage $> 5 \times 10^{11}$), où les calculs d'efficacité sont modifiés par rapport aux calculs présentés

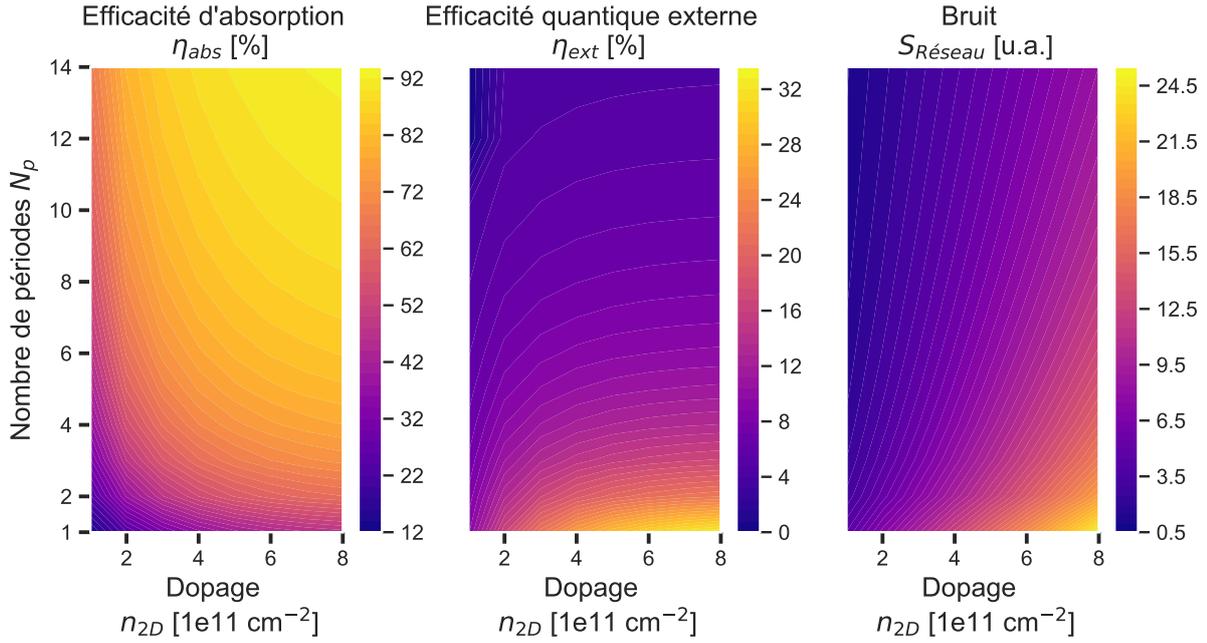


FIGURE 3.10 – Efficacité d'absorption η_{abs} , efficacité quantique externe η_{ext} et bruit électrique du réseau de patch $S_{Réseau}$, calculés pour une cartographie 2D du dopage n_{2D} et du nombre de périodes N_p .

précédemment. On s'épargnera également l'intégralité des effets complexes qui s'accompagnent d'un dopage élevé : non-parabolicité, effets de Poisson, dépolarisation plasma ... Enfin, la conception du réseau d'antennes patch, et notamment de ses dimensions s , p et L_z , doit se faire en concertation avec les équipes de développement technologiques, pour s'assurer que le dimensionnement théorique est bien en adéquation avec les contraintes de fabrication réelles.

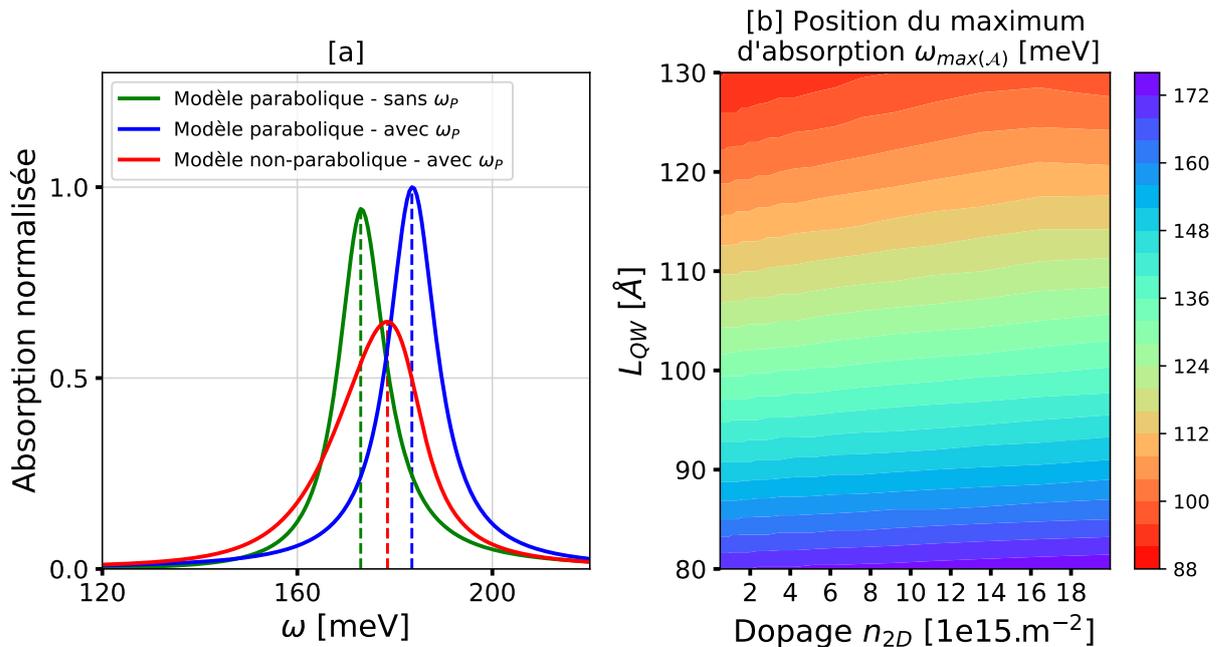
3.3 Conception de la structure active

Dans la partie précédente, nous nous sommes intéressés à la modélisation et l'optimisation de l'efficacité d'absorption η_{abs} , ce qui nous a permis de dimensionner le dopage n_{2D} des puits quantiques optiques et le nombre de répétitions de périodes N_p . Dans les parties qui suivent, nous nous intéressons à l'efficacité quantique interne, ce qui nous permettra de successivement dimensionner la taille des puits quantiques optiques et la structure de bande de la cascade électronique.

3.3.1 Puits optique

Dans cette section, nous aborderons rapidement la problématique de la conception du puits optique, le puits quantique dans lequel s'effectue l'absorption de photons, avec une unique contrainte : avoir une absorption centrée sur la longueur d'onde ciblée. Si nous n'avons qu'un seul degré de liberté sur lequel travailler, la taille du puits quantique L_{QW} ,

il nous faudra tout de même prendre en compte deux phénomènes aux effets opposés : le décalage vers les hautes énergies généré par les effets de dépolarisation plasma (voir section 2.5.4), et le décalage vers les basses énergies dû à la non-parabolicité des bandes (section 2.5.2). Ces deux effets sont principalement contrôlés par le dopage, dont la valeur a été fixée précédemment lors de la conception électromagnétique. La figure 3.11-[a] illustre les effets des deux mécanismes sur la position du maximum d'absorption pour une situation exemple :



s

FIGURE 3.11 – [a] Calcul de l'absorption spectrale du puits quantique, pour différents modèles de non-parabolicité et avec ou sans la prise en compte des effets de dépolarisation plasma (ω_P). [b] Étude paramétrique de la position du maximum d'absorption $\omega_{max(\lambda)}$ selon le dopage n_{2D} et la largeur du puits quantique L_{QW} .

- **en vert**, on représente l'absorption calculée avec modèle de dispersion parabolique des sousbandes. Le maximum d'absorption concorde avec la différence d'énergie ISB $\omega_{ISB} = \omega_1 - \omega_0$, et la forme spectrale de l'absorption est une fonction Lorentzienne parfaitement symétrique.
- **en bleu**, on représente l'absorption calculée avec de nouveau un modèle de dispersion parabolique, mais qui prend en compte les effets de dépolarisation plasma : bien que le puits optique soit de même taille que pour le calcul précédent, le maximum de l'absorption se trouve désormais à $\tilde{\omega}_{ISB} = \sqrt{\omega_{ISB}^2 + \omega_P^2}$, c'est à dire déplacé vers les hautes énergies. La forme spectrale n'est pas affectée : l'absorption est toujours une Lorentzienne symétrique.
- **en rouge**, on représente l'absorption calculée avec un modèle de dispersion *non-parabolique*, et prenant en compte les effets de dépolarisation plasma. Par rapport à la courbe bleue, les effets de non-parabolicité décalent le maximum d'absorption vers les faibles énergies et la symétrie de la forme spectrale est perdue.

La figure 3.11-[b] est une étude paramétrique de l'énergie correspondant au maximum d'absorption $\omega_{\max(\mathcal{A})}$ en fonction de la largeur du puits optique L_{QW} et de la densité 2D de dopage $n_{2\text{D}}$. Pour une largeur de puits L_{QW} donnée, la valeur de $\omega_{\max(\mathcal{A})}$ augmente avec le dopage par effet de dépolarisation plasma. En revanche, selon la taille du puits, le décalage s'opère différemment : pour les puits de fine épaisseur, les effets de décalage plasma (vers les hautes énergies) sont presque totalement compensés par les effets de décalage dus à la non-parabolicité (vers les faibles énergies), tandis que pour les puits de large épaisseur, là où les effets de non-parabolicité sont moins importants, c'est plutôt les effets de décalage plasma qui dominent. En pratique, pour une valeur de dopage donnée, on parcourt une gamme d'épaisseurs L_{QW} et on choisit l'épaisseur telle que le maximum d'absorption concorde avec la longueur d'onde ciblée $\lambda_{\max(\mathcal{A})} = \lambda_{\text{cible}}$.

3.3.2 Cascade électronique

Dans cette partie, on s'intéresse à la conception de la cascade électronique, dont l'optimisation permettra de fixer l'efficacité quantique interne du dispositif. Dans un premier temps, on présente les grands principes à respecter pour la conception d'une cascade ; on présente ensuite une méthode de conception optimisée, reposant sur un algorithme heuristique d'optimisation.

Principes de conception

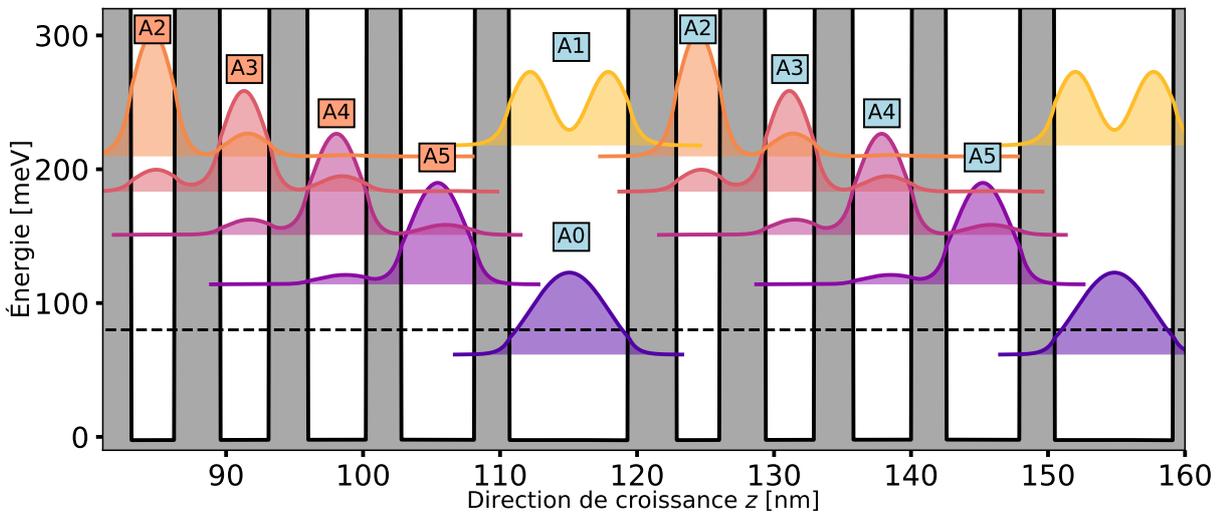


FIGURE 3.12 – Structure de bande conventionnelle d'un QCD : alignement $A1 - A2$ quasi-résonant et espacement d'un phonon LO $\Delta\omega_{ij} \approx \omega_{\text{LO}} = 33$ meV entre les niveaux de la cascade. Le trait pointillé représente le niveau de Fermi μ_F à l'équilibre thermodynamique.

La conception d'une cascade électronique résulte du compromis entre l'optimisation de la probabilité d'extraction p_E et du bruit électronique, dans une optique de maximisation du rapport à signal à bruit. On commence par présenter un schéma de conception conventionnel et robuste, qui résulte de la compréhension intuitive des QCD, illustré par la figure 3.12. Dans ces structures, on dégage trois règles de conception principales :

- entre le niveau excité du puits optique $A1$ et le premier niveau extracteur $A2$ de la cascade, il est courant d'utiliser un schéma de transport résonnant. L'idée est de maximiser le rapport d'extraction $\Gamma_{A1 \rightarrow A2} / \Gamma_{A1 \rightarrow A0}$, qui intervient de manière prépondérante dans la valeur de la probabilité d'extraction p_E . Il est également recommandé de désaccorder légèrement la résonance, c'est-à-dire de placer le niveau $A2$ légèrement en dessous de $A1$ (≈ 5 meV), pour assymétriser le transport : de cette manière, on augmente le rapport $\Gamma_{A1 \rightarrow A2} / \Gamma_{A2 \rightarrow A1}$, ce qui permet de favoriser un déplacement global des électrons vers le bas de cascade 2.5.1.
- pour des raisons similaires, on espace les puits optiques de l'ordre de ω_{LO} (≈ 33 meV pour l'InGaAs) : en se plaçant sur la résonance LO, on favorise le transport vers le bas de la cascade, tout en s'assurant que la remontée des électrons vers le haut de la cascade est inefficace. Si le nombre de puits dans la cascade peut influencer le recouvrement du mode optique avec les puits quantiques (et donc l'efficacité d'absorption), on choisit généralement ce nombre tel que le dernier niveau électronique soit à une résonance LO du niveau de Fermi (où du niveau fondamental de la prochaine période, si le dopage n'est pas élevé).
- on s'assure que les transitions diagonales parasites $\Gamma_{A0 \rightarrow A[2,3,4..]}$ sont négligeables devant la transition $\Gamma_{A0 \rightarrow A1}$ (qui est la transition qui détermine principalement le courant d'obscurité). Il est effectivement favorable que les électrons sous obscurité suivent le même schéma de transport que les photo-électrons (promotion dans $A1$ puis extraction dans la cascade), pour éviter les courts circuits dans la structure. Une manière de se prémunir de telles transitions parasites est d'augmenter l'épaisseur des barrières proches du puits optique. Similairement, il faut s'assurer que les transitions parasites depuis le niveau excité $\Gamma_{A1 \rightarrow Bi}$ sont négligeables devant le taux d'extraction $\Gamma_{A1 \rightarrow A2}$.

Si les quelques idées présentées ci-dessus sont suffisantes pour concevoir une structure de bande de QCD, elles n'en restent pas moins qualitatives. Un dimensionnement optimisé nécessiterait une étude paramétrique sur l'ensemble des paramètres de la cascade (épaisseur des puits *et* des barrières). Malheureusement, l'exploration totale de l'espace des phases est impossible : pour une structure avec 3 puits dans la cascade (donc 4 barrières à dimensionner), en imaginant que chacun des paramètres L_{Puits} et $L_{\text{Barrière}}$ peut évoluer sur un jeu de 6 valeurs (ce qui est extrêmement restreint, notamment sur la taille des barrières), et qu'un calcul prend environ 20 s, on obtient un temps de calcul total de *64 jours* pour explorer l'intégralité du champ des possibles.

À ces considérations de ressources temporelles, s'ajoute la validité du calcul : on a vu dans le chapitre 2 qu'en fonction des situations $\gamma_{\text{intra}}, \Omega_T, \Delta\omega_{ij}$, la représentation dans une base d'états (localisée ou délocalisée) de l'interaction entre deux fonctions d'onde peut être plus ou moins pertinente (la figure du chapitre 2 est reportée ici, figure 3.14). En d'autres termes, pour être assuré de la pertinence d'un résultat de calcul, il faudrait s'assurer que chacune des interactions deux à deux entre les fonctions d'ondes est représentée dans la bonne base d'états (localisés ou délocalisés). La figure 3.13 représente deux situations de calcul où le choix de la base de représentation est inadapté aux circonstances de couplage/désaccord $(\Omega_T, \Delta\omega)$ entre les niveaux d'énergie $A1$ et $A2$. Une telle situation de calcul doit être écartée lors de l'évaluation des performances, puisque donnant des résultats non-physiques (et potentiellement, des performances très élevées) qui vont altérer les résultats de notre routine d'optimisation. On présente dans la suite une méthode de conception et d'optimisation de la

Deux situations de calculs non-physiques :

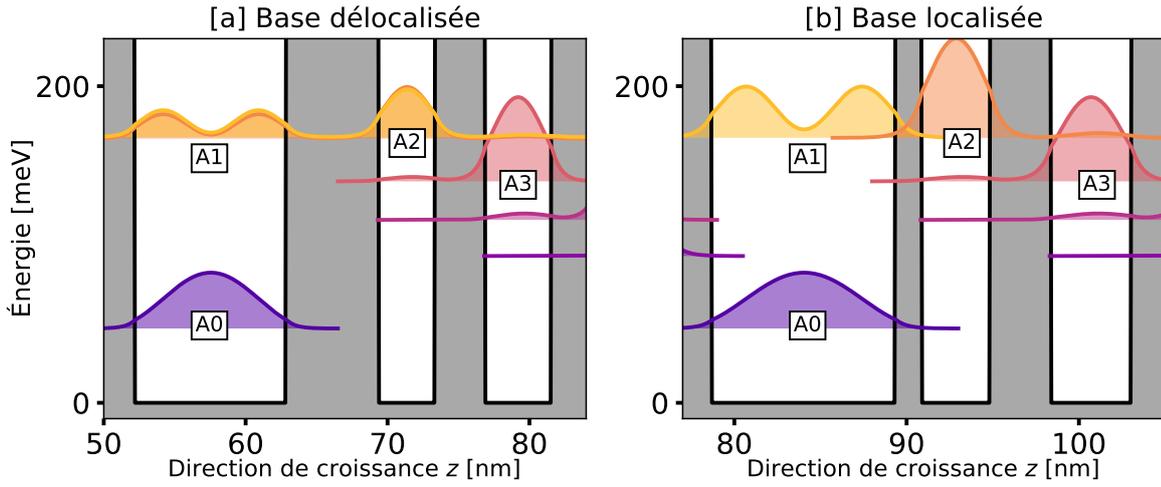


FIGURE 3.13 – Deux exemples de calcul où le choix de la base de représentation mène à des situations non-physiques : [a] avec une base délocalisée. Les fonctions d’onde $A1$ et $A2$ sont toutes les deux fortement délocalisées dans le puits adjacent, bien que séparées par une épaisse barrière de potentiel (faible Ω_T , faible $\Delta\omega$). [b] avec une base localisée. $A1$ et $A2$ sont toutes les deux localisées dans leur puits respectif, bien que séparées par une fine barrière de potentiel (fort Ω_T).

cascade qui répond à ces problématiques de gestion des ressources et de validité des modèles.

Optimisation : exemple restreint

On souhaite concevoir la structure de bande d’un QCD à 5 puits ($L_{\text{QW}}^0 / L_{\text{Barrière}}^0 / L_{\text{QW}}^1 / L_{\text{Barrière}}^1 / L_{\text{QW}}^2 / L_{\text{Barrière}}^2 \dots$). Pour simplifier l’étude, on se rapporte à une optimisation à deux dimensions : on fixe la taille L_{QW}^0 du puits optique pour une détection à $\lambda_0 = 10 \mu\text{m}$, et on fixe les épaisseurs $L_{\text{QW}}^{[2,3,4]} / L_{\text{Barrière}}^{[1,2,3,4]}$, tel que seuls L_{QW}^1 et $L_{\text{Barrière}}^0$ (le premier puits extracteur et la première barrière) seront à optimiser. On travaille à tension et température fixées.

Dans la suite, on présente les étapes successives qui permettent de construire une fonction de coût \mathcal{F} à optimiser. Pour chaque situation ($L_{\text{QW}}^1, L_{\text{Barrière}}^0$) :

- on calcule le rapport signal à bruit pour les deux bases de représentation des fonctions d’ondes $A1$ et $A2$: dans la base délocalisée (indicée D) et localisée (indicée L) :

$$\text{Délocalisée : } \text{SNR}_D = \frac{\mathcal{R}(\lambda = \lambda_0)_D}{S_D} \quad (3.40)$$

$$\text{Localisée : } \text{SNR}_L = \frac{\mathcal{R}(\lambda = \lambda_0)_L}{S_L} \quad (3.41)$$

où $\mathcal{R}(\lambda = \lambda_0)_{L,D}$ est la réponse calculée à la longueur d’onde désirée, pour une puissance incidente et une efficacité d’absorption quelconque (on cherche à optimiser

le rendement quantique interne), et $S_{L,D}$ le bruit. Il est important de calculer la réponse précisément à la longueur d'onde λ_0 (plutôt que le maximum de réponse) puisque les effets du couplage dans la base délocalisée auront tendance à désaccorder en énergie le niveau excité $A1$, et donc mécaniquement de déplacer la longueur d'onde du maximum de réponse par rapport à λ_0 visée.

- à l'aide du calcul dans la base localisée, on peut déterminer les valeurs $(\Omega_T, \Delta\omega)$ qui nous permettent de nous situer dans les domaines de validité de la figure 3.14. On calcule alors les distances euclidiennes minimales entre le point $(\Omega_T, \Delta\omega)$ et les limites des domaines de validité pour les deux bases : on obtient deux distances, L_L (base localisée) et L_D (base délocalisée), représentée sur la figure 3.14.

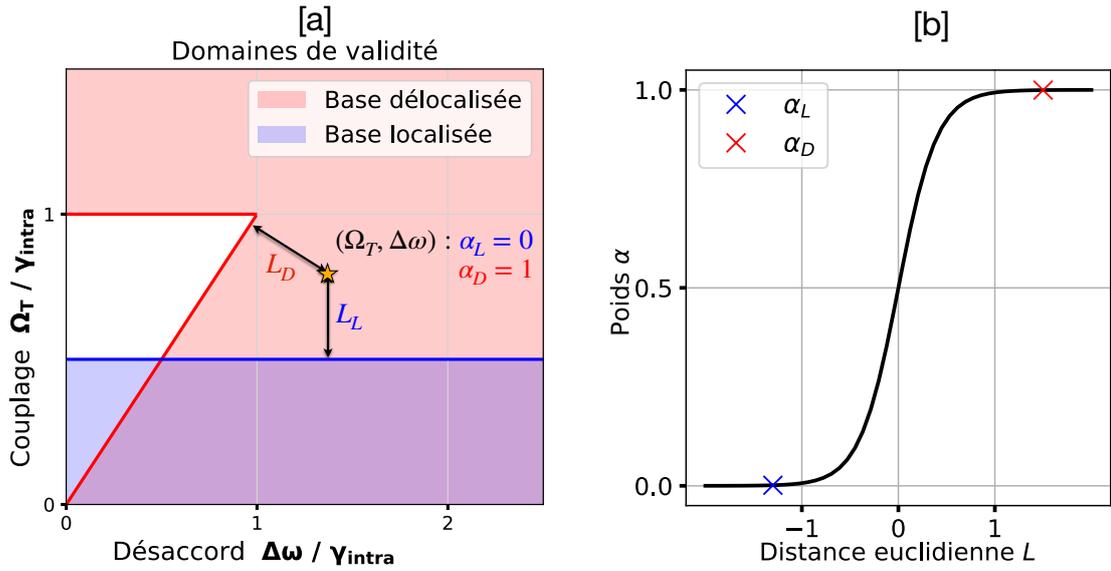


FIGURE 3.14 – [a] Domaines de validité des deux bases de représentation et représentation schématique des distances euclidiennes L_L et L_D qui nous permettront de quantifier la validité du point $(\Delta\omega, \Omega_T)$ dans les deux bases. [b] Fonction de pondération (sigmoïde) utilisée. Pour le point $(\Delta\omega, \Omega_T)$ représenté dans la figure [a], $\alpha_L = 0$ (représentation délocalisée pertinente) et $\alpha_D = 1$ (représentation localisée inadaptée).

- à l'aide de ces deux distances L_L et L_D et d'une fonction sigmoïdale, on calcule les poids de pondération associés aux deux bases α_L et α_D :

$$\alpha_L = \frac{1}{1 + e^{-\frac{L_L}{\sigma}}} \quad (3.42)$$

$$\alpha_D = \frac{1}{1 + e^{-\frac{L_D}{\sigma}}} \quad (3.43)$$

où σ est l'étalement de la sigmoïde, qui est un paramètre du modèle d'optimisation. À noter que les distances L_L et L_D sont signées : si le point $(\Omega_T, \Delta\omega)$ se situe dans le domaine de validité de la base localisée, on aura $\text{signe}(L_D) = +1$, tel que $\alpha_L \rightarrow 1$. On a évidemment la situation inverse hors du domaine : $\text{signe}(L_D) = -1$, tel que $\alpha_L \rightarrow 0$. Une représentation des distances et des poids est donnée sur la figure 3.14.

- enfin, on pondère le rapport signal à bruit calculé dans les deux bases par ces coefficients $\alpha_{D,L}$, et on définit la figure de mérite \mathcal{F} comme :

$$\boxed{\mathcal{F} = \max\left(\alpha_D \times \text{SNR}_D, \alpha_L \times \text{SNR}_L\right)} \quad (3.44)$$

Une fois la fonction de coût définie, il ne nous reste plus qu'à l'injecter dans un algorithme d'optimisation. Si dans ce problème restreint à deux dimensions, on s'attend à trouver un unique optimum global de fonctionnement, lorsqu'on étendra le problème à l'intégralité des épaisseurs de la structure, on trouvera de nombreux minima locaux. On s'oriente donc vers un algorithme heuristique, et en particulier on choisira un algorithme d'optimisation par essaims particulaires (PSO, pour *Particle Swarm Optimization* [110]). L'idée est d'explorer itérativement l'espace des phases à l'aide d'un *essaim* de particules (en fait des points dans l'espace des phases) : la position de chaque particule est influencée par son meilleur minimum local calculé aux itérations précédentes, mais aussi par le meilleur minimum trouvé par l'essaim. Cette méthode est particulièrement adaptée à des dimensions élevées d'espace de phases, et n'impose aucune contrainte sur la dérivabilité de la fonction de coût \mathcal{F} étudiée.

La figure 3.15 est une illustration de la convergence de l'algorithme PSO : sur une cartographie 2D de la figure de mérite \mathcal{F} , on a tracé les positions ($L_{\text{QW}}, L_{\text{Barrière}}$) de chacune des particules de l'essaim ($N = 10$ particules). De génération en génération, la position moyenne de l'essaim se recentre progressivement vers le maximum de \mathcal{F} . Si dans cet exemple à deux dimensions, un simple algorithme de descente de gradient aurait suffi pour trouver l'optimum, dans des situations plus complexes avec l'ensemble des tailles de puits et de barrière comme paramètres à optimiser, l'utilisation de l'algorithme d'essaim se justifie par la présence de nombreux minima locaux.

Généralisation

On peut facilement généraliser la fonction \mathcal{F} à un nombre plus grand de puits. Par exemple, si l'on souhaite optimiser également le puits L_{QW}^2 et la barrière $L_{\text{Barrière}}^1$ suivants, il suffit de calculer les quatre situations de représentation *localisée* (L) / *délocalisée* (D) : (L, L), (L, D), (D, L) et (D, D) pour la représentation des fonctions d'ondes associées aux niveaux $A1, A2$ et $A3$. À chacune des situations de représentation, on a donc 4 coefficients de pondération :

$$\alpha_{LL} = \alpha_L^{A1-A2} \alpha_L^{A2-A3} \quad (3.45)$$

$$\alpha_{LD} = \alpha_L^{A1-A2} \alpha_D^{A2-A3} \quad (3.46)$$

$$\alpha_{DL} = \alpha_D^{A1-A2} \alpha_L^{A2-A3} \quad (3.47)$$

$$\alpha_{DD} = \alpha_D^{A1-A2} \alpha_D^{A2-A3} \quad (3.48)$$

où les $\alpha_{L,D}^{Ai-Aj}$ représentent les poids associés à la représentation de l'interaction entre les fonctions d'ondes Ai et Aj dans une base L ou D , et sont calculés de la même manière que dans l'équation (3.43). La figure de mérite \mathcal{F} se ré-écrit alors :

$$\boxed{\mathcal{F} = \max\left(\alpha_{LL} \times \text{SNR}_{LL}, \alpha_{LD} \times \text{SNR}_{LD}, \alpha_{DL} \times \text{SNR}_{DL}, \alpha_{DD} \times \text{SNR}_{DD}\right)} \quad (3.49)$$

Convergence de l'algorithme d'essaim particulaire

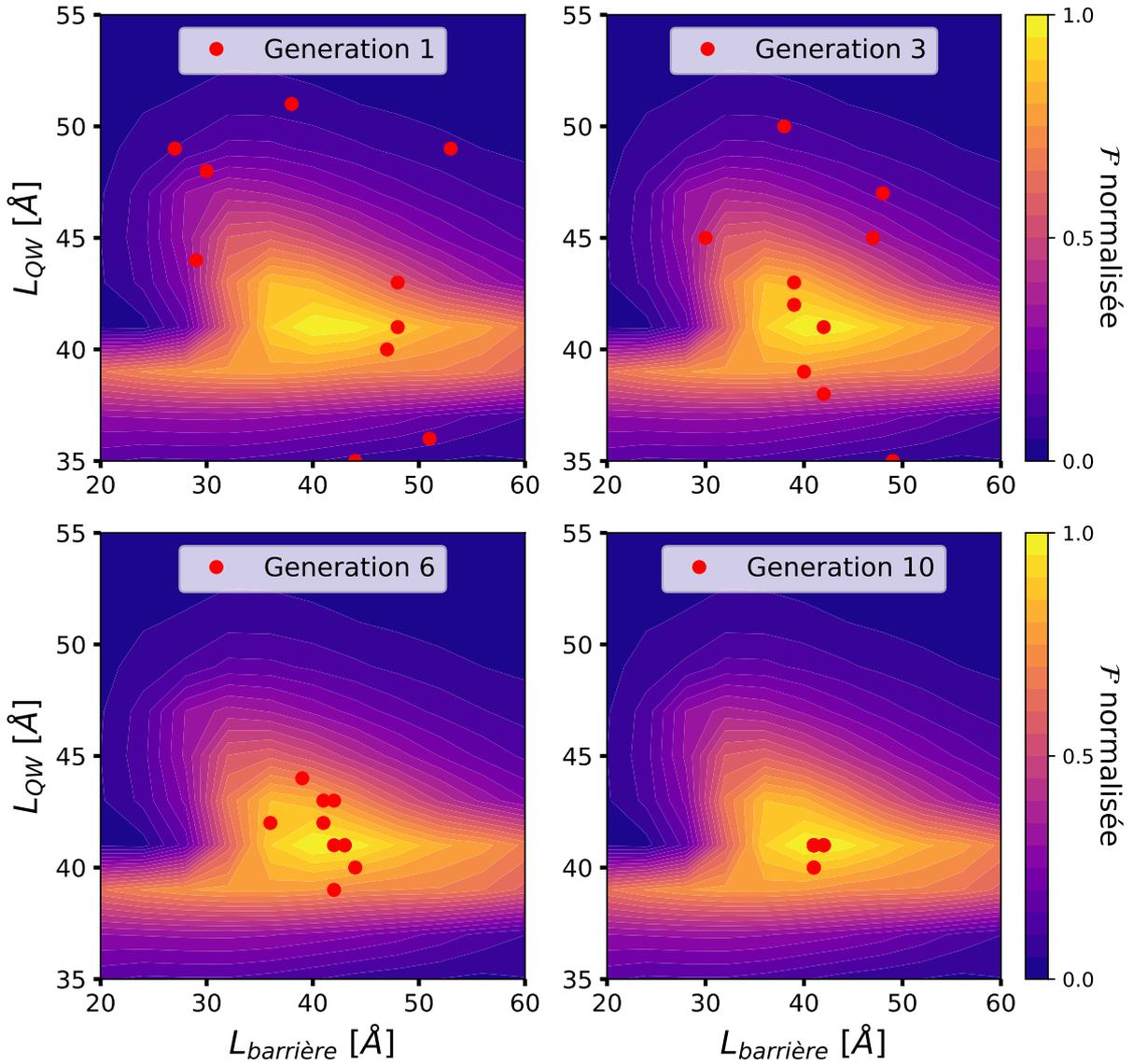


FIGURE 3.15 – Illustration de la convergence de l’algorithme d’essaim PSO sur la fonction de coût \mathcal{F} optimisée sur deux paramètres. La cartographie de \mathcal{F} est superposée aux positions des particules (points rouges), pour démontrer la bonne convergence de l’algorithme. On note que la cartographie de \mathcal{F} est très similaire à la cartographie de la probabilité d’extraction faite précédemment (chapitre 2, Fig.2.21). La différence majeure entre ces deux cartographies vient de la prise en compte du bruit S dans la cartographie de \mathcal{F} : lorsqu’on diminue l’épaisseur de barrière, la probabilité d’extraction augmente, mais l’intensité des transitions diagonales parasites entre le niveau fondamental du puits optique et les niveaux de la cascade augmente également. Le bruit d’obscurité est décuplé, et mécaniquement le rapport signal à bruit s’effondre. L’optimum de \mathcal{F} se trouve effectivement à une épaisseur de barrière conséquente, nécessaire pour atténuer les transitions diagonales.

Si l'on contraint le reste des niveaux de la cascade dans des situations $(\Omega_T, \Delta\omega)$ telles qu'une représentation en base délocalisée est toujours pertinente, on pourra ajouter les largeurs des puits et des barrières correspondantes aux degrés de liberté à optimiser, sans avoir à calculer l'ensemble des situations de représentation L et D . En pratique, on utilisera la fonction de mérite de l'équation (3.49), où seules les représentations de l'interaction des trois premiers niveaux de la cascade sont étudiées.

On notera également, qu'au delà d'une conception optimisée qui autoriserait des performances théoriques impressionnantes (on estime une efficacité quantique interne au moins doublée par rapport à une structure respectant les règles de conception empiriques), la conception d'une cascade doit également se faire dans un souci de robustesse : lors de l'épitaxie des couches, la maîtrise des épaisseurs se fait (au mieux !) de l'ordre d'une monocouche ($\approx 3\text{\AA}$). On fera donc attention à bien asymétriser les alignements résonnants pour écarter de manière certaine des situations défavorables aux performances : par exemple, un rétrécissement de 3\AA du puits lié à $A2$ peut entraîner une chute brutale de la probabilité d'extraction.

3.4 Conception des contacts

Dans les sections précédentes, nous avons successivement dimensionné les épaisseurs du puits optique et de la cascade d'extraction. À ce stade, il ne nous reste plus qu'à dimensionner les bords de la région active, à savoir les contacts épais de semi-conducteur et les couches intermédiaires entre les périodes et ces contacts.

On s'intéresse successivement aux deux extrémités de la structure, qui observent des principes de conception différents. Les structures de bande de ces deux extrémités sont représentées sur la figure 3.16 :

- **Contact, injecteur et première période** (figure 3.16-[a]). Lorsqu'on interface une période (dont le dopage du puits optique impose un certain niveau de Fermi) et une couche épaisse de semi-conducteur dopé différemment, on génère un transfert de charge et donc une courbure du potentiel. Les principes de conception de cette interface gravitent autour de la bonne maîtrise de ce transfert de charge :
 - pour graduer la chute de potentiel entre le premier puits optique et le contact "gauche", on ajoute généralement deux ou trois puits quantiques, qu'on nomme puits injecteurs. En pratique, la largeur de ces puits et leur dopage sont dimensionnés de sorte que ces niveaux soient situés autour du niveau de Fermi et forment une minibande (niveaux résonants). En plus d'assurer un transport électronique efficace entre le contact et le premier puits optique, ces trois niveaux permettent d'espacer spatialement le niveau excité $A1$ du continuum de niveaux présents dans les contacts. En effet une interaction rapprochée entre $A1$ et ce continuum se ferait au détriment de la probabilité d'extraction.
 - pour compenser les pertes d'électrons du puits optique dues aux transferts de charges, on sur-dope le premier puits optique, tel qu'à l'équilibre thermodynamique la population de ce puits optique est égale aux populations des puits optiques des autres périodes de la structure.

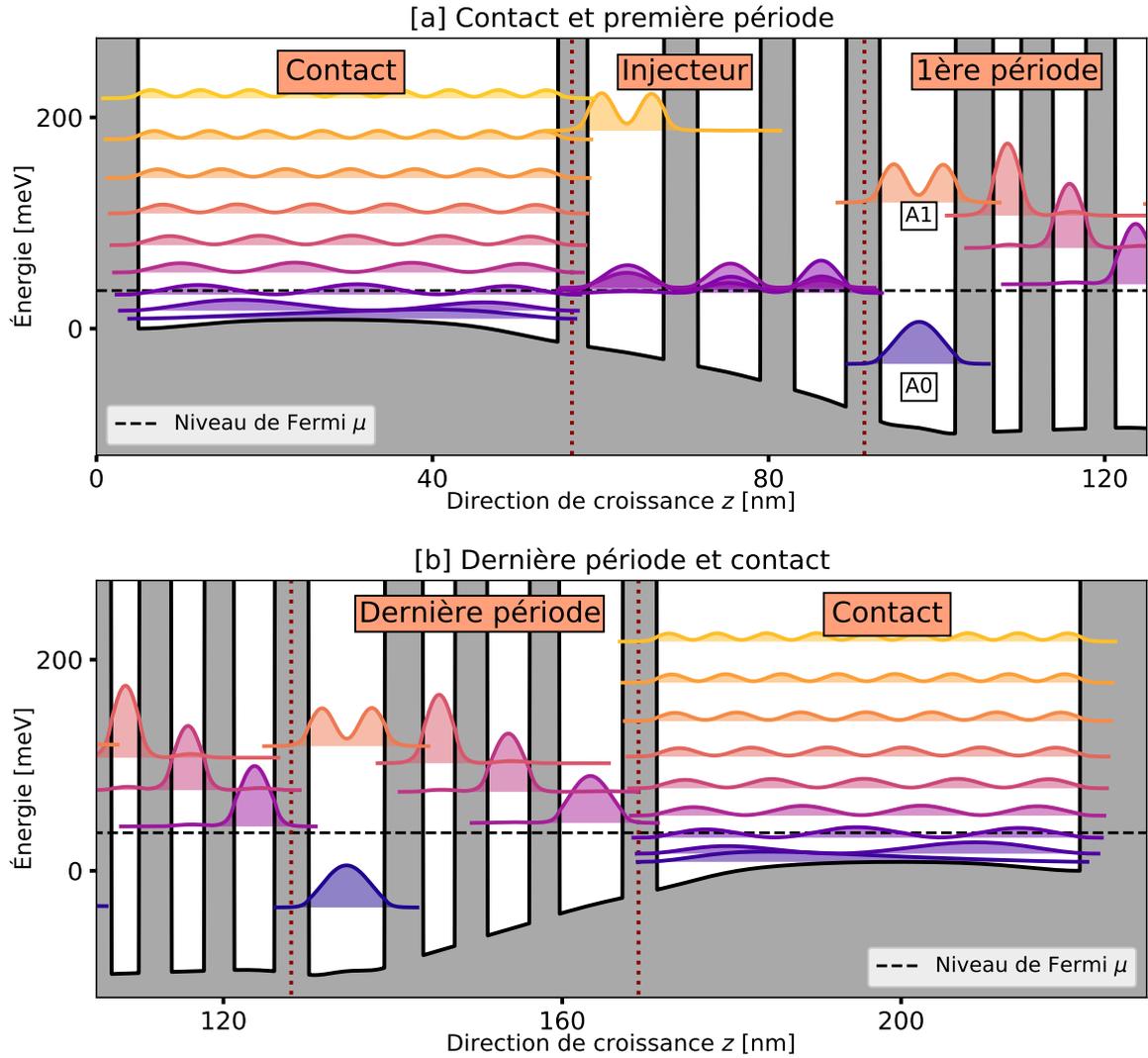


FIGURE 3.16 – Représentation de la structure de bande à l'équilibre thermodynamique des extrémités de la région active.

- **Dernière période et contact** (figure 3.16-[b]). De nouveau, on doit maîtriser les transferts de charges :
 - la courbure de potentiel à l'interface de la dernière période et du contact “droit” nécessite de modifier les épaisseurs des puits de cette dernière cascade : on les ajuste (plus larges) tel que l'alignement de ces niveaux corresponde à l'alignement des niveaux dans les autres cascades. Cette dernière cascade est parfois appelée *extracteur*, puisqu'elle joue un rôle symétrique au rôle de l'injecteur, décrit précédemment.
 - similairement au premier puits optique, on sur-dope le dernier puits optique pour compenser les pertes électroniques et s'aligner sur les populations des autres périodes.

3.5 Bilan sur la conception

Dans ce chapitre, nous avons présenté et détaillé successivement l'ensemble des outils et maillons de la chaîne de conception et de dimensionnement d'un composant ISB inclus dans une cavité de type antenne patch. L'approche pragmatique de la conception et l'étude paramétrique des différentes étapes nous a permis de construire une vision intuitive du fonctionnement final du dispositif, d'identifier les paramètres critiques à dimensionner, et les grandes tendances de comportement du dispositif. Ce chapitre était également voué à présenter la volonté de développer un procédé de conception robuste, fiable et prédictif, reposant sur des critères quantitatifs, où chacune des étapes de conception est maîtrisée. On précisera que les résultats présentés ici sont le fruit de l'étroite interaction de tous les membres de l'équipe de conception, mais également de l'équipe d'épitaxie (notamment sur les aspects de calibration).

L'application des procédures d'optimisation, notamment sur la structure de bande des QCDs, permettrait d'obtenir des gains de l'ordre d'un ordre de grandeur par rapport aux performances actuelles. Cependant, on insiste sur la nécessité de concevoir des structures robustes vis-à-vis du processus de fabrication : l'optimisation doit être incrémentale et porter sur un petit nombre de paramètres, pour s'éviter de mauvaises surprises et désintriquer les effets des différents ajustements. Une étude expérimentale poussée sur les gains potentiels des nouveautés de conception présentées dans ce chapitre n'a malheureusement pas pu être menée pendant la thèse.

Chapitre 4

Comportement d'un détecteur à cascade quantique en régime de couplage fort lumière-matière : modèle semi-classique du transport

Dans le premier chapitre, nous avons introduit la notion de couplage fort et d'états polaritoniques ISB. Le premier objectif de ce chapitre est de consolider cette introduction en décrivant explicitement le couplage lumière-matière entre un mode plasmonique ISB et un mode de cavité optique. Ce développement nous permettra notamment d'introduire la distinction entre états noirs et état brillant.

Le second objectif de ce nouveau chapitre est de caractériser et de modéliser le comportement de QCDs fonctionnant dans un régime de couplage fort, pour apporter une première réponse aux problématiques fixées dans la section 1.3. On trouve de nombreux exemples de caractérisation optique de dispositifs en couplage fort dans la littérature, avec des géométries différentes (guides d'ondes [111], résonateurs LC à base de métamatériaux[26, 112], cavités planaires dispersives [21, 113], cavités 0D patches [19, 114]) explorant des régimes de couplage fort dans le domaine spectral moyen-infrarouge et THz. En appliquant une tension aux bornes d'un puits quantique fortement dopé [115], ou en variant la quantité de dopants [24], le passage continu du régime de couplage fort au régime de couplage ultra-fort a été également largement étudié.

On trouve en revanche peu de démonstrations du comportement photo-électrique de dispositifs en régime de couplage fort. Nous présentons ici brièvement les études qui traitent à notre connaissance de cette question. Les auteurs de [116] étudient la réponse photovoltaïque d'un QCD embarqué dans une cavité planaire et mesurent une séparation de Rabi de l'ordre de 16 meV (pour $\omega_{\text{ISB}} = 163$ meV), mais ne présentent pas la caractérisation optique de leurs dispositifs. À partir de mesures de photo-courant de QWIPs embarqués dans des cavités dispersives, les auteurs de [63] mettent en évidence une fonction de transfert dépendante de la fréquence d'excitation ω . En schéma d'injection, [32] et [20] mesurent des spectres d'électroluminescence qui présentent une nette dispersion polaritonique.

Dans ce contexte, nous présentons dans ce chapitre la caractérisation optique (mesures de réflectivité) et électrique (mesures de photo-courant) de différents dispositifs embarqués dans

des réseaux d’antennes patches fonctionnant à l’entrée du régime de couplage fort ($2\Omega \approx 10$ meV, $\omega_{\text{ISB}} = 120$ meV). En parallèle de cette description expérimentale, nous construirons progressivement un modèle de transport électronique en régime de couplage fort, basé sur un modèle *semi-classique* de théorie des modes couplés (CMT, pour *Coupled Modes Theory*). Nous en étudierons les différences avec le modèle présenté dans le chapitre 2 et 3 de ce manuscrit, et nous l’utiliserons pour reproduire les différents jeux de données expérimentales. L’analyse minutieuse de ce nouveau modèle de transport nous permettra de dessiner et d’interpréter un schéma d’extraction depuis les états polaritoniques vers la cascade électronique, ce qui confirmera que le QCD est une plateforme adaptée à l’étude de l’extraction résonnante de polaritons.

Dans un second temps, nous nous tournerons vers la caractérisation du courant d’obscurité de nos structures conçues pour fonctionner en couplage fort. Nous verrons que la nécessité d’introduire une grande quantité de dopants pour augmenter l’amplitude du couplage lumière-matière Ω affecte profondément les courbes de courant d’obscurité. En particulier, nous verrons que le modèle de transport décrit dans le chapitre 2, prédictif pour les structures faiblement dopées, décrit mal ces nouvelles structures fortement dopées. Enfin, nous reviendrons sur la problématique des performances de QCDs fonctionnant en régime de couplage fort. Nous verrons à l’aide d’arguments simples portant sur l’énergie d’activation que le régime de couplage fort n’est pas intéressant d’un point de vue performance d’obscurité.

4.1 Origine des états polaritoniques ISB

Dans les parties qui suivent, nous allons progressivement introduire l’origine des modes polaritoniques ISB. Pour cela, nous construirons successivement l’Hamiltonien “*matière*” (l’Hamiltonien du mode plasmonique ISB), l’Hamiltonien “*lumière*” (du mode TM_{01} de la cavité optique), et l’Hamiltonien d’interaction (interaction entre les deux modes). Le développement et le traitement rigoureux de ces Hamiltoniens sont complexes : ces sections ayant pour but d’*introduire* la notion de modes polaritoniques, on s’autorisera certains raccourcis simplificateurs, qui nous permettront de dégager un maximum d’intuition physique. Les développements qui suivent dans les prochaines sections sont principalement basés sur [22] et [117], où les auteurs présentent un modèle détaillé et une description extensive du régime de couplage fort dans des dispositifs ISB.

4.1.1 État brillant et états noirs : origine du mode plasmonique ISB

Dans cette première section, on souhaite introduire la distinction entre état *brillant*, qui concentre la totalité des capacités d’interaction avec le champ électromagnétique, et les états *noirs*, aveugles à toute interaction avec la lumière. De ces considérations, nous allons progressivement construire l’Hamiltonien “*matière*”, et en particulier, discuter de l’origine physique du mode plasmonique ISB qu’on utilisera pour décrire l’interaction avec le champ électromagnétique.

États électroniques fermioniques

On commence par se placer dans une situation simplifiée, restreinte à deux sousbandes d'un même puits quantique. 0 désignera la sousbande fondamentale de la transition ISB, 1 la sousbande excitée. Chaque état \mathbf{k} de l'espace réciproque constituant les sousbandes 0 et 1 est un état électronique, donc fermionique : il n'est pas possible d'accumuler plus d'un électron dans chacun de ces états : $|0_i^{\mathbf{k}}\rangle$ (respectivement $|1_i^{\mathbf{k}}\rangle$) désignera l'état \mathbf{k} occupé (respectivement, vacant) dans la sousbande i ¹. Ces états constituent les briques fondamentales de la description du système constitué par les deux sousbandes. Un état du système sera alors déterminé par deux facteurs : le nombre total d'électrons dans le système N , et la répartition de ces électrons dans les états \mathbf{k} . Mathématiquement, cette description d'un système (les deux sousbandes) constitué d'une multitude de sous-systèmes (les états \mathbf{k}) passe par l'utilisation de *produits tensoriels*. Pour simplifier la discussion, prenons quelques exemples, où l'on négligera le spin des électrons considérés :

- Pour $N = 0$, donc aucun électron dans aucune des deux sousbandes, l'état du vide s'écrit :

$$|0 \dots \underbrace{0 \dots 0}_{\text{sousbande 0}} \underbrace{0 \dots 0}_{\text{sousbande 1}} \dots \rangle = \bigotimes_{\substack{i=0,1 \\ \mathbf{k}}} |0_i^{\mathbf{k}}\rangle \quad (4.1)$$

- Pour $N = 1$ électron, l'état où $(i = 0, k')$ est rempli, et les $(i, k \neq k')$ sont vacants, s'écrit :

$$|0 \dots \underbrace{1 \dots 0}_{\text{sousbande 0}} \underbrace{0 \dots 0}_{\text{sousbande 1}} \dots \rangle = \left(\bigotimes_{\substack{i=0,1 \\ \mathbf{k} \neq k'}} |0_i^{\mathbf{k}}\rangle \right) \otimes |1_0^{k'}\rangle \quad (4.2)$$

- Pour $N = 2$ électrons, l'état où $(i = 0, k')$ et $(i = 1, k'')$ sont remplis, et les $(i, k \neq k', k'')$ sont vacants, s'écrit :

$$|0 \dots \underbrace{1 \dots 0}_{\text{sousbande 0}} \underbrace{0 \dots 1 \dots 0}_{\text{sousbande 1}} \dots \rangle = \left(\bigotimes_{\substack{i=0,1 \\ \mathbf{k} \neq k' \\ \mathbf{k} \neq k''}} |0_i^{\mathbf{k}}\rangle \right) \otimes |1_0^{k'}\rangle \otimes |1_1^{k''}\rangle \quad (4.3)$$

À chaque sous-système (i, k) , on attribue un opérateur fermionique de création $c_{i\mathbf{k}}^\dagger$ et d'annihilation $c_{i\mathbf{k}}$ définis par :

$$c_{i\mathbf{k}} = \mathcal{I}d_2 \otimes \dots \otimes \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\text{agit sur } i\mathbf{k}} \otimes \dots \otimes \mathcal{I}d_2 \quad (4.4)$$

$$c_{i\mathbf{k}}^\dagger = \mathcal{I}d_2 \otimes \dots \otimes \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_{\text{agit sur } i\mathbf{k}} \otimes \dots \otimes \mathcal{I}d_2 \quad (4.5)$$

1. Attention à la confusion sur la nomenclature d'état : chaque état \mathbf{k} pris indépendamment peut être lui-même dans deux états (lire configurations), vacant ou occupé. Dans la suite, la notion d'état s'apparentera à cette seconde signification : elle désignera une configuration particulière de la distribution des électrons entre les deux sousbandes.

où $\mathcal{I}d_2$ désigne l'opérateur identité de dimension 2. $c_{i\mathbf{k}}^\dagger$ (respectivement $c_{i\mathbf{k}}$) décrit un processus de création (respectivement de destruction) d'un électron dans le sous-système i, \mathbf{k} :

$$c_{i\mathbf{k}}^\dagger |0 \dots \underbrace{0}_{i\mathbf{k}} \dots 0\rangle = |0 \dots \underbrace{1}_{i\mathbf{k}} \dots 0\rangle \quad (4.6)$$

$$c_{i\mathbf{k}} |0 \dots \underbrace{1}_{i\mathbf{k}} \dots 0\rangle = |0 \dots \underbrace{0}_{i\mathbf{k}} \dots 0\rangle \quad (4.7)$$

$$c_{i\mathbf{k}}^\dagger |0 \dots \underbrace{1}_{i\mathbf{k}} \dots 0\rangle = 0 \quad (4.8)$$

$$c_{i\mathbf{k}} |0 \dots \underbrace{0}_{i\mathbf{k}} \dots 0\rangle = 0 \quad (4.9)$$

L'Hamiltonien électronique total du système, \mathcal{H}_e s'écrit :

$$\mathcal{H}_e = \sum_{i=0}^1 \sum_{\mathbf{k}} \omega_{i\mathbf{k}} c_{i\mathbf{k}}^\dagger c_{i\mathbf{k}} \quad (4.10)$$

où les $\omega_{i,\mathbf{k}}$ sont les énergies des états $|i, \mathbf{k}\rangle$. Dans la suite, on considère N électrons et on se place à $T = 0$ K. L'état fondamental, c'est-à-dire l'état pour lequel il n'y a pas d'électron dans la sousbande excitée et où les N électrons sont entièrement contenus dans la sousbande fondamentale, s'écrit :

$$|F\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_F} c_{0\mathbf{k}}^\dagger |0 \dots 0\rangle \quad (4.11)$$

où k_F désigne le vecteur d'onde de Fermi, et $|0 \dots 0\rangle$ est l'état du vide. $|F\rangle$ est donc de la forme :

$$|F\rangle = \left| \underbrace{\overbrace{111 \dots 111 \dots 111}^{k \leq k_F} 000}_{\text{états } k \text{ sousbande } 0} \underbrace{000 \dots 000 \dots 000}_{\text{états } k \text{ sousbande } 1} \right\rangle \quad (4.12)$$

L'état fondamental est représenté schématiquement Figure 4.1.

États à une excitation $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$

On sait que l'interaction d'un photon avec la transition ISB va générer des transitions que l'on peut décrire à l'aide des opérateurs $c_{i\mathbf{k}}^\dagger$ et $c_{i\mathbf{k}}$ de création/annihilation. En particulier, on s'attend à des transitions *verticales* entre les $(0, \mathbf{k})$ et $(1, \mathbf{k})$, qui correspondent à l'application successive des opérateurs $c_{0\mathbf{k}}$ (destruction d'un électron en $0, \mathbf{k}$) et $c_{1\mathbf{k}}^\dagger$ (création d'un électron en $1, \mathbf{k}$). On définit alors les états à une excitation $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$, qui résultent de l'application successive de ces opérateurs sur l'état fondamental $|F\rangle$:

$$|E_{\mathbf{k}}^1\rangle = c_{1\mathbf{k}}^\dagger c_{0\mathbf{k}} |F\rangle = \left| \underbrace{\overbrace{111 \dots 1 \quad 0}_{k} \quad \overbrace{1 \dots 111 \quad 000 \dots 0}_{k}}_{\text{sousbande } 0} \underbrace{\overbrace{1 \quad 0 \dots 000}_{k}}_{\text{sousbande } 1} \right\rangle \quad (4.13)$$

Ces états à une excitation sont des états propres de l'Hamiltonien \mathcal{H}_e :

$$\mathcal{H}_e |E_{\mathbf{k}}^1\rangle = (\omega_{1\mathbf{k}} + \sum_{k' \neq k} \omega_{0k'}) |E_{\mathbf{k}}^1\rangle \quad (4.14)$$

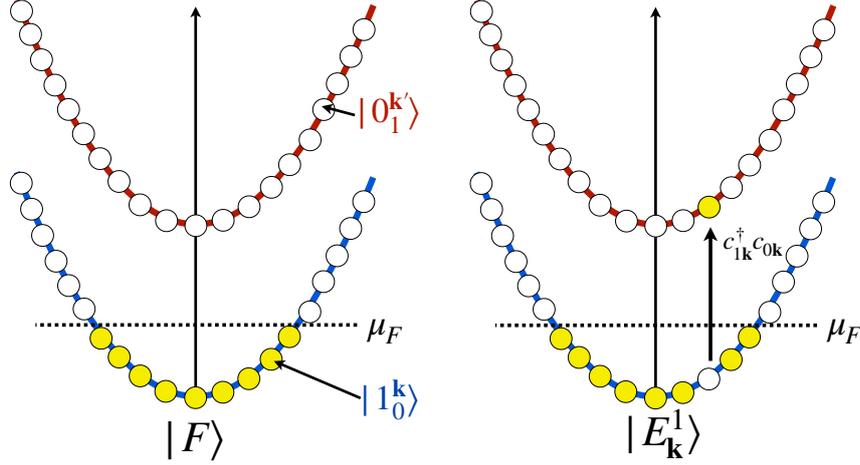


FIGURE 4.1 – Représentation schématique de l'état fondamental $|F\rangle$ et des états à une excitation $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$. Le niveau de Fermi μ_F est représenté. Les états vacants $|0_i^{\mathbf{k}}\rangle$ sont représentés par des cercles vides, les états occupés $|1_i^{\mathbf{k}}\rangle$ par des cercles colorés jaunes. Adaptée de [117].

Ces états nous permettent donc de décrire un processus de promotion d'un électron, par exemple, suite à l'absorption d'un photon (cf. figure 4.1). Le sous espace formé par les états à une excitation $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$ est de dimension N . À noter qu'on pourrait aller plus loin, et définir les états à deux, trois, N excitations, avec une augmentation exponentielle des dimensions du sous-système formé par ces états. En pratique, on va tronquer les dimensions du problème en le restreignant à l'étude des états à une excitation. Cela se justifie notamment dans le cadre d'une hypothèse de faible excitation².

La capacité d'interaction de la transition ISB avec un mode optique est contenue dans l'opérateur dipolaire \hat{d} (pour simplifier, on ne considère que les transitions verticales, de vecteur d'onde photonique $q = 0$) :

$$\hat{d} = z_{01} \sum_{\mathbf{k}} (c_{1\mathbf{k}}^\dagger c_{0\mathbf{k}} + c_{1\mathbf{k}} c_{0\mathbf{k}}^\dagger) \quad (4.15)$$

où l'on a considéré que chaque transition verticale possède la même amplitude de dipôle z_{01} . La répartition des dipôles de chacun des états $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$ peut être calculée :

$$\langle F | \hat{d} | E_{\mathbf{k}}^1 \rangle = z_{01} \quad \forall \mathbf{k} \quad (4.16)$$

La capacité d'interaction du système avec la lumière est donc uniformément répartie sur tous les N états $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$ à une excitation. Autrement dit, *les transitions verticales k entre les deux sousbandes vont pouvoir se coupler de manière uniforme selon k avec un champ électromagnétique d'excitation.*

Pour récapituler, nous avons simplement construit les briques fondamentales de description du système : lorsqu'on excitera (faiblement) notre système ISB, initialement dans un

2. Ce qui n'est pas incompatible avec un régime de couplage fort : on peut faiblement exciter un dispositif composé de deux sous-systèmes fortement couplés.

état fondamental $|F\rangle$, ce système sera correctement décrit par les états à une excitation $|E_{\mathbf{k}}^1\rangle$, dont les dipôles sont uniformément répartis.

État brillant et états noirs

Pour changer d'angle sur la manière dont on interprète le système, on effectue un changement de base : on introduit la nouvelle base $\{|B_n\rangle\}_{n=[1:N]}$, définie à partir des états à une excitation :

$$|B_n\rangle = \sum_{|k| < k_F} \alpha_{n\mathbf{k}} |E_{\mathbf{k}}^1\rangle \quad (4.17)$$

où les $\alpha_{n\mathbf{k}}$ sont des coefficients complexes, tel que $\{|B_n\rangle\}_{n=[1:N]}$ est une base orthonormée du sous-espace à une excitation :

$$\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{n\mathbf{k}}^* \alpha_{m\mathbf{k}} = \delta_{nm} \quad (4.18)$$

En particulier, on choisit $n = 1$ tel que tous les $\alpha_{1\mathbf{k}}$ sont égaux. En appliquant l'équation (4.18), on obtient deux relations :

$$\alpha_{1\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad \forall \mathbf{k}, \quad n = 1 \quad (4.19)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{n\mathbf{k}} = 0 \quad \forall n \neq 1 \quad (4.20)$$

L'état $|B_1\rangle$ est appelé *état brillant* (état symétrique), et les $N - 1$ autres états sont appelés *états noirs* (anti-symétriques). Ce changement de base associé à cette répartition particulière des coefficients $\alpha_{1\mathbf{k}}$ est une procédure courante dans le traitement des phénomènes de superradiance (N émetteurs interagissant avec un champ électromagnétique commun de manière collective et cohérente)[118]. Les raisons de cette nouvelle représentation du système se révèlent dans l'évaluation des dipôles contenus dans les différents états $|B_n\rangle$. En utilisant l'équation (4.20), on obtient :

$$\langle F | \hat{d} | B_n \rangle = \begin{cases} z_{01} \sqrt{N} & \text{si } n = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.21)$$

L'intégralité de la force d'oscillateur du système est désormais contenue dans un unique état, l'état brillant $|B_1\rangle$. À l'inverse, les $N - 1$ états noirs, orthogonaux à cet état brillant, sont incapables de se coupler avec la lumière. Nous verrons par la suite que c'est effectivement par cet état brillant $|B_1\rangle$, qui concentre la totalité de la capacité du système à interagir avec la lumière, qu'on pourra se coupler fortement à un mode électromagnétique de cavité : il en émanera les états polaritoniques.

Associé à cet état brillant, on définit b^\dagger et b les opérateurs création et annihilation d'excitations dans l'état brillant :

$$b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{1\mathbf{k}}^\dagger c_{0\mathbf{k}} \quad (4.22)$$

$$b^\dagger |F\rangle = |B_1\rangle \quad (4.23)$$

On peut montrer à partir des relations de commutation entre les opérateurs fermioniques $[c_{i\mathbf{k}}, c_{j\mathbf{k}'}^\dagger]$ que $[b, b^\dagger] = \frac{\hat{N}_0 - \hat{N}_1}{N}$, où \hat{N}_0 et \hat{N}_1 sont les opérateurs population des sousbandes 0 et 1. Par conséquent, en régime de faible excitation, et pour un large nombre N d'électrons, on peut approximer le commutateur portant sur les opérateurs b par :

$$[b, b^\dagger] \approx \mathcal{I}_d \quad (4.24)$$

qui s'identifie à une relation de commutation d'opérateurs bosoniques. Dans la limite de faible excitation, effectuer ce changement de base nous a permis de passer d'une description fermionique du système électronique à une description bosonique : $|B_1\rangle$ décrit l'état à une excitation du mode bosonique, mais l'application successive de b^\dagger à cet état $|B_1\rangle$ permet d'accéder à des états $|B_1^i\rangle$ à i excitations, dans la limite de faible excitation où $i \ll N^3$. Dans le cas d'une dispersion parallèle et parabolique des bandes ($\omega_{01\mathbf{k}} = \omega_{01} \quad \forall \mathbf{k}$), l'Hamiltonien électronique bosonique associé aux états brillants s'écrit donc :

$$\mathcal{H}_b = \omega_{01} b^\dagger b \quad (4.25)$$

Pour le moment, cet état brillant semble émaner d'une simple opération mathématique de changement de base, sans qu'une interprétation physique claire ne s'en dégage vraiment. De fait, l'état brillant est dégénéré avec les états noirs (leur fréquence propre est égale à celle de la transition ISB ω_{01}). Dans les paragraphes suivants, on explique brièvement et qualitativement comment cette dégénérescence est levée via l'Hamiltonien d'interaction.

Mode plasmonique inter-sousbande

L'Hamiltonien d'interaction lumière-matière en jauge dipolaire [117] prend une forme qui s'apparente à l'expression simplifiée suivante :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \left(-\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{P}} + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{P}}^2 \right) \quad (4.26)$$

où $\hat{\mathbf{D}}$ représente l'opérateur induction électrique, et $\hat{\mathbf{P}}$ est l'opérateur densité de polarisation du gaz électronique. L'interaction lumière-matière est modélisée par le terme $\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$ d'interaction entre le champ électromagnétique et les polarisation électroniques (où les interactions magnétiques ont été négligées). C'est le terme quadratique $\hat{\mathbf{P}}^2$ qui nous intéresse pour le moment : il représente l'interaction des polarisations électroniques *entre elles*. Puisqu'il porte sur les dipôles des transitions, il est possible de le ré-écrire uniquement à l'aide des opérateurs b et b^\dagger associés à l'état brillant, et d'inclure ce terme d'interaction à l'Hamiltonien électrique bosonique de l'équation (4.25) :

$$\boxed{\tilde{\mathcal{H}}_e = \omega_{01} b^\dagger b + \frac{\omega_P^2}{\omega_{01}} (b^\dagger + b)(b^\dagger + b)} \quad (4.27)$$

où l'on ré-introduit la fréquence plasma ω_P , précédemment introduite dans le chapitre 2 (voir section 2.5.4) :

$$\omega_P^2 = \frac{e^2 \Delta N_{01}}{\epsilon \epsilon_0 m^* L_{\text{eff}}} \quad (4.28)$$

3. Attention donc à la distinction entre *mode* et *états*. Dans le *mode* bosonique brillant, on peut accumuler des excitations : selon ce nombre d'excitations, on accède à des *états* différents, les états à i excitations dans le mode brillant, $|B_1^i\rangle$ ($|B_1^1\rangle = |B_1\rangle$ est l'état à une excitation)

La dernière étape de ce développement, consiste à diagonaliser l'Hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}_e$, en introduisant de nouveaux opérateurs bosoniques p , qui s'expriment à partir des opérateurs b et b^\dagger :

$$p = \frac{\tilde{\omega}_{01} + \omega_{01}}{2\sqrt{\tilde{\omega}_{01}\omega_{01}}}b + \frac{\tilde{\omega}_{01} - \omega_{01}}{2\sqrt{\tilde{\omega}_{01}\omega_{01}}}b^\dagger \quad (4.29)$$

Le nouveau mode propre du système qui émerge de cette diagonalisation est appelé *plasmon inter-sousbande*, et correspond au mode d'excitation collectif du gaz d'électron, dont la fréquence propre est $\tilde{\omega}_{01}$:

$$\boxed{\tilde{\omega}_{01} = \sqrt{\omega_{01}^2 + \omega_P^2}} \quad (4.30)$$

qui est donc l'énergie de transition ISB ω_{01} , *plasma-shiftée* par la fréquence plasma ω_P . Pour récapituler, l'action des termes d'auto-interaction polarisation-polarisation $\hat{\mathbf{P}}^2$ ont permis de lever la dégénérescence entre l'état brillant et les états noirs, et l'amplitude de cette dégénérescence est pilotée par ω_P , et donc par le dopage introduit dans les puits quantiques. À partir de maintenant et pour toute la suite, c'est ce mode plasmonique ISB qui sera utilisé pour décrire l'interaction lumière-matière⁴.

Bien que le développement précédent reste particulièrement complexe malgré les raccourcis empruntés, il nous a permis de remonter aux origines physiques du mode “*matière*” qui se couplera effectivement avec le mode “*lumière*”. Les quelques idées principales à retenir pour la suite sont les suivantes :

- le mode plasmonique ISB est le seul acteur du couplage avec la lumière, puisqu'il concentre la totalité de la force d'oscillateur ;
- en régime de faible excitation, on peut l'assimiler à un mode bosonique, que l'on va pouvoir traiter de manière simplifiée comme un oscillateur ;
- sa fréquence propre $\tilde{\omega}_{01}$ est plasma-shiftée par rapport à la fréquence de la transition ISB : ce mode n'est donc pas dégénéré avec les états noirs.

4.1.2 Mode de cavité

Comme on l'a vu dans le chapitre 3, il est pertinent de placer nos puits quantiques dans un environnement électromagnétique adéquat, dans le but d'exalter l'interaction lumière-matière. Dans le chapitre 3, nous avons fait la description de la cavité dans un formalisme *semi-classique* du champ électromagnétique TM_{01} confiné dans la cavité, et de son interaction avec les puits quantiques. Dans cette partie, on se place dans un point de vue dit de *seconde quantification* du champ, qui consiste à décrire le champ électromagnétique non plus à l'aide des champs scalaires (\mathbf{E} , \mathbf{B}), mais à l'aide d'opérateurs et d'états quantiques. En particulier, le mode TM_{01} d'intérêt sera totalement décrit par les opérateurs créations a_c^\dagger et annihilation a_c , tel que l'Hamiltonien \mathcal{H}_c associé à la cavité s'écrit :

$$\mathcal{H}_c = \omega_c(a_c^\dagger a_c + \frac{1}{2}) \quad (4.31)$$

4. Par extension, on parlera de *mode ISB* ou de *mode électronique*.

4.1.3 Interaction lumière-matière : Hamiltonien complet

L'Hamiltonien complet \mathcal{H} , qui incorpore l'interaction entre le mode plasmonique ISB et le mode de cavité optique s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{H} = \tilde{\omega}_{01} p^\dagger p + \omega_c (a_c^\dagger a_c + \frac{1}{2}) + \frac{\omega_P}{2} \sqrt{f_w} (a_c^\dagger + a_c) (p^\dagger + p) \quad (4.32)$$

où f_w désigne le recouvrement optique entre le champ électromagnétique et les courants de polarisations. Le recouvrement f_w s'approxime par L_{eff}/L_c^z , où on rappelle que L_{eff} est l'extension spatiale de ces courants de polarisation selon z , et L_c^z est l'épaisseur totale de la cavité optique. De l'équation (4.32), on identifie la constante de couplage lumière-matière Ω :

$$\Omega = \frac{\omega_P}{2} \sqrt{f_w} \quad (4.33)$$

La fréquence plasma ω_P intervient donc à la fois dans l'expression de la fréquence propre du plasmon $\tilde{\omega}_{01}$ mais aussi dans l'amplitude du couplage Ω .

Lorsqu'on développe les termes d'interaction de l'Hamiltonien \mathcal{H} équation (4.32), on distingue deux contributions :

- *les termes résonnants* $a_c^\dagger p$ et $a_c p^\dagger$, qui décrivent les processus intuitifs de l'interaction : la création d'une excitation (un photon) dans le mode de cavité (a_c^\dagger) passe par la suppression d'une excitation (une désexcitation électronique) dans le mode plasmonique (p), et inversement pour le terme $a_c p^\dagger$. Ces termes sont prépondérants.
- *les termes anti-résonnants* $a_c^\dagger p^\dagger$ et $a_c p$, qui décrivent des processus contre-intuitifs : création d'un photon (a_c^\dagger) via une excitation électronique (p^\dagger).

Dans la suite, on va utiliser *l'approximation de l'onde tournante*, qui permet de négliger les termes anti-résonnants et de ne conserver que les termes résonnants (approximation valide dans la limite $\Omega_R \ll \omega_c, \tilde{\omega}_{01}$). Conserver dans le développement les termes anti-résonnants est possible et pertinent lorsqu'on rentre dans le régime de couplage lumière-matière *ultra-fort* [24, 26], où ces termes ne sont plus négligeables. L'Hamiltonien complet de l'équation (4.32) est donc simplifié (on change la référence d'énergie pour se débarrasser du facteur 1/2) :

$$\mathcal{H} = \tilde{\omega}_{01} p^\dagger p + \omega_c a_c^\dagger a_c + \Omega (a_c^\dagger p + a_c p^\dagger) \quad (4.34)$$

4.1.4 États polaritoniques

Si l'équation (4.34) condense déjà bien la complexité du problème en une expression simple, elle est basée sur l'utilisation des opérateurs quantiques p et a_c , difficiles à manier et à appréhender. Dans cette partie, on réduit la complexité d'un cran, et on restreint la formulation du problème en une représentation matricielle 2×2 , dans une base d'états à deux dimensions : un mode de cavité $|c\rangle$, et un mode plasmonique ISB $|\text{ISB}\rangle$. Cette nouvelle formulation va nous permettre d'introduire simplement les états polaritoniques. L'Hamiltonien \mathcal{H} de l'équation (4.34) prend alors la forme (on écrira désormais $\tilde{\omega}_{01} = \tilde{\omega}_{\text{ISB}}$) :

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \omega_c & \Omega \\ \Omega & \tilde{\omega}_{\text{ISB}} \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

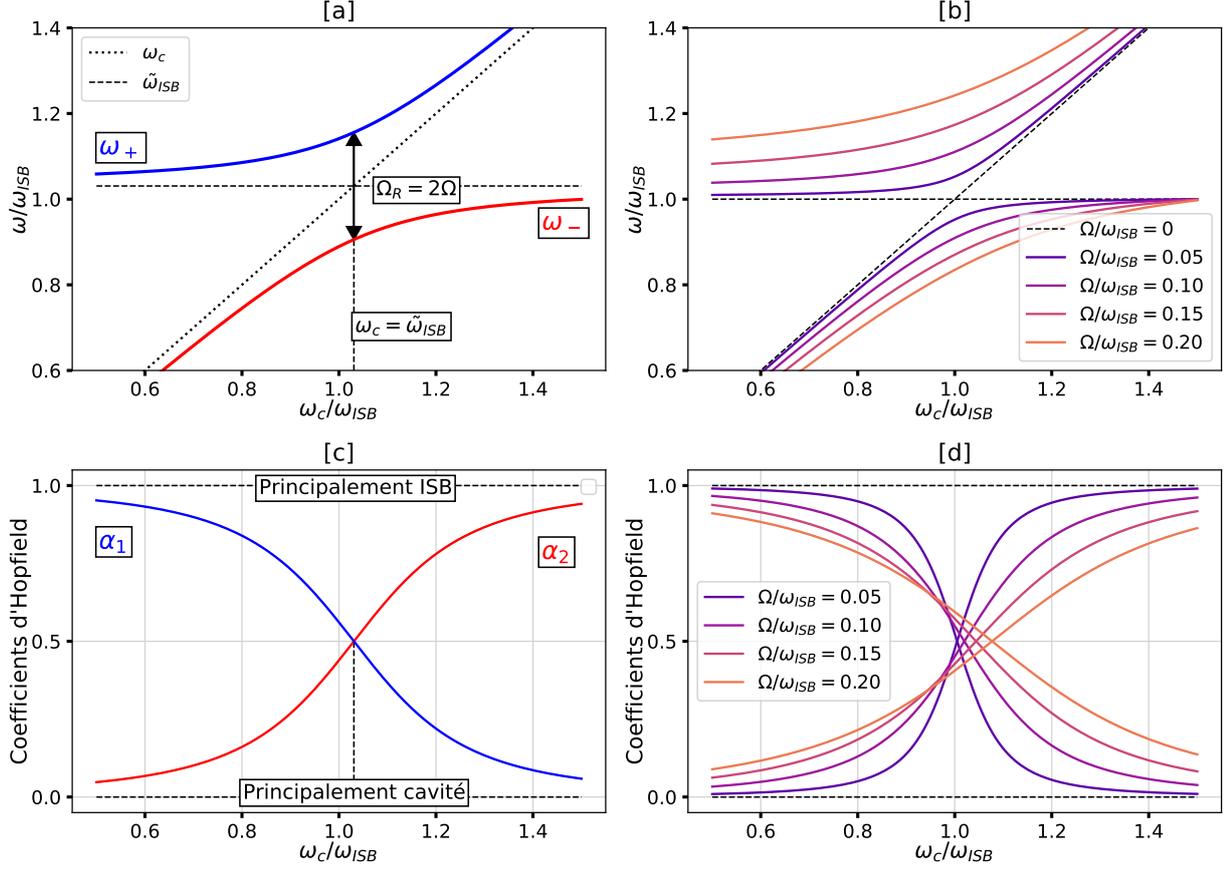


FIGURE 4.2 – [a] Dispersion polaritonique pour $\Omega = \frac{\omega_{\text{ISB}}}{8}$. Les différentes grandeurs asymptotes des branches polaritoniques sont indiquées. [b] Dispersion polaritonique pour différents rapports $\Omega/\omega_{\text{ISB}}$. [c] Coefficients d'Hopfield pour $\Omega = \frac{\omega_{\text{ISB}}}{8}$. [d] Coefficients d'Hopfield pour différents rapports $\Omega/\omega_{\text{ISB}}$.

On peut diagonaliser cet Hamiltonien à l'aide des matrices de passage P (cf. Annexe [D] pour la démonstration) :

$$\mathcal{H}_{\pm} = P^{-1}\mathcal{H}P = \begin{bmatrix} \omega_+ & 0 \\ 0 & \omega_- \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

\mathcal{H}_{\pm} est représenté dans la nouvelle base d'états propres, la base des états *polaritoniques*, composée de l'état polaritonique *haut* $|+\rangle$ et de l'état polaritonique *bas* $|-\rangle$. Ces états s'expriment par une combinaison linéaire des états de la base naturelle $|c\rangle$ et $|\text{ISB}\rangle$ à l'aide des coefficients d'Hopfield α_{\pm} [5] :

$$|+\rangle = \alpha_+^{\text{ISB}}|\text{ISB}\rangle + \alpha_+^c|c\rangle \quad (4.37)$$

$$|-\rangle = \alpha_-^{\text{ISB}}|\text{ISB}\rangle + \alpha_-^c|c\rangle \quad (4.38)$$

Les $|\alpha_{\pm}^{\text{ISB}}|^2$ (respectivement, $|\alpha_{\pm}^c|^2$) représentent la "proportion" de mode ISB (respectivement, cavité) contenue dans les modes polaritoniques $|\pm\rangle$. Ils s'expriment analytiquement :

$$\alpha_1 = \alpha_+^{\text{ISB}} = \alpha_-^c = \frac{\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} := \frac{X}{\sqrt{X^2 + Y^2}} \quad (4.39)$$

$$\alpha_2 = \alpha_+^c = \alpha_-^{\text{ISB}} = \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} := \frac{Y}{\sqrt{X^2 + Y^2}} \quad (4.40)$$

où $\Delta = \tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_c$. Dans cette représentation matricielle 2×2 , les coefficients d'Hopfield sont donc symétriques, et en particulier on a $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$. Enfin, on peut également exprimer les fréquences propres polaritoniques ω_{\pm} :

$$\boxed{\omega_{\pm} = \frac{\tilde{\omega}_{\text{ISB}} + \omega_c}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_c)^2 + 4\Omega^2}} \quad (4.41)$$

Dans la situation asymptotique où $\omega_P = 0$, on retrouve bien que les deux fréquences polaritoniques sont bien égales aux fréquences de cavité et ISB (non plasma-shiftée) : $\omega_+ = \omega_{\text{ISB}}$ et $\omega_- = \omega_c$. Les états polaritoniques apparaissent donc simplement comme une nouvelle manière d'appréhender le système, non plus dans la base *naturelle* cavité/plasmon ISB, mais dans la base des états qui diagonalisent l'Hamiltonien d'interaction lumière-matière. De la même manière qu'un photon est la représentation particulière d'une excitation du mode optique, on appellera *polariton* l'excitation associée à un mode polaritonique. La figure 4.2 trace les différentes grandeurs abordées dans les équations précédentes⁵.

Quelques points à noter :

- Le minimum de différence d'énergie Figure 4.2-[a,b] entre les deux branches polaritoniques ω_{\pm} se situe à la résonance $\omega_c = \tilde{\omega}_{\text{ISB}}$ (et non pas ω_{ISB}), et correspond à *l'écart de Rabi* (*Rabi splitting* en anglais), tel que $\Delta\omega_{\pm} = 2\Omega$. Cette résonance concorde avec l'égalité des coefficients d'Hopfield ($|\alpha_1|^2 = |\alpha_2|^2 = 0.5$, cf. Figure 4.2-[c,d]) : à la résonance, les modes polaritoniques sont équitablement répartis entre le mode de cavité et le mode ISB.
- À l'inverse, loin de la résonance, les branches polaritoniques convergent vers une représentation principalement ISB (respectivement cavité), tel que, lorsque $\omega_c/\omega_{\text{ISB}} \rightarrow +\infty$, on a $\omega_+ \rightarrow \omega_c$ et $\omega_- \rightarrow \tilde{\omega}_{\text{ISB}}$ (et inversement pour $\omega_c/\omega_{\text{ISB}} \rightarrow 0$), ce qui concorde avec des coefficients d'Hopfield respectivement égaux à 1 et 0.

4.1.5 Distinction entre couplage fort et couplage faible

Jusqu'à présent, on a fait une description très générale du problème de l'interaction plasmon-ISB/cavité : dans la limite de l'approximation de l'onde tournante, la dispersion des modes polaritoniques calculée en équation (4.41) semble toujours être valide. En effet, les équations développées jusque là dans ce chapitre font abstraction de considérations sur

5. On note à nouveau que les résultats présentés dans cette section correspondent à une représentation 2×2 simplifiée. Sans approximation de l'onde tournante, donc en conservant l'Hamiltonien d'interaction de l'équation (4.32), on fait apparaître 4 modes propres polaritoniques, qualifiés par 4 coefficients d'Hopfield.

les phénomènes de décohérence/dissipation qui viendraient perturber l'évolution cohérente du système décrite par l'Hamiltonien \mathcal{H} de l'équation (4.35). Dans cette partie, on discute de l'influence de ces termes décohérents de manière très simple, phénoménologiquement, et on pose les limites entre les régimes de *couplage faible* et de *couplage fort*. La manière la

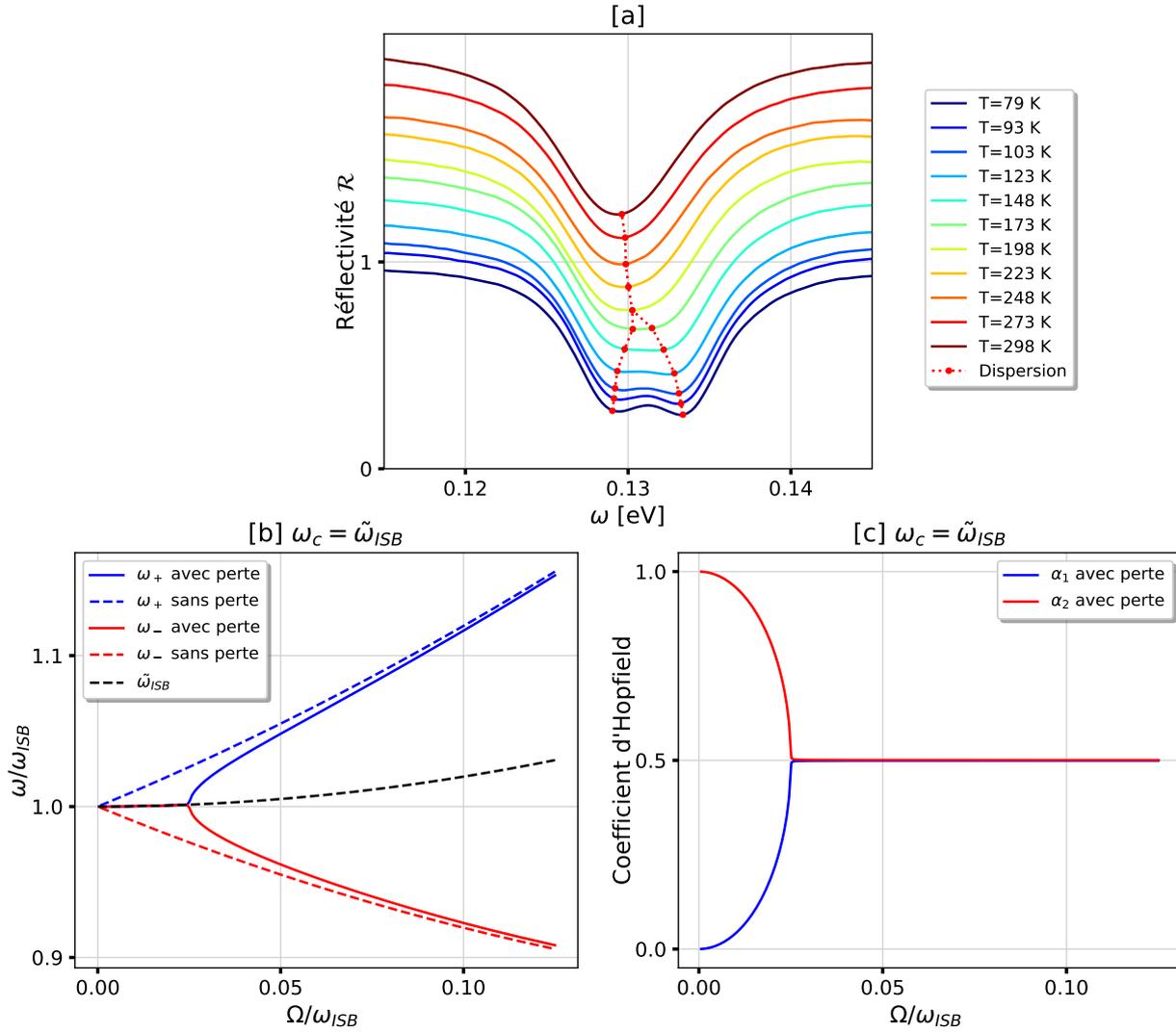


FIGURE 4.3 – [a] Spectres de réflectivité \mathcal{R} de la structure ? pour différentes températures de mesure. La dispersion des pics polaritoniques superposée aux mesures est calculée à partir de l'équation (4.47). [b] Dispersion polaritonique $\mathcal{R}e\{\omega_{\pm}\}$ en fonction de l'amplitude Ω du couplage, pour une situation idéale, sans perte (traits pointillés) et dans le cas de perte (traits pleins). La ligne noire pointillée correspond à la position du mode plasmonique $\tilde{\omega}_{ISB}$. [c] Dispersion des coefficients d'Hopfield α_1 et α_2 , calculé à partir de l'Hamiltonien non-hermitique $\tilde{\mathcal{H}}$ Eq. (4.46). [b] et [c] sont tracés pour la résonance $\omega_c = \tilde{\omega}_{ISB}$.

plus simple d'introduire la notion de pertes dans l'équation (4.35) passe par l'utilisation de

fréquences propres complexes :

$$\omega_c \rightarrow \omega_c + i\gamma_c \quad (4.42)$$

$$\tilde{\omega}_{\text{ISB}} \rightarrow \tilde{\omega}_{\text{ISB}} + i\gamma_{\text{ISB}} \quad (4.43)$$

où γ_{ISB} et γ_c sont réels, et peuvent, dans un premier temps, s'interpréter comme le nombre d'excitations (plasmons ISB et photons de cavité) dissipées par unité de temps (mais qu'on exprimera également en meV). Dans nos système résonnants, on s'attend à ce que l'amplitude des modes ISB et cavité soit oscillante, et donc de la forme harmonique :

$$e^{i(\omega_c+i\gamma_c)t} = e^{i\omega_c t} e^{-i\gamma_c t} \quad (4.44)$$

$$e^{i(\tilde{\omega}_{\text{ISB}}+i\gamma_{\text{ISB}})t} = e^{i\tilde{\omega}_{\text{ISB}} t} e^{-i\gamma_{\text{ISB}} t} \quad (4.45)$$

L'introduction de fréquences propres complexes via γ_c et γ_{ISB} permet effectivement d'introduire phénoménologiquement un amortissement de nos oscillateurs. Pour comprendre l'influence des termes de pertes sur nos états propres, on va diagonaliser l'Hamiltonien effectif non-Hermitique $\tilde{\mathcal{H}}$:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} + i\gamma = \begin{bmatrix} \omega_c & \Omega \\ \Omega & \omega_{\text{ISB}} \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} \gamma_c & 0 \\ 0 & \gamma_{\text{ISB}} \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

On obtient deux nouvelles valeurs propres complexes $\tilde{\omega}_{\pm}$, qu'on peut écrire analytiquement comme :

$$\tilde{\omega}_{\pm} = \frac{\tilde{\omega}_{\text{ISB}} + \omega_c}{2} + i \frac{\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_c}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_c + i(\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c))^2 + 4\Omega^2} \quad (4.47)$$

À la résonance $\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = \omega_c$, l'expression se simplifie telle que :

$$\tilde{\omega}_{\pm} = \omega_c + i \frac{\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_c}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{4\Omega^2 - (\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c)^2} \quad (4.48)$$

La dispersion en énergie est alors donnée par la partie réelle de $\tilde{\omega}_{\pm}$, $\mathcal{R}e\{\tilde{\omega}_{\pm}\}$. Les figures 4.3-[b] et [c] tracent cette dispersion, ainsi que les coefficients d'Hopfield, en fonction de l'amplitude du couplage Ω . On distingue alors deux situations :

- si $4\Omega^2 \geq (\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c)^2$, le terme sous la racine reste positif, et l'évaluation de la racine reste donc un nombre réel. Par conséquent, les énergies propres du système sont séparées d'un facteur $\pm \frac{1}{2} \sqrt{4\Omega^2 - (\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c)^2} < \Omega$, qui implique donc que la levée de dégénérescence est affectée par l'amplitude des termes de perte $\gamma_{c,\text{ISB}}$. Lorsque $\Omega^2 \gg (\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c)^2$, on retrouve bien que $\mathcal{R}e\{\tilde{\omega}_{\pm}\} \rightarrow \omega_{\pm}$. Autrement dit, les effets des pertes sur la dispersion sont d'autant plus faibles que l'amplitude du couplage est fort. Ces situations décrivent un **régime de couplage fort lumière-matière**.
- si $\Omega^2 < (\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c)^2$, l'évaluation de la racine donne un nombre complexe. La dispersion donnée par $\mathcal{R}e\{\tilde{\omega}_{\pm}\}$ donne alors deux énergies propres dégénérées (on rappelle qu'on est à la résonance). On est dans une situation de **couplage faible lumière-matière**.

La distinction de ces deux régimes de fonctionnement conditionne le formalisme qui permet de traiter l'interaction lumière-matière : *en régime de couplage faible*, on traite cette faible interaction par une méthode dite des perturbations. Les énergies propres du système ne sont pas altérées, et l'interaction est calculée via des taux d'absorption et d'émission : c'est

la méthode qui a été adoptée dans les chapitres 2 et 3 (cf. équation(3.12)). À l'inverse, *en régime de couplage fort*, les énergies propres du système étant altérées par le couplage, on ne peut plus traiter l'interaction par la méthode des perturbations. On développera dans les chapitres suivants un formalisme adapté aux calculs d'absorption et de transport dans ce nouveau régime de fonctionnement.

La figure 4.3-[a] représente des spectres expérimentaux⁶ de réflectivité \mathcal{R} d'un QCD (dopage $n_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, 1 période, voir Annexe [C] pour la structure de bande) embarqué dans une structure optique de type réseau 1D MIM (*Metal-Insulator-Metal*). Ces mesures ont été réalisées via un μ FTIR Bruker Vertex 70, couplé à un module *Linkam* de refroidissement. Les températures mesurées vont de $T = 79\text{K}$ à $T = 298\text{K}$. Pour ces mesures, lorsque la température diminue, on observe un passage progressif d'un spectre de réflectivité à un pic, à un spectre de réflectivité à deux pics. Les positions de ces pics en énergie sont décalées par rapport à l'unique pic de résonance observé à haute température ($T = 298\text{K}$).

Dans ces dispositifs, le mode optique de cavité MIM se couple avec la transition ISB et permet de rentrer en régime de couplage fort : on distingue, pour les faibles températures ($T < 173\text{K}$) la présence de deux pics de réflectivité, signature spectrale de l'existence des modes polaritoniques. En effet lorsque la température diminue, les pertes liées à l'absorption ISB diminuent également (on diminue progressivement γ_{ISB}), ce qui permet au système de passer d'un régime de fonctionnement en couplage faible (l'unique pic observé dans ce cas correspond à la résonance de la cavité optique) à un fonctionnement en couplage fort, qui fait apparaître les deux modes polaritoniques dans le spectre de réflectivité. La modélisation de la réponse optique d'un QCD en régime de couplage fort sera présentée dans les chapitres suivants.

Expérimentalement, la condition de passage d'un régime à l'autre s'apparente donc plutôt à un *critère de résolution spectrale* des pics associés aux polaritons : notre système est dans un régime de couplage fort si les deux maxima spectraux associés aux modes polaritoniques sont discernables l'un de l'autre, ce qui se traduit par :

$$\boxed{2\Omega > \gamma_c + \gamma_{\text{ISB}}} \quad (4.49)$$

Spectralement, 2Ω s'interprète comme la distance en énergie entre ces deux pics, tandis que $\gamma_c + \gamma_{\text{ISB}}$ est approximativement la largeur à mi-hauteur d'un mode polaritonique lorsque $\omega_c = \tilde{\omega}_{\text{ISB}}$.

4.1.6 Bilan

Dans cette première partie, nous avons repris la description de l'interaction lumière-matière du chapitre 2 et nous l'avons élargi à une description microscopique : successivement, nous sommes passés d'une description fermionique de la transition ISB à une description bosonique, où un unique mode plasmonique contient l'intégralité de la capacité du système ISB à se coupler avec la lumière. En introduisant une description en seconde quantification du mode TM_{01} confiné dans la cavité optique, nous avons pu écrire l'Hamiltonien d'interaction entre le mode plasmonique et ce mode électromagnétique. L'écriture du couplage

6. Remerciements à Tuan Nghia Lê et Simon Vassant du CEA pour ces mesures réalisées dans le cadre du projet ANR Metanizo.

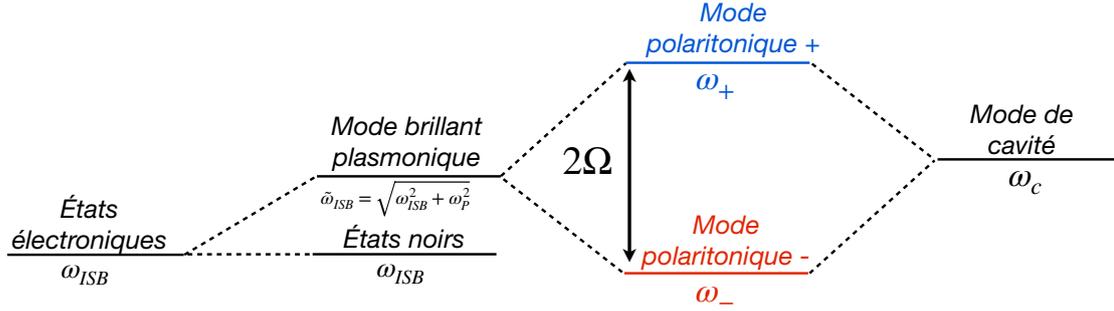


FIGURE 4.4 – Représentation schématique des différents niveaux d'énergies considérés.

entre ces deux modes dans une nouvelle base de représentation a alors donné naissance à deux nouveaux modes propres, les modes *polaritoniques*, espacés par la pulsation Rabi 2Ω (à résonance), et centrés autour des états noirs. Enfin, on a compris qu'en soumettant cette interaction cohérente à des perturbations extérieures, dissipatives et décohérentes, on est susceptible d'altérer la dispersion de ces modes polaritoniques. En particulier, on a mis en évidence que le rapport d'amplitude entre le couplage (Ω_R) et les termes perturbatifs extérieurs (γ_c, γ_{ISB}) permet de distinguer deux régimes de fonctionnement, régime de couplage fort ou de couplage faible, qui eux-même conditionnent le formalisme utilisé pour la modélisation de l'absorption et du transport.

L'origine des états polaritoniques ISB développés, on va désormais étudier le comportement d'un dispositif ISB en particulier, le QCD, fonctionnant en régime de couplage fort.

4.2 Analyse optique d'un QCD en couplage fort

Dans cette partie, nous nous intéresserons uniquement au comportement *optique* de réseaux d'antennes patch intégrant la région active des QCDs. Ces résonateurs métal-métal sont obtenus par collage sur un substrat de silicium métallisé. Ils sont réalisés⁷ par matrices de $1 \times 2 \text{ mm}^2$, organisées sous la forme d'un réseau de période p , avec des tailles s de patches carrés (cf. figure 4.5-[a]). Changer la période p nous permettra d'ajuster le contraste optique, tandis que s permettra d'ajuster la résonance du mode optique confiné ω_c . On précise que cette géométrie n'est pas nécessairement la plus adaptée à l'étude du couplage fort : en particulier, la gravure d'un réseau de diffraction sur le résonateur optique, idée développée notamment dans [21], permet d'ajuster la résonance de cette cavité et donc de sonder *continûment* la dispersion polaritonique. Dans notre cas, le paramètre s est un paramètre géométrique, contraint par un procédé de fabrication, qui ne permet que l'étude discrète de la dispersion des polaritons. Les couches composant la région active sont développées par épitaxie à jet moléculaire (MBE, *molecular beam epitaxy*). Elles constituent une répétition de 5 périodes de couches d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$, dont la structure de bande est représentée figure 4.5-[b]. Prévu pour détecter à $\lambda = 10 \text{ }\mu\text{m}$, par la suite nous nommerons cette structure par QCD $10\mu\text{m}$. On note une particularité sur l'agencement de la structure de bande : le

7. Toute la fabrication a été menée par G.Quinchart et C.Mismer du III-Vlab.

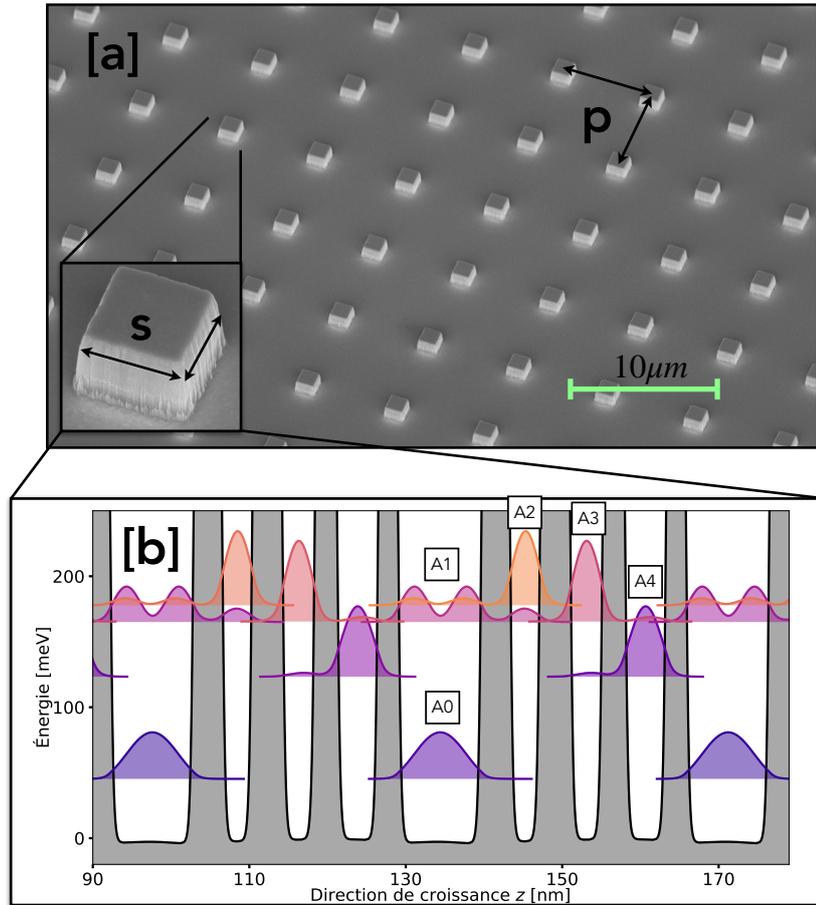


FIGURE 4.5 – [a] Photographie prise au MEB d’un réseau d’antennes patches utilisé pour des mesures de réflectivité \mathcal{R} . s désigne les dimensions latérales de ces patches carrés, p la période du réseau. On note que dans le cadre de ces mesures, les patches ne sont pas reliés électriquement par des fils. [b] Structure de bande du QCD embarqué dans les cavités patches, calculée à $T = 78\text{K}$.

niveau extracteur $A2$ est situé au-dessus (à plus haute énergie) que le niveau excité $A1$. Cette apparente erreur de conception résulte de l’absence de prise en compte (au moment de la conception) des effets de composition *sigmoïdale* (cf. figure 2.5.3 Chapitre 2). À 295K , on calcule une probabilité d’extraction $p_E = 0.3$. Les puits quantiques actifs, dans lesquels les processus d’absorption de photon ont lieu, sont dopés n (Si). Précisément, pour effectuer des mesures de réflectivité, trois échantillons ont été réalisés :

- un échantillon *cavité* où les puits optiques des QCDs ne sont pas dopés. Cet échantillon permettra de caractériser les propriétés optiques de la cavité, en éliminant l’influence de l’absorption ISB.
- un échantillon dopé à $n_{2\text{D}} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.
- un échantillon dopé à $n_{2\text{D}} = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Pour le moment, on note que les patches ne sont pas reliés électriquement entre eux via des fils. L’idée ici est d’uniquement mesurer la réponse optique du système, à l’aide de réseaux de patches de grandes tailles.

4.2.1 Mesures de réflectivité

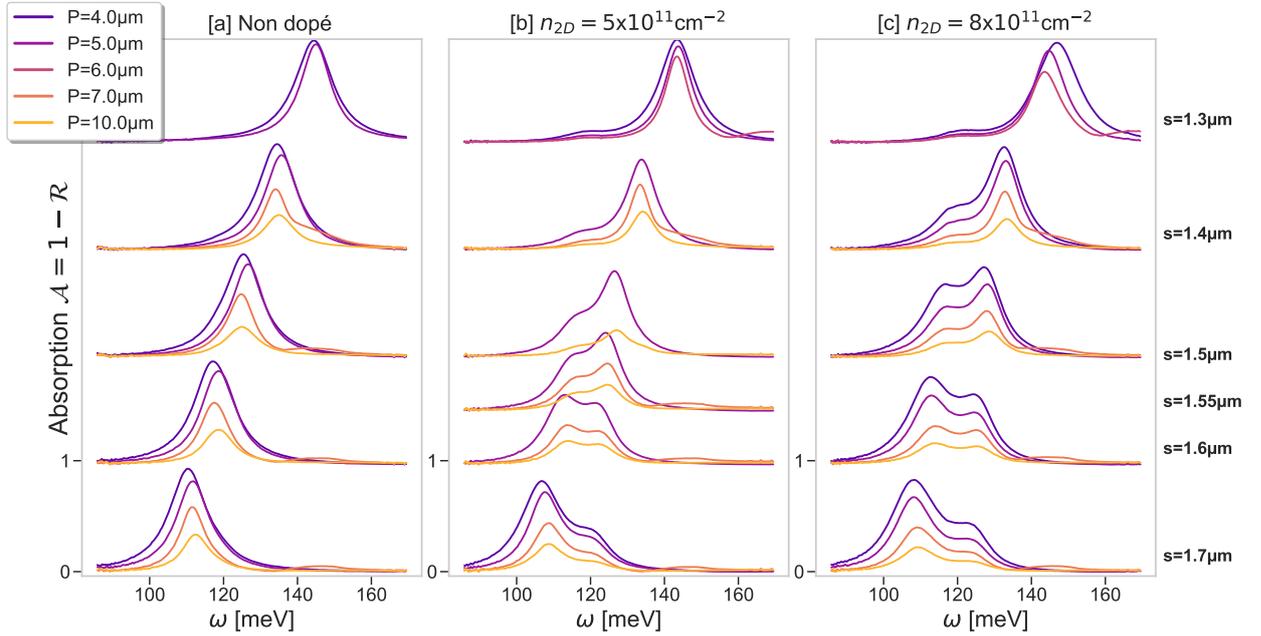


FIGURE 4.6 – Spectres expérimentaux de réflectivité (présentés sous la forme d’absorption $\mathcal{A} = 1 - \mathcal{R}$) pour trois échantillons : [a] puits quantiques optiques non-dopés [b] dopés à $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [c] dopés à $n_{2D} = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Différentes valeurs de pas de réseau p sont mesurées et superposées. Un offset est ajouté aux courbes pour une meilleure lecture.

Des mesures de réflectivité \mathcal{R} sont réalisées sur les trois échantillons, par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR, Bruker Vertex 70) à l’aide d’une paire de miroirs parabolique ($F = 180 \text{ mm}$) et elliptique ($F = 282/42 \text{ mm}$) et d’un photo-détecteur MIR de type DTGS. Le spectre d’un miroir d’or est utilisé comme référence pour la normalisation des spectres. Toutes les mesures présentées sont réalisées à 295K, pour un angle d’incidence de 13° (0° correspondant à une incidence normale à la surface des dispositifs). Différents couples (s, p) sont mesurés. Les résultats de mesures sont regroupés sur la figure 4.6, sous la forme de spectres d’*absorption* $\mathcal{A} = 1 - \mathcal{R}$.

Pour l’échantillon non-dopé figure 4.6-[a], on retrouve des résultats déjà discutés dans le chapitre 3 : on observe un unique pic de résonance, associé au mode de cavité, dont la position évolue vers les hautes énergies lorsque s diminue. Changer le paramètre de réseau p ajuste le contraste du pic. Pour les deux autres échantillons [b] et [c] dopés, on observe deux pics de résonance, qui semblent anticroiser autour de $\omega \approx 120 \text{ meV}$ pour une taille de cavité $s \approx 1.55 \mu\text{m}$. Loin de la résonance, pour $s > 1.55 \mu\text{m}$, le pic situé à la plus faible énergie domine en amplitude le pic situé à plus forte énergie, et cette tendance s’inverse lorsque $s < 1.55 \mu\text{m}$. Un tel anticroisement, localisé autour de l’énergie de la transition ISB, est une signature claire du régime de couplage fort et des modes polaritoniques. Par ailleurs, à même paramètre s , la séparation des pics de l’échantillon [c] est plus prononcée que pour l’échantillon [b] : l’échantillon [c] étant plus dopé, le couplage Ω est plus intense et les pics sont mieux résolus. Le paramètre de réseau p semble simplement ajuster le contraste des

courbes. Dans la suite, on va détailler quantitativement ces spectres optiques à l'aide d'un formalisme semi-classique simple mais puissant : *la théorie des modes couplés*.

4.2.2 Théorie des modes couplés à deux résonateurs

Description du modèle

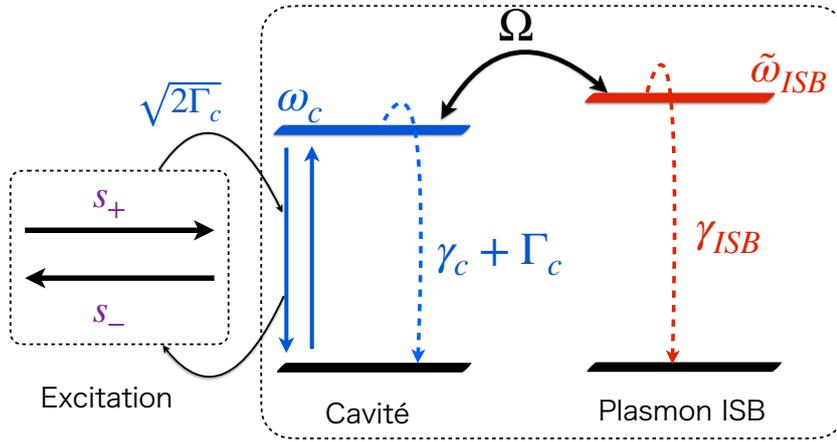


FIGURE 4.7 – Représentation schématique de la théorie des modes couplés à deux résonateurs (ω_c et $\tilde{\omega}_{ISB}$) en interaction avec un port d'excitation.

La dynamique souvent complexe de systèmes résonnants couplés entre eux peut être séparée en différentes composantes fondamentales que sont les *modes*. Les modes sont des solutions stationnaires de la dynamique d'un système. Ils permettent d'établir une base de représentation pertinente de ce système, dans laquelle on étudiera son évolution. La théorie des modes couplés (CMT) est un formalisme semi-classique qui traite de manière phénoménologique l'évolution de ces systèmes résonnants (et donc de modes) couplés entre eux et soumis à des interactions dissipatives avec leur environnement. C'est un formalisme simple mais puissant, qui nous apportera une intuition cruciale pour la bonne compréhension de nos systèmes en couplage fort. Dans le chapitre 3, nous avons décrit le spectre d'une cavité patch en couplage faible à l'aide de la CMT à un seul résonateur (que l'on avait associé à la cavité). Les mécanismes d'absorption dans la transition ISB avait été traités de manière classique, via un terme γ_{QW}^z , qui reposait sur la distribution du champ électromagnétique E^z et l'expression de la permittivité des puits dopés ϵ_{QW}^z . En régime de couplage fort, une telle description n'est plus possible, puisqu'elle n'est pas en mesure de décrire le second pic d'absorption observé dans les mesures de la figure 4.6. Le formalisme CMT à un résonateur doit donc être élargi à un second résonateur, le mode plasmonique ISB, cf. Figure 4.7.

Une telle description à deux résonateurs pour traiter la réponse optique des dispositifs ISB embarqués dans les résonateurs MIM (*metal-insulator-metal*) se retrouve de manière récurrente dans la littérature [111, 21, 113, 63, 108, 119]. et permet de décrire efficacement et avec succès le comportement optique de ces dispositifs. Les auteurs de [27] détaillent par ailleurs, à l'aide de ce formalisme, comment il est possible de concevoir des dispositifs

à la fois en couplage critique *et* en couplage fort. L'équation générique décrivant l'évolution de l'amplitude de modes \mathbf{a} en interaction avec un port d'excitation harmonique s'écrit :

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \left[\underbrace{i\mathcal{H}}_{\text{Évolution unitaire}} - \underbrace{(\gamma + \mathbf{\Gamma})}_{\text{Dissipation}} \right] \mathbf{a} + \underbrace{\mathbf{K}s_+e^{i\omega t}}_{\text{Excitation}} \quad (4.50)$$

avec :

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \omega_c & \Omega \\ \Omega & \tilde{\omega}_{\text{ISB}} \end{bmatrix}, \quad \gamma + \mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \gamma_c + \Gamma_c & 0 \\ 0 & \gamma_{\text{ISB}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_c \\ a_{\text{ISB}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \sqrt{2\Gamma_c} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

Les amplitudes complexes a_c et a_{ISB} quantifient la capacité des modes (cavité et plasmon ISB) à accumuler de l'énergie. En particulier, $n_i = |a_i|^2$ représente la *population* contenue dans le mode i , ou de manière équivalente, l'*énergie* contenue dans ce mode.

L'évolution du système se décompose en quatre contributions, représentées par quatre termes \mathcal{H} , γ , $\mathbf{\Gamma}$ et $\mathbf{K}s_+e^{i\omega t}$:

- L'Hamiltonien hermitique \mathcal{H} décrit l'évolution *unitaire* et cohérente du système, c'est-à-dire l'évolution en l'absence de mécanismes dissipatifs. On choisit cet Hamiltonien comme étant l'Hamiltonien décrit dans le chapitre 4, Eq. 4.35 : ω_c est l'énergie propre du mode de cavité, $\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = \sqrt{\omega_{\text{ISB}}^2 + \omega_P^2}$ celle du mode plasmonique ISB, décalée par rapport à l'énergie de la transition nue ω_{ISB} par l'action de la fréquence plasma ω_P , et Ω désigne le couplage lumière-matière entre ces deux modes.
- Le terme de dissipation *non-radiative* γ décrit l'interaction du système avec les différents canaux de dissipation non-radiatifs. Dans le cas de la cavité γ_c décrit le taux de dissipation de photons par absorption dans les métaux, mais aussi dans toutes les couches qui ne sont pas les puits quantiques dopés. Par rapport à notre description à un résonateur du chapitre 3, γ_c n'inclut pas γ_{QW}^z . En effet, les pertes associées à la transition ISB sont désormais décrites par les pertes du mode plasmonique γ_{ISB} (dissipation par interaction avec les phonons LO, rugosité etc...).
- Le terme de dissipation *radiative* $\mathbf{\Gamma}$ décrit l'interaction du système avec le continuum électromagnétique environnant. Dans notre cas, les photons contenus dans la cavité optique sont rayonnés vers l'extérieur à un taux Γ_c (cf. chapitre 3, section 3.20).
- Le terme d'excitation $\mathbf{K}s_+e^{i\omega t}$ décrit l'injection de puissance dans le système. On choisit de représenter l'excitation incidente par une onde harmonique de fréquence ω et de puissance incidente $|s_+|^2$ ⁸. Le couplage entre cette onde incidente et les modes résonnants du système est donnée par \mathbf{K} . [107] montre que la qualité de ce couplage dépend intimement de l'intensité des termes de dissipation radiative Γ . Dans notre système en particulier :

$$K_c = \sqrt{2\Gamma_c} \quad (4.52)$$

$$K_{\text{ISB}} = \sqrt{2\Gamma_{\text{ISB}}} \approx 0 \quad (4.53)$$

Le mode ISB, lui, ne se couple pas directement à l'environnement électromagnétique extérieur, mais *via* le mode de cavité, tel qu'en général on aura $\Gamma_{\text{ISB}} \ll \Gamma_c$. Cependant,

8. L'amplitude d'un mode a_i n'est donc pas de la même unité que l'amplitude de l'onde d'excitation s_+ , puisque $|a_i|^2$ correspond à une énergie et $|s_+|^2$ à une puissance.

une description complète de la théorie des modes couplés fait apparaître des termes croisés $\sqrt{\Gamma_{\text{ISB}}\Gamma_c}$ dans la matrice $\mathbf{\Gamma}$ [107, 120], qui décrivent l'interaction radiative des modes entre eux. De tels termes peuvent avoir des conséquences importantes sur les allures spectrales : on les négligera sous la condition supplémentaire $\Omega^2 \gg \Gamma_{\text{ISB}}\Gamma_c$. Par la suite, on vérifiera que cette condition est respectée, et on prendra donc $\Gamma_{\text{ISB}} = 0$.

En régime d'oscillation forcée, le système d'équation 4.50 est résolu, et l'absorption totale \mathcal{A} est calculée à partir des puissances dissipées par les canaux *non-radiatifs* des deux résonateurs :

$$\boxed{\mathcal{A} = \mathcal{A}_c + \mathcal{A}_{\text{ISB}} = 2\gamma_c \frac{|a_c|^2}{|s_+|^2} + 2\gamma_{\text{ISB}} \frac{|a_{\text{ISB}}|^2}{|s_+|^2}} \quad (4.54)$$

où \mathcal{A}_c et \mathcal{A}_{ISB} désignent les contributions des deux modes à l'absorption totale. Dans le cas de la cavité non-dopée, on utilise la théorie des modes couplés à un résonateur déjà développée dans le chapitre 3, section 4.50, Eq.3.21 (ce qui revient à prendre $\Omega = 0$ dans l'équation 4.50), qui nous permet de trouver une unique résonance Lorentzienne :

$$\mathcal{A}_c^{\text{Non-dopée}} = \frac{4\gamma_c\Gamma_c}{(\gamma_c + \Gamma_c)^2 + (\omega - \omega_c)^2} \quad (4.55)$$

Application aux données expérimentales

Pour décrire quantitativement et de manière pertinente les données expérimentales de la figure 4.6 à l'aide de CMT, on va adopter une stratégie de fit global : notre fonction de fit se basera sur *l'intégralité* des spectres expérimentaux (l'ensemble des couples p, s mesurés), calculés à l'aide d'un unique jeu de paramètres, restreint au minimum. Pour la procédure de fit, on utilise les paramètres suivants :

- l'indice effectif de la cavité n_{eff} , pour décrire la dispersion du mode ω_c en fonction du paramètre s :

$$\omega_c(s) = \frac{\pi c_0}{n_{\text{eff}}s} \quad (4.56)$$

n_{eff} est pris indépendant de la fréquence ω , ce qui est une approximation satisfaisante dans le cas d'une situation de faible absorption par porteurs libres et d'une plage de fréquence étudiée restreinte.

- la pulsation plasma ω_P , pour quantifier à la fois l'intensité du couplage, et les effets de dépolarisation plasma sur la résonance ISB :

$$\Omega = \frac{\omega_P}{2} \sqrt{f_w} \quad (4.57)$$

$$\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = \sqrt{\omega_{\text{ISB}}^2 + \omega_P^2} \quad (4.58)$$

où l'on prendra un recouvrement géométrique $f_w \approx N_p L_{\text{QW}}/L_z^c = 0.17$ (N_p nombre de périodes, L_z^c hauteur de la cavité).

- le coefficient α_c , pour quantifier les variations du taux de dissipation radiatif Γ_c avec la période p du réseau de patch :

$$\Gamma_c(p) = \frac{\alpha_c}{p^2} \quad (4.59)$$

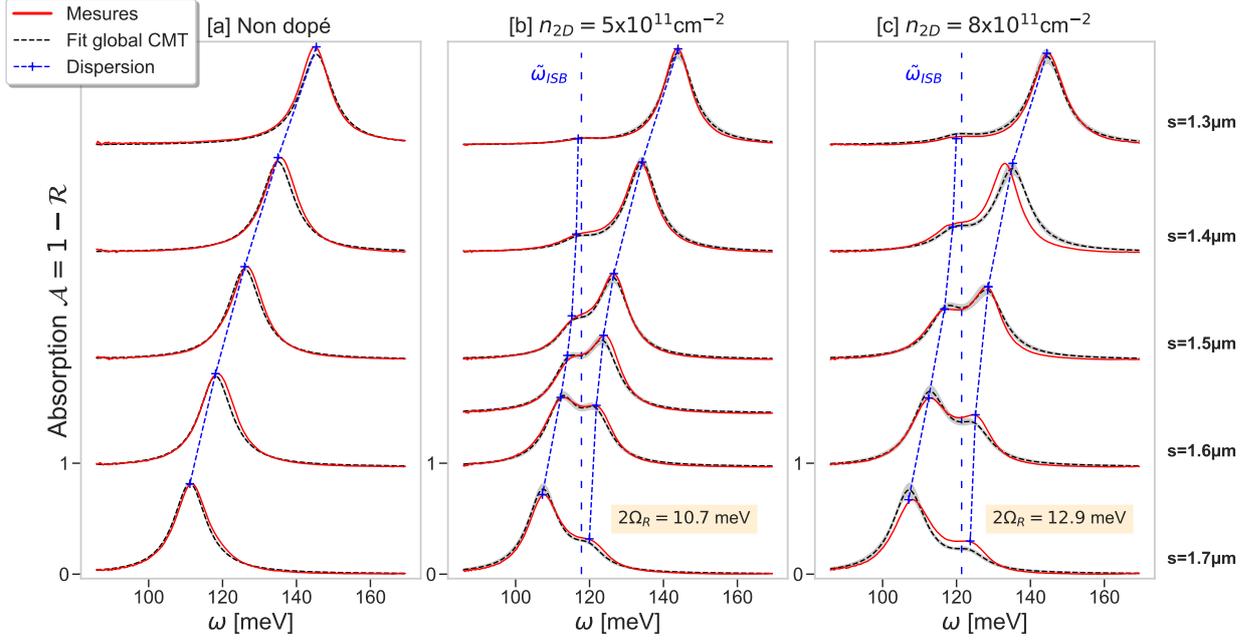


FIGURE 4.8 – Spectres expérimentaux (traits pleins) et calculés (trait pointillés) de réflectivité pour trois échantillons : [a] puits quantiques optiques non-dopés [b] dopés à $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [c] dopés à $n_{2D} = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Les spectres sont représentés pour un unique pas de réseau $p = 5 \text{ } \mu\text{m}$, et des variations de taille de cavité s . Un offset est ajouté aux courbes pour une meilleure lecture. La dispersion des modes polaritoniques ω_{\pm} est également superposée aux courbes, pour comparaison avec les maxima des pics d'absorption. Les erreurs de fits propagés sur les spectres sont représentées par les zones grisées (voir Annexe [E] pour le calcul détaillé des erreurs). Les mesures sont réalisées à $T = 300\text{K}$. Voir Annexe [F] pour l'ensemble des résultats de fit.

— les pertes non-radiatives γ_c et γ_{ISB} seront prises constantes quel que soit p, s .
On a donc réussi à restreindre la description de l'intégralité des spectres (s, p) au jeu de paramètres $(n_{\text{eff}}, \gamma_c, \alpha_c, \omega_{\text{ISB}}, \gamma_{\text{ISB}}, \omega_P)$ pour les mesures associées aux échantillons dopés, et $(n_{\text{eff}}, \gamma_c, \alpha_c)$ pour les mesures des échantillons non-dopés. Les résultats des fits sont présentés dans la figure 4.8 pour $p = 5 \text{ } \mu\text{m}$, sous la forme de traits pointillés (on trouve des résultats supplémentaires de cette procédure de fit en Annexe [F]). Les erreurs liées aux paramètres fittés sont propagées sur le calcul des spectres et représentées par les zones pleines grisées (le détail du calcul de ces erreurs est donné en Annexe [E]).

Pour les trois échantillons (Fig.4.8-[a],[b],[c]), on obtient un accord quantitatif entre les données expérimentales et les courbes calculées, pour tous les couples (p, s) . La dispersion de la résonance ω_c en s ainsi que les contrastes spectraux, régis par p , sont bien reproduits. Les paramètres de fit obtenus sont résumés dans le Tableau 4.1. Les paramètres de cavité n_{eff}, γ_c et α_c sont cohérents entre les différents échantillons, puisqu'il sont bien indépendants du dopage. Pour les deux échantillons dopés, on calcule les séparations de Rabi :

$$n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} : 2\Omega = 10.7 \text{ meV} \quad (4.60)$$

$$n_{2D} = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} : 2\Omega = 12.9 \text{ meV} \quad (4.61)$$

	a. Cavit� non-dop�e	b. $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$	c. $n_{2D} = 8 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$
n_{eff}	3.283 ± 0.001	3.333 ± 0.001	3.334 ± 0.001
γ_c (meV)	3.8 ± 0.1	3.5 ± 0.01	3.9 ± 0.01
α_c (meV. μm^2)	38.5 ± 0.1	38.6 ± 0.1	40.4 ± 0.2
ω_{ISB} (meV)	-	115.0 ± 0.1	115.1 ± 0.1
γ_{ISB} (meV)	-	5.2 ± 0.1	5.8 ± 0.1
ω_P (meV)	-	25.6 ± 0.1	31.0 ± 0.1

TABLE 4.1 – R sultat des trois proc dure de fit pour les trois situations de dopage, correspondant aux calculs (traits pointill s) de la figure 4.8.

Les  largissement des r sonances polaritoniques sont estim es autour de $\frac{\gamma_c + \Gamma_c + \gamma_{\text{ISB}}}{2} \approx 5$ meV. Par rapport au crit re de r solution spectrale fix   quation (4.49), on se situe au commencement du couplage fort, puisque les rapports d'amplitudes couplage/dissipation sont proches de 1 dans les deux situations de dopage. N anmoins, les deux pics polaritoniques sont parfaitement discernables et la dispersion de ces pics ne laisse aucun doute sur le r gime de fonctionnement des dispositifs. Par ailleurs, le rapport d'amplitude entre les s parations de Rabi des deux  chantillons est coh rent avec le rapport des dopages :

$$\frac{12.9}{10.7} \approx 1.21 \quad \text{S parations} \quad (4.62)$$

$$\sqrt{\frac{8}{5}} \approx 1.26 \quad \text{Dopages} \quad (4.63)$$

On trouve  galement une valeur de transition ISB ω_{ISB} qui concorde avec le maximum d'absorption calcul  en prenant en compte les effets de non-parabolicit .

De mani re g n rale, on a donc trouv  des param tres de fit coh rents entre les diff rents  chantillons, coh rents avec les calculs r alis s lors de leur conception, et qui donnent une ad quation quantitative entre exp rience et th orie. Les faibles d saccords observ s sont attribu s   la simplicit  de notre mod le et   la dispersion exp rimentale : on s'attend   des incertitudes exp rimentales sur les param tres s, p, n_{2D} et ω_{ISB} principalement. Le spectre de r flectivit  $s = 1.4 \mu\text{m}$ de l' chantillon [c] de la figure 4.8 illustre ces incertitudes : une diff rence s'observe sur la position du pic situ    plus haute  nergie, entre fit et mesures. En pratique, il suffit d'ajuster s   une valeur de $1.43 \mu\text{m}$ pour que le pic th orique se recoupe avec le spectre exp rimental, ce qui sugg re une incertitude exp rimentale sur s .

Sur la figure 4.8, on superpose  galement la dispersion des modes polaritoniques, calcul e   partir de l'expression des  nergies propres ω_{\pm} de l' quation (4.41), et des param tres retourn s par les fits. Les maxima d'absorption concordent bien avec cette dispersion, tout le long de l'anticroisement.

La th orie des modes coupl s   deux r sonateurs s'affirme effectivement comme un formalisme simple et intuitif pour d crire quantitativement la r ponse *optique* de dispositifs ISB en r gime de couplage fort. Nous verrons dans la suite comment ce formalisme pratique peut  tre adapt    la description du comportement * lectro-optique* de ces m mes dispositifs.

4.3 Analyse électro-optique d'un QCD en couplage fort

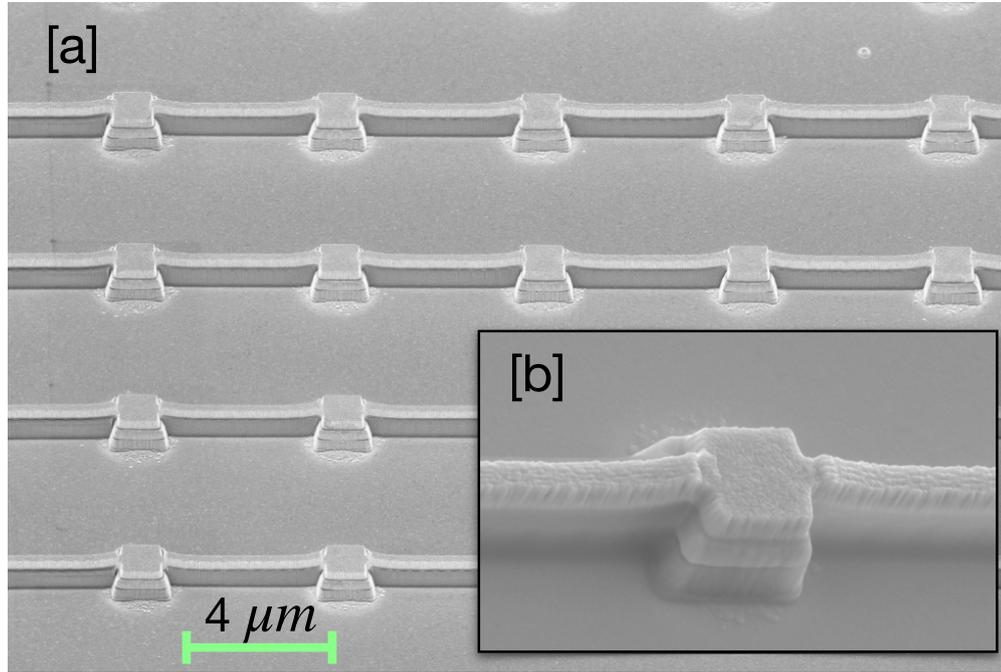


FIGURE 4.9 – Photographies MEB d'un réseau d'antennes patch utilisé pour mesurer les signaux de photo-réponse.

Dans cette partie, on se tourne vers la caractérisation de la photo-réponse de nos dispositifs en régime de couplage fort. Par rapport aux dimensions des dispositifs utilisés pour les mesures optiques, des échantillons de plus petite surface (8×8 patches, soit environ $50 \times 50 \mu\text{m}^2$) sont réalisés. Cette fois, les patches sont connectés par des fils métalliques d'environ 250 nm de largeur, réalisés par lithographie à faisceau d'électron (cf. figure 4.9). Les échantillons sont placés dans un cryostat ($T = 78 \text{ K}$), et mesurés⁹ pour une tension appliquée nulle 0V. Ils sont illuminés par la source global du FTIR, et le signal est mesuré en mode *rapid scan*. La lumière incidente est polarisée TM et perpendiculaire aux fils, pour exciter exclusivement le mode TM_{01} non-perturbé par la présence des fils [121]. Enfin, le photo-courant généré est amplifié par un amplificateur trans-impédance à faible bruit. Seul l'échantillon dopé à $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ a pu être réalisé et donc mesuré. À noter que les échantillons utilisés pour les mesures de photo-réponse et de réflectivité proviennent bien de la même plaque épitaxiée, mais elles ne sont pas pour autant identiques : elles ont été fabriquées séparément, et dans un cas les patches ne sont pas connectés électriquement. Il faudra donc être prudent lors des comparaisons entre les deux échantillons.

4.3.1 Mesures de photo-courant

La figure 4.10-[a] regroupe les différentes mesures, normalisées à l'unité. En effet, observés au microscope à balayage électronique, certains échantillons révèlent des défauts de fabri-

9. Remerciements à Grégory Quinchart, du III-Vlab, pour ces mesures.

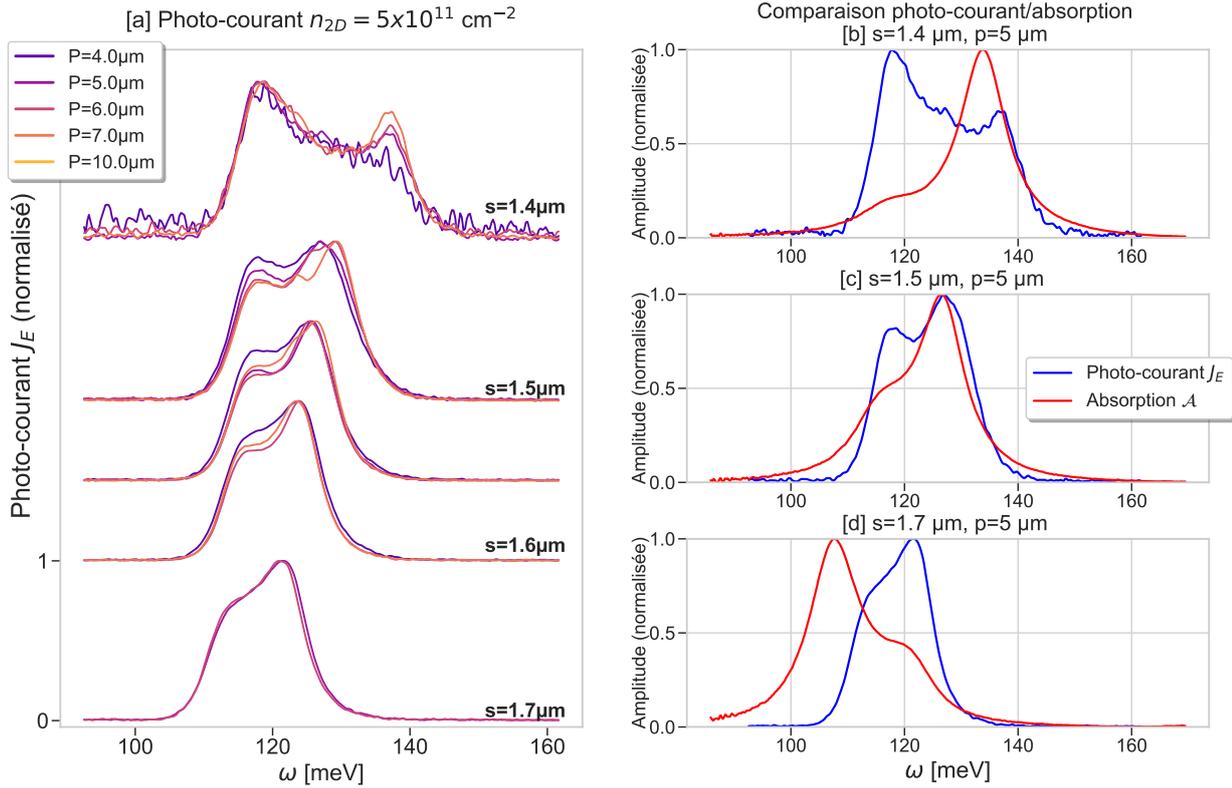


FIGURE 4.10 – [a] Spectres de photo-courant (normalisés) mesurés, pour différentes tailles de réseau p et de tailles de patches s , pour un échantillon dopé à $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, une température $T = 78K$ et une tension appliquée nulle $V = 0$. Un offset est ajouté pour les mesures en s pour une meilleure lecture. [b],[c] et [d] : comparaisons entre les mesures d’absorption de la figure 4.6-[b] et les mesures de photo-courant, pour différents couples (s, p) .

cation : pour certains couples p, s , des fils de connexion inter-patch sont sectionnés. Il n’est donc pas possible de comparer l’amplitude relative des différents spectres entre eux, et c’est pourquoi les mesures sont toutes normalisées. Tout comme les mesures de réflectivité, on observe sur les spectres de photo-courant la présence de deux pics de résonance qui semblent s’anticroiser, signature spectrale du régime de couplage fort. Les mesures étant normalisées, on observe peu de différence entre les mesures à même s et p différents (courbes colorées).

Les figures 4.10-[b],[c] et [d] présentent trois comparaisons de spectres d’absorption et de photo-courant, pour différents couples (s, p) . Ces figures nous permettent d’observer plusieurs différences fondamentales entre les mesures optiques et électriques :

- loin de la résonance (par exemple, $s = 1.4 \mu\text{m}$), l’amplitude relative des pics de photo-courant est inversée par rapport à la réflectivité : le mode polaritonique *haut* (ω_+) est de plus petite amplitude que le mode polaritonique *bas* (ω_-). Il apparaît donc que c’est le mode dont la composante *électronique* est dominante qui contribue de manière prépondérante au photo-courant, inversement aux mesures de réflectivité, où c’est la composante *optique* qui domine.
- les spectres évoluent de manière dissymétrique par rapport à l’anticroisement. Par

comparaison, les spectres de réflectivité présentés dans les figures 4.10-[b] et [d] sont globalement symétriques par rapport au point d'anticroisement $s = 1.55\mu\text{m}$: de part et d'autre de ce point, l'amplitude des pics se renverse, et les largeurs des spectres sont comparables. Si l'amplitude des pics polaritoniques semble effectivement s'inverser, les largeurs spectrales de part et d'autre sont très différentes.

- les pics de photo-courant sont d'amplitudes approximativement égales lorsque les dimensions de la cavité sont situées entre $s = 1.5\mu\text{m}$ et $s = 1.4\mu\text{m}$, pour environ $\omega \approx 125\text{ meV}$. Pour la réflectivité, on obtenait plutôt ce point d'égales amplitudes pour $s = 1.55\mu\text{m}$, soit $\omega \approx 120\text{ meV}$.
- pour les mesures de réflectivité, le minimum de séparation entre les pics coïncidait avec une égalité d'amplitude de ces mêmes pics (pour $s \approx 1.55\mu\text{m}$). Pour les mesures de photo-courant, ces deux points s'effectuent pour des dimensions de cavité différentes (la séparation minimale étant plutôt autour de $1.6\mu\text{m}$).

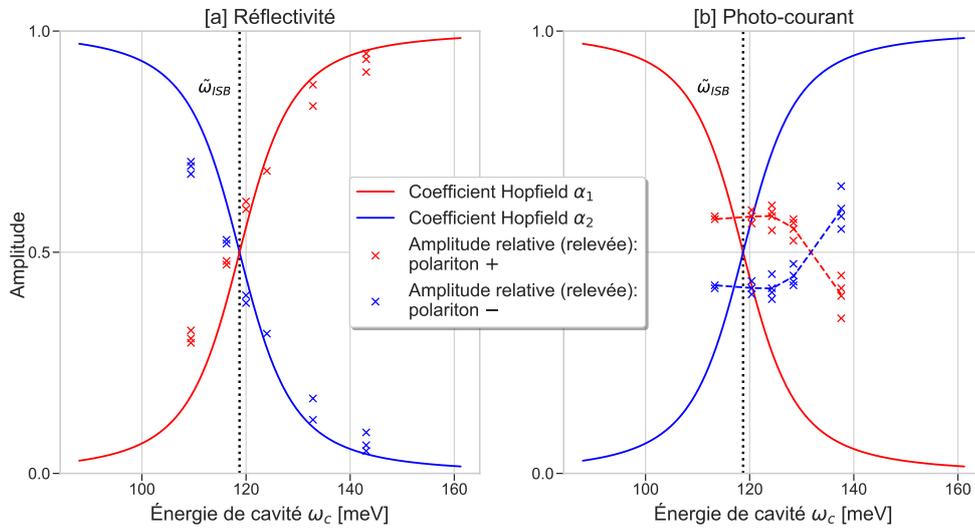


FIGURE 4.11 – Comparaison entre l'amplitude relative des pics polaritoniques (croix, relevées sur les mesures) avec les coefficients d'Hopfield α_1 et α_2 (traits pleins) de l'équation (4.38), en fonction de l'énergie de cavité ω_c calculée à partir des paramètres s , dans le cas [a] des mesures de réflectivité [b] des mesures de photo-courant.

Ces trois points sont illustrés par la figure 4.11, qui compare l'amplitude relative des pics polaritoniques, relevés sur les mesures expérimentales, et les coefficients d'Hopfield calculés grâce aux paramètres de fit du tableau 4.1 et de l'équation (4.38). Dans le cas [a] des mesures de réflectivité, on observe que les amplitudes relatives suivent la dispersion des coefficients d'Hopfield en fonction de la résonance de cavité ω_c . En revanche, dans le cas [b] des mesures de photo-courant, les amplitudes relatives ne suivent pas les coefficients d'Hopfield, et anti-croisent à une énergie nettement supérieure à l'énergie de résonance $\omega_c = \tilde{\omega}_{\text{ISB}}$ correspondant à $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$.

Dans le cas des mesures optiques, les spectres s'interprètent donc correctement en comparant l'amplitude des pics polaritoniques avec les coefficients d'Hopfield α_1 et α_2 : l'amplitude des deux branches est un miroir de la proportion du *mode cavité optique* contenu dans le mode polaritonique. Les amplitudes, tout comme les coefficients d'Hopfield, évoluent

de manière symétrique autour du point d'anticroisement, qui correspond à la fois à une séparation minimale de 2Ω , mais aussi à une égalité des proportions *lumière* et *matière* contenues dans les deux modes.

Dans les cas des mesures de photo-courant, il apparaît clair qu'un raisonnement similaire n'est pas possible : les amplitudes des pics ne suivent pas simplement la proportion du *mode plasmonique* contenue dans les modes polaritoniques, et le spectre présente une nette asymétrie de part et d'autre de l'anticroisement. La relation entre photo-courant et absorption dans le mode plasmonique ISB semble intégrer des éléments plus complexes que cette simple interprétation à partir des coefficients d'Hopfield.

Dans les sections qui suivent, notre objectif est donc de modéliser et de reproduire ces spectres de photo-courant et leur propriétés singulières. Pour cela, nous développerons deux modèles de photo-courant reposant sur deux visions du transport différentes. La capacité de ces modèles à reproduire les données expérimentales nous permettra de les discriminer et par conséquent d'établir un schéma de transport pour l'extraction d'excitations polaritoniques.

4.3.2 Échec du modèle séquentiel du transport électronique

Dans le chapitre 2, nous avons développé un modèle de transport reposant sur une hypothèse importante : l'hypothèse des *sousbandes thermalisées*, cf. section 2.2.1. Sous réserve que les mécanismes *intra*-sousbandes γ_{intra} sont significativement plus rapides que les autres mécanismes de transport électronique *inter*-sousbandes, on peut adopter une vision markovienne et séquentielle du transport dans la cascade électronique du QCD : après un saut inter-sousbande, les électrons se thermalisent au sein de la sousbande d'arrivée avant le prochain saut, en suivant la statistique de Fermi-Dirac. La mémoire du saut précédent est perdue, et les sauts sont indépendants. Sous cette hypothèse, les sousbandes peuvent être assimilées à de simples réservoirs électroniques s'échangeant des électrons, tel que le transport peut être traité de manière perturbative, avec de simples équations bilans sur les populations électroniques. Dans cette vision du transport, le photo-courant \mathcal{J}_E s'écrit comme étant directement proportionnel à l'absorption ISB \mathcal{A}_{ISB} :

$$\mathcal{J}_E(\omega) \propto \underbrace{\mathcal{P}_E}_{\substack{\text{Fonction} \\ \text{de transfert}}} \mathcal{A}_{\text{ISB}}(\omega) \quad (4.64)$$

La fonction de transfert entre le photo-courant et l'absorption ISB est simplement proportionnelle à une fonction scalaire, la probabilité d'extraction \mathcal{P}_E , ce qui implique que \mathcal{J}_E et \mathcal{A}_{ISB} ont la même forme spectrale.

Instinctivement, il nous vient l'idée d'éprouver cette vision séquentielle du transport au régime de couplage fort. Dans les paragraphes qui suivent, on détaille ce qu'impliquerait l'application d'une telle hypothèse dans l'interprétation du transport en régime de couplage fort.

Par définition du couplage fort, les oscillations de Rabi Ω entre le mode ISB plasmonique et le mode de cavité sont plus rapides que les mécanismes décohérents et dissipatifs (γ_{intra} principalement) : on observe deux états polaritoniques aux fréquences ω_{\pm} , dans lesquels on pompe optiquement des excitations. En revanche, dans ce modèle, on suppose que les

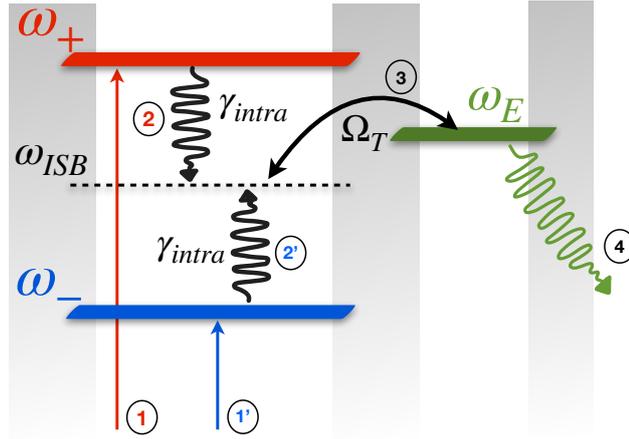


FIGURE 4.12 – Schéma *séquentiel* d'extraction : les excitations polaritoniques, soumises aux effets de décohérence intra-sousbande γ_{intra} , sont projetées dans les états noirs ISB avant d'être extraites dans la cascade électronique.

excitations polaritoniques sont plus rapidement soumises aux effets décohérents de la dynamique intra-sousbande qu'aux mécanismes d'extraction de la dynamique inter-sousbande ($\Omega_T, \gamma_{inter} \ll \gamma_{intra}$). Une telle hypothèse nous permet d'envisager le schéma d'extraction de la figure 4.12 :

1. Par pompage optique, on injecte des excitations dans les états polaritoniques.
2. La dynamique intra-sousbande efface progressivement la nature polaritonique de ces excitations : les polaritons sont projetés dans des états électroniques à un taux γ_{intra} . Une fois dans ces états purement électroniques, il n'est plus possible d'interagir avec le mode de cavité : ces états sont les états noirs décrits précédemment, aveugles à toute interaction lumineuse.
3. Toute propriété polaritonique étant désormais perdue, l'excitation électronique est extraite par interaction tunnel Ω_T avec l'extracteur.
4. L'extraction se poursuit séquentiellement, dans une description similaire à celle du régime de couplage faible.

Dans un tel schéma d'extraction, on s'attend à ce que la puissance électrique mesurée soit une fraction de la puissance absorbée dans le mode ISB. Autrement dit, similairement au régime de couplage faible, on attend une fonction de transfert scalaire entre l'absorption ISB et le photo-courant, et donc des allures spectrales comparables.

$$\mathcal{A}(\omega) = \mathcal{A}_c(\omega) + \mathcal{A}_{ISB}(\omega) \quad (4.65)$$

$$\mathcal{J}_E(\omega) \propto \mathcal{P}_E \mathcal{A}_{ISB}(\omega) \quad (4.66)$$

Concrètement, une telle vision du transport implique que la théorie des modes couplés décrite dans la section 4.2.2 serait suffisante pour décrire le comportement photo-électrique de nos dispositifs. Puisque la fonction de transfert est scalaire, il suffit d'utiliser la composante ISB de l'absorption \mathcal{A}_{ISB} sous sa forme normalisée pour calculer le photo-courant \mathcal{J}_E .

On réalise donc un fit des données de photo-courant normalisées de la figure 4.10-[a] en utilisant le modèle CMT à deux résonateurs développé dans la section 4.2.2, à l'aide des

mêmes paramètres que précédemment ($n_{\text{eff}}, \alpha_c, \gamma_c, \omega_{\text{ISB}}, \gamma_{\text{ISB}}, \omega_P$). Les résultats sont présentés dans la figure 4.13.

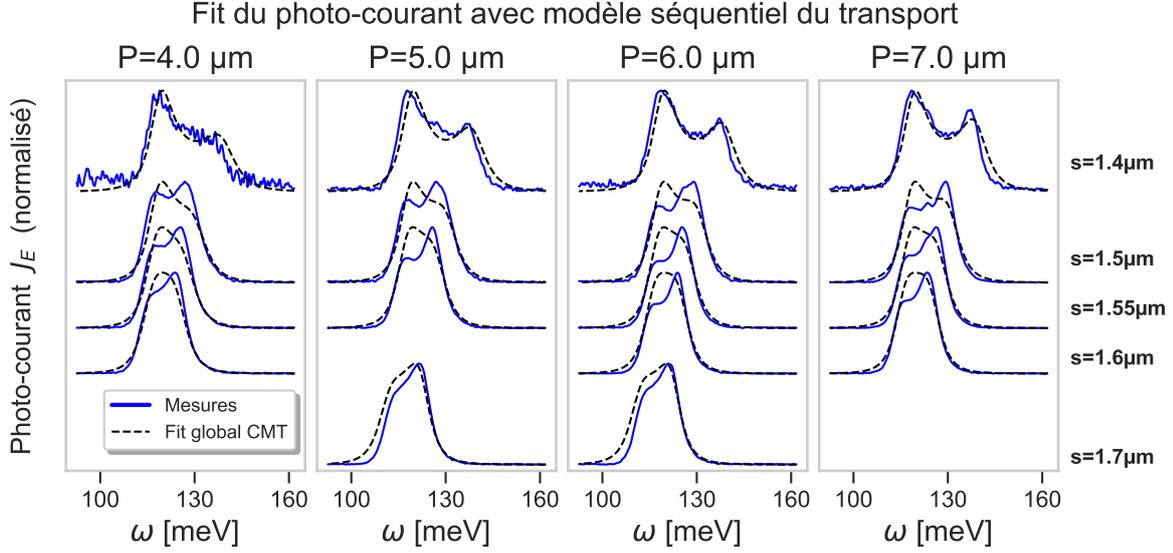


FIGURE 4.13 – Fit des mesures de photo-courant normalisées, via un modèle deux résonateurs de la CMT.

On obtient une mauvaise qualité globale de fit, particulièrement autour de la région d'anti-croisement. Les élargissement spectraux et les positions des pics sont mal reproduits. Les spectres calculés sont également incapables de reproduire l'évolution singulière de l'amplitude relative des pics des branches polaritoniques : pour $s = 1.5, 1.55$ et $1.6 \mu\text{m}$, l'amplitude relative calculée est inversée par rapport à celle observée sur les mesures.

De si mauvais résultats suggèrent que le comportement singulier des spectres de photo-courant ne peut être reproduit par une simple fonction de transfert scalaire, indépendante de la fréquence ω d'excitation, et que le modèle de transport séquentiel doit être adapté au régime de couplage fort. Par ailleurs, ces résultats concordent également avec l'analyse faite Figure 4.11 : si les amplitudes des pics de photo-courant ne suivent pas les proportions *matière* des coefficients d'Hopfield, il est normal que nous n'arrivions à reproduire les spectres en utilisant uniquement l'absorption du mode ISB, \mathcal{A}_{ISB} . Ces résultats nous enseignent donc que la fonction de transfert entre le photo-courant et l'absorption ISB est une fonction non-triviale de ω . De plus, l'échec de ce modèle séquentiel suggère que le schéma d'extraction représenté dans la figure 4.12 n'est pas le mécanisme dominant à l'origine du photo-courant dans les QCDs en régime en couplage fort.

4.3.3 Théorie des modes couplés à trois résonateurs

Suite à l'échec du modèle précédent, on développe dans cette partie un nouveau modèle de photo-courant. L'idée ici est donc d'explorer un second scénario d'extraction, représenté par le schéma de la figure 4.14 :

1. Pompage optique des états polaritoniques.

2. Extraction directe, via des mécanismes d'extraction tunnel, d'amplitudes $\Omega_{T\pm}$, depuis les états polaritoniques vers les états électroniques de la cascade.
3. L'extraction se poursuit séquentiellement, dans une description similaire à celle du régime de couplage faible.

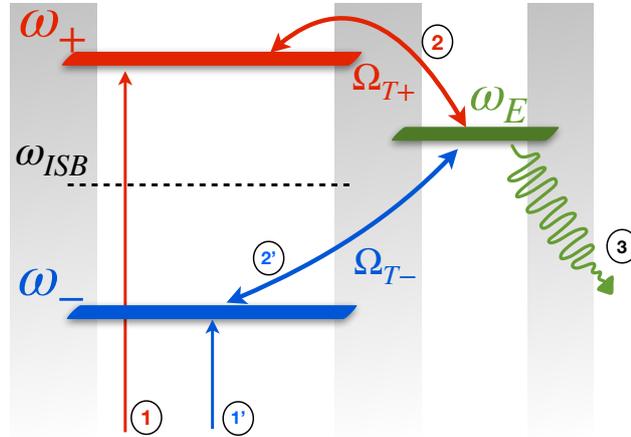


FIGURE 4.14 – Schéma d'extraction *directe* : les excitations polaritoniques sont directement extraites des états polaritoniques vers les états électroniques de la cascade, sans transiter par les états noirs.

Dans ce schéma d'extraction, *les états noirs ne seraient pas impliqués dans l'extraction des excitations polaritoniques*. Dans un premier temps, on va construire le formalisme mathématique qui modélise cette vision du transport. On l'appliquera ensuite aux données expérimentales. En fonction des résultats obtenus, on pourra conclure sur la pertinence du modèle et discuter pourquoi il est représentatif du processus d'extraction représenté dans la figure 4.14.

Système d'équations

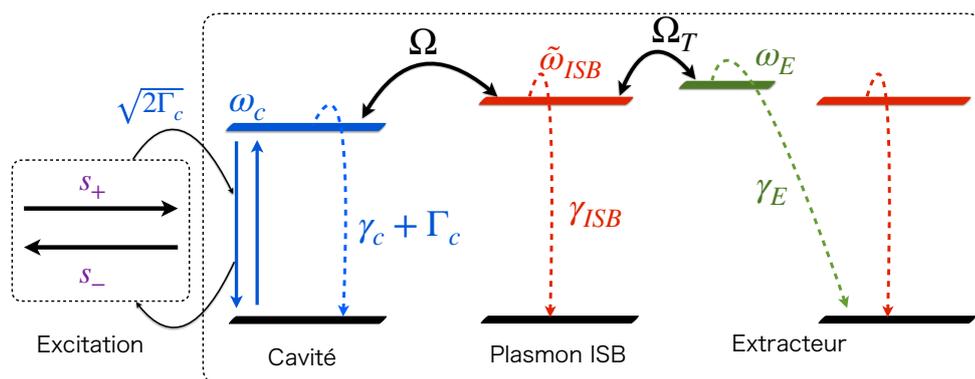


FIGURE 4.15 – Représentation schématique de la théorie des modes couplés à trois résonateurs (ω_c , $\tilde{\omega}_{ISB}$ et ω_E) en interaction avec un port d'excitation.

On étend notre description en théorie des modes couplés à un troisième résonateur, le mode d'extraction, qui agrège les niveaux de la cascade électronique en un unique niveau

extracteur d'énergie propre ω_E (cf. Figure 4.15). Une discussion plus approfondie sur l'utilisation d'un oscillateur pour modéliser l'état extracteur se trouve dans le chapitre 5 de ce manuscrit ; pour le moment, on se contente d'une description phénoménologique du processus d'extraction, sans justifier plus profondément la nature intrinsèquement bosonique de cet oscillateur associé à l'extraction. Ce mode d'extraction est couplé au mode ISB par une constante de couplage tunnel Ω_T , et dissipe des électrons dans la période suivante à un taux d'extraction γ_E . Puisqu'il existe une séparation physique (la barrière), ce mode n'est pas couplé à la lumière d'excitation incidente (i.e. les pertes radiatives sont nulles, $\Gamma_E = 0$). La description matricielle 2×2 de l'équation (4.51) est étendue à une description 3×3 , où l'on introduit l'amplitude a_E du nouveau mode d'extraction :

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \omega_c & \Omega & 0 \\ \Omega & \tilde{\omega}_{\text{ISB}} & \Omega_T \\ 0 & \Omega_T & \omega_E \end{bmatrix}, \quad \gamma + \mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \gamma_c + \Gamma_c & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{\text{ISB}} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_E \end{bmatrix} \quad (4.67)$$

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_c \\ a_{\text{ISB}} \\ a_E \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} \sqrt{2\Gamma_c} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Dans un premier temps, nous allons étudier le système d'équations qui émane de l'ajout de ce nouveau mode d'extraction, ce qui nous permettra de dégager une vision intuitive du fonctionnement de ce nouveau système {cavité + ISB + extracteur}. On commence par étudier les équations d'évolution portant sur les populations de la cavité $n_c = |a_c|^2$, du plasmon ISB $n_{\text{ISB}} = |a_{\text{ISB}}|^2$ et du mode extracteur $n_E = |a_E|^2$. En appliquant les équations (4.68) et (4.50), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{d|a_c|^2}{dt} &= a_c^* \frac{da_c}{dt} + \frac{da_c^*}{dt} a_c \\ &= i\Omega [a_c^* a_{\text{ISB}} - a_{\text{ISB}}^* a_c] - 2(\gamma_c + \Gamma_c) |a_c|^2 + \sqrt{2\Gamma_c} s_+ (a_c e^{i\omega t} + a_c^* e^{-i\omega t}) \end{aligned} \quad (4.68)$$

$$\begin{aligned} \frac{d|a_{\text{ISB}}|^2}{dt} &= a_{\text{ISB}}^* \frac{da_{\text{ISB}}}{dt} + \frac{da_{\text{ISB}}^*}{dt} a_{\text{ISB}} \\ &= i\Omega [a_{\text{ISB}}^* a_c - a_c^* a_{\text{ISB}}] - 2\gamma_{\text{ISB}} |a_{\text{ISB}}|^2 + i\Omega_T [a_{\text{ISB}}^* a_E - a_E^* a_{\text{ISB}}] \end{aligned} \quad (4.69)$$

$$\begin{aligned} \frac{d|a_E|^2}{dt} &= a_E^* \frac{da_E}{dt} + \frac{da_E^*}{dt} a_E \\ &= i\Omega_T [a_E^* a_{\text{ISB}} - a_{\text{ISB}}^* a_E] - 2\gamma_E |a_E|^2 \end{aligned} \quad (4.70)$$

Discutons de l'interprétation physique des différents termes qui composent nos équations d'évolution de populations :

- $2(\gamma_c + \Gamma_c) |a_c|^2$, $2\gamma_{\text{ISB}} |a_{\text{ISB}}|^2$ et $2\gamma_E |a_E|^2$ décrivent les termes de courants *dissipatifs*, par les mécanismes non-radiatifs (γ) et radiatifs (Γ). Ce sont des termes qui impliquent explicitement les populations des modes concernés. Ils sont non-conservatifs, c'est-à-dire que la population dissipée par un mode n'est pas ré-injectée dans un autre mode du système, mais perdue dans l'environnement extérieur.
- $i\Omega [a_c^* a_{\text{ISB}} - a_{\text{ISB}}^* a_c]$ décrit le courant *cohérent* entre le mode de cavité et le mode ISB. Ce terme n'implique pas explicitement les populations des modes concernés, mais seulement le produit croisé de leur amplitude. Cette forme est tout à fait similaire aux expressions du courant en mécanique quantique, où le courant s'exprime à partir

des cohérences entre deux modes [83, 84] :

$$\mathcal{J}_{01} = i(\Omega\rho_{01} - \Omega^*\rho_{10}) \quad (4.71)$$

où ρ_{10} et ρ_{01} sont les termes non-diagonaux de la matrice densité ρ , nommés cohérences. Cette analogie nous permet de comprendre intuitivement que les termes croisés $a_i a_j^*$ qui apparaissent dans les expressions du courant, sont l'équivalent semi-classique des cohérences de la mécanique quantique, et sont à l'origine de courants cohérents entre nos différents modes. C'est l'amortissement de ces cohérences, par exemple via les effets de la dynamique intra-sousbande (γ_{intra}) et de la dissipation ($\gamma_c, \gamma_{\text{ISB}}\dots$) qui limitent les oscillations de Rabi entre les modes couplés.

- $i\Omega_T [a_{\text{ISB}}^* a_E - a_E^* a_{\text{ISB}}]$ est le terme de courant tunnel cohérent \mathcal{J}_T entre le mode plasmonique ISB et le mode extracteur. C'est ce courant en particulier qui nous intéresse, puisque c'est celui-ci qui conditionne l'extraction résonnante depuis les états polaritoniques vers la cascade électronique.

Expression du courant tunnel \mathcal{J}_T

Nous sommes intéressés par une expression plus explicite du courant tunnel \mathcal{J}_T entre le mode plasmonique ISB et le mode extracteur. Pour l'instant, \mathcal{J}_T ne fait intervenir que les cohérences entre les deux modes ($a_{\text{ISB}} a_E^*$) : on aimerait faire apparaître explicitement les populations des modes. Pour cela, on écrit l'équation d'évolution suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d(a_{\text{ISB}} a_E^*)}{dt} &= a_{\text{ISB}} \frac{da_E^*}{dt} + \frac{da_{\text{ISB}}}{dt} a_E^* \\ &= -ia_{\text{ISB}} a_E^* [(\omega_E - \tilde{\omega}_{\text{ISB}}) - i(\gamma_E + \gamma_{\text{ISB}})] + i\Omega_T (n_E - n_{\text{ISB}}) + i\Omega a_E^* a_c \end{aligned} \quad (4.72)$$

En régime harmonique forcé (excitation incidente de la forme $s_+ e^{i\omega t}$), on s'attend à ce que les amplitudes $a_E(t)$ et $a_{\text{ISB}}(t)$ soient de la forme $\propto e^{i\omega t}$ où ω est la fréquence de l'onde incidente. Par conséquent, en se plaçant dans ce régime, on peut simplifier l'expression suivante :

$$\frac{d(a_{\text{ISB}} a_E^*)}{dt} = a_{\text{ISB}} \frac{da_E^*}{dt} + \frac{da_{\text{ISB}}}{dt} a_E^* = 0 \quad (4.73)$$

On passe alors dans le domaine fréquentiel : $a_i(t) \rightarrow \tilde{a}_i(\omega)$. Par souci de lisibilité, on s'affranchira des lourdeurs de notation ($\tilde{a}_i(\omega) \rightarrow a_i$). Les amplitudes croisées fréquentielles $a_{\text{ISB}} a_E^*$ s'écrivent alors :

$$\tilde{a}_{\text{ISB}}(\omega) \tilde{a}_E^*(\omega) = a_{\text{ISB}} a_E^* = \frac{\Omega_T (n_{\text{ISB}} - n_E) - \Omega a_c a_E^*}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_E) + i(\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_E)} \quad (4.74)$$

À partir de l'équation (4.74), on va pouvoir exprimer le courant tunnel \mathcal{J}_T entre le mode ISB et l'extracteur :

$$\mathcal{J}_T = i\Omega_T [a_E^* a_{\text{ISB}} - a_{\text{ISB}}^* a_E] \quad (4.75)$$

$$= 2\Omega_T \Re[ia_E^* a_{\text{ISB}}] \quad (4.76)$$

où \Re désigne la partie réelle. Après quelques manipulations :

$$\mathcal{J}_T = \frac{2\Omega_T^2 (\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_E)}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_E)^2 + (\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_E)^2} (n_{\text{ISB}} - n_E) + \Re \left[\frac{2i\Omega_T \Omega}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_E) - i(\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_E)} a_c a_E^* \right] \quad (4.77)$$

L'expression précédente est particulièrement intéressante, car elle fait intervenir deux termes distincts :

- Le premier terme, en rouge, *est exactement l'expression du courant tunnel séquentiel* (au premier ordre) qui avait été présentée dans le chapitre 2, Eq. (2.29). C'est ce terme qu'on trouve dans la littérature pour décrire le transport tunnel séquentiel (son expression au second ordre) [83, 84], et, faisant intervenir les populations des deux modes (ISB et extracteur), permet de le séparer en deux termes de courants contra-propageants. Nous désignerons donc ce terme par *courant tunnel séquentiel*.
- Le second terme, en bleu, est une nouvelle addition dans l'expression du courant tunnel. Il fait intervenir les amplitudes croisées a_c et a_E^* , c'est-à-dire les cohérences entre les modes cavité et extracteur, qu'on pourrait qualifier de cohérences *longues portées* (ces deux modes ne sont pas directement couplés, mais seulement par l'intermédiaire du mode ISB). De manière similaire au courant tunnel séquentiel, l'amplitude de ce second terme est gouvernée par une lorentzienne, et fait intervenir le produit des deux couplages : Ω_T et Ω . Nous désignerons ce terme par *courant délocalisé*.

Par conséquent, la théorie des modes couplés à trois résonateurs fait apparaître un terme de courant supplémentaire par rapport à la formulation du courant tunnel dans un modèle séquentiel du transport. Le couplage cohérent successif entre ces trois modes permet de modéliser un courant tunnel délocalisé, dont l'amplitude est renforcée à la fois par l'intensité du couplage lumière-matière Ω , mais aussi du couplage tunnel Ω_T . Dans la section suivante, on va comprendre l'influence de ce terme sur les propriétés photo-électriques de nos QCDs.

Absorption, photo-courant et fonction de transfert

De nouveau, l'absorption totale du système \mathcal{A} est la somme des puissances dissipées dans les différents canaux de dissipation non-radiatifs, normalisées par la puissance incidente $|s_+|^2$:

$$\mathcal{A}_{\text{TOT}} = \mathcal{A}_c + \mathcal{A}_{\text{ISB}} + \mathcal{A}_E \quad (4.78)$$

$$= 2\gamma_c \frac{|a_c|^2}{|s_+|^2} + 2\gamma_{\text{ISB}} \frac{|a_{\text{ISB}}|^2}{|s_+|^2} + 2\gamma_E \frac{|a_E|^2}{|s_+|^2} \quad (4.79)$$

Le photo-courant net \mathcal{J}_E est défini comme le courant électrique sous illumination, retranché de la contribution sous obscurité $\mathcal{J}_{\text{Dark}}$. Les mesures étant réalisées à tension appliquée nulle, $\mathcal{J}_{\text{Dark}} = 0$ et le photo-courant s'exprime uniquement à partir de la puissance électrique dissipée dans la période adjacente, qui est exactement la puissance dissipée par notre mode extracteur :

$$\mathcal{J}_E = 2\gamma_E |a_E|^2 \quad (4.80)$$

On vérifie numériquement que le courant tunnel \mathcal{J}_T développé précédemment, entre le mode ISB et le mode extracteur, est exactement égal au photo-courant : $\mathcal{J}_E = \mathcal{J}_T$. Le courant dans la structure est bien indépendant de l'interface sélectionnée pour l'évaluer. Dans cette formulation de la CMT, la fonction de transfert entre l'énergie totale dissipée dans le QCD et le photo-courant n'est plus une fonction indépendante de la fréquence ω . Désormais, elle s'exprime de la manière suivante :

$$\text{TF}(\omega) = \frac{\mathcal{A}_E}{\mathcal{A}_E + \mathcal{A}_{\text{ISB}}} \quad (4.81)$$

qui, après quelques calculs, donne :

$$\boxed{\text{TF}(\omega) = \frac{\gamma_E}{\gamma_{\text{ISB}}} \frac{\Omega_T^2}{(\omega - \omega_E)^2 + \gamma_E^2 + \frac{\gamma_E}{\gamma_{\text{ISB}}} \Omega_T^2}} \quad (4.82)$$

La fonction de transfert $\text{TF}(\omega)$ est donc une fonction lorentzienne, centrée en ω_E , dont l'élargissement dépend de l'intensité du couplage tunnel et des élargissements γ_{ISB} et γ_E . Il est important de comprendre dès à présent que, dans ce formalisme, la dépendance en fréquence de la fonction de transfert est une *conséquence directe du terme de courant délocalisé* présent dans l'expression du courant tunnel \mathcal{J}_T Eq. (4.77). En l'absence de ce terme, le transport redevient séquentiel, comme en couplage faible, et la fonction de transfert redevient indépendante de la fréquence. Des fonctions de transfert dépendantes de la fréquence ω ont été déjà proposées dans le cadre d'exploitation de mesures d'électroluminescence [32] (fonction de transfert gaussienne) et mesures de photo-courant [63] : en revanche, elles ont été introduites de manière phénoménologique. Ici, notre fonction de transfert TF émane directement d'une description en théorie des modes couplés et de la paramétrisation de notre modèle de transport.

Si l'introduction d'un troisième résonateur semble induire des modifications profondes sur le transport au sein de la structure, il nous faut d'abord confronter notre modèle à des données expérimentales avant d'en tirer toute interprétation.

Application aux données expérimentales

Dans la suite, nous allons éprouver ce nouveau modèle à nos données expérimentales de photo-courant. On réalise un fit global du photo-courant, à partir de la résolution de l'équation (4.50) et de l'expression du photo-courant (4.80), avec pour paramètres de fit $n_{\text{eff}}, \gamma_c, \alpha_c, \omega_{\text{ISB}}, \gamma_{\text{ISB}}, \omega_P, \omega_E, \gamma_E, \Omega_T$. Les résultats du fit sont représentés sur la figure 4.16 en traits pointillés, et les paramètres associés sont regroupés dans le tableau 4.2-**b**. Les erreurs de fits sur ces paramètres sont propagées sur les spectres et représentées par les zones grisées¹⁰.

Pour tous les couples (p, s) mesurés, on obtient un accord quantitatif entre les calculs et les mesures. Contrairement au modèle séquentiel, on est désormais capable de reproduire la position des pics et l'étalement des spectres. Plus important encore, l'évolution de l'amplitude relative des pics est bien reproduite, tout le long de la dispersion avec s . Les paramètres de fit sont également cohérents avec les résultats du fit de réflectivité. Les faibles variations que l'on observe sont imputables aux différences de conditions expérimentales : $T = 78\text{K}$ pour le photo-courant, et $T = 300\text{K}$ pour la réflectivité (donc plus petites valeurs pour les pertes radiatives γ_c et γ_{ISB} dans le cas du photo-courant), et différents procédés de fabrication entre les deux expériences (les réseaux de patchs utilisés en photo-courant sont reliés par des fils). On estime la position du mode extracteur autour de 125 meV, ce qui est cohérent avec l'alignement relatif des niveaux calculés (cf. figure 4.5-[b]). La valeur du

10. L'évolution des marges d'erreurs (les zones grisées) avec le paramètre s est une conséquence de la normalisation des spectres : les erreurs sont approximativement de mêmes amplitudes absolues. En revanche l'amplitude absolue des spectres diminue lorsque s diminue : mécaniquement, l'amplitude des erreurs normalisées est plus grande.

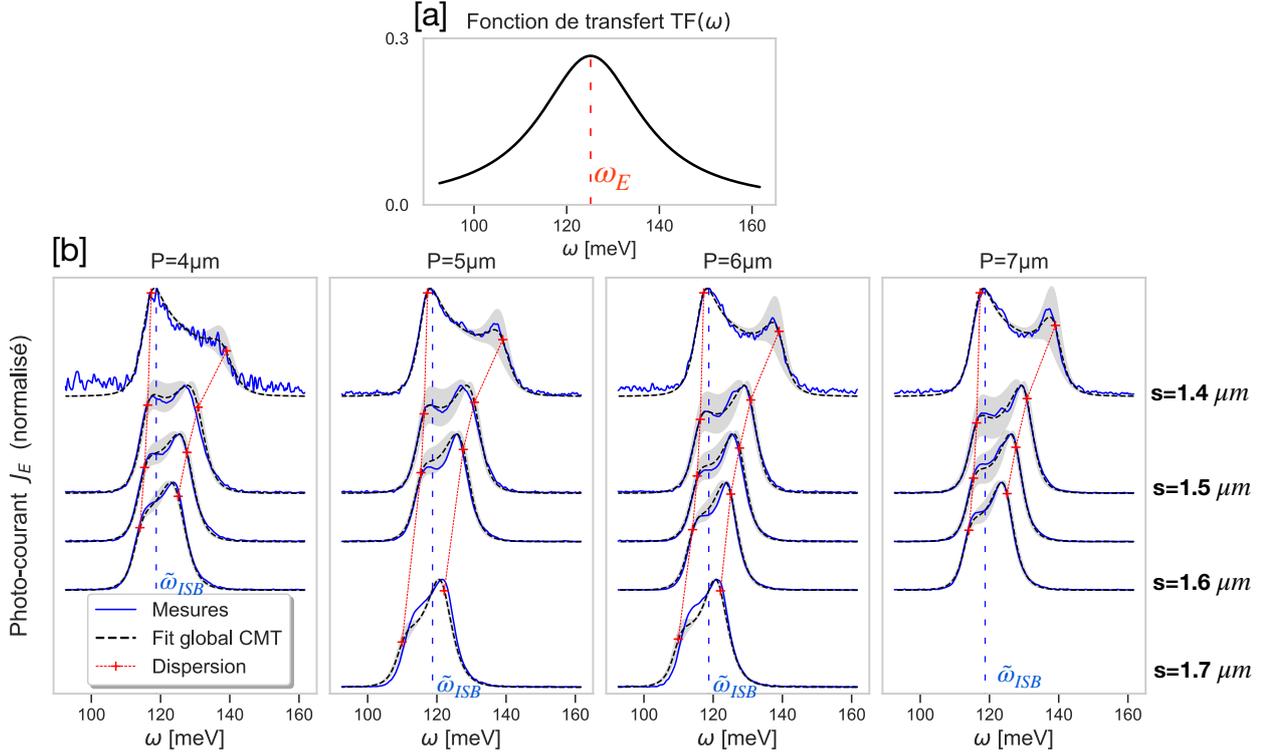


FIGURE 4.16 – [a] Fonction de transfert $TF(\omega)$ entre l’absorption du QCD $\mathcal{A}_E + \mathcal{A}_{ISB}$ et l’absorption dans l’extracteur \mathcal{A}_E (le photo-courant). TF est indépendant des paramètres s et p . [b] Spectres de photo-courants expérimentaux (traits pleins, $T = 78K$) et calculés via un fit global à l’aide d’un formalisme CMT à trois résonateurs (traits pointillés), pour différents couples (s, p) . La dispersion des modes polaritoniques, calculée à partir des paramètres de fit et de l’Hamiltonien 2×2 d’interaction lumière-matière, est superposée aux courbes. On indique également la position du mode plasmonique $\tilde{\omega}_{ISB}$. Les zones grisées correspondent à la propagation sur les spectres des erreurs des paramètres retournés par la procédure de fit (voir Annexe [E] pour le calcul détaillé des erreurs).

couplage tunnel $\Omega_T = 3.7$ meV correspond également à la valeur calculée en base localisée. On reviendra plus tard sur la valeur du taux d’extraction $\gamma_E = 11$ meV, particulièrement élevée, lorsqu’on abordera les limites de la théorie des modes couplés.

Interprétation des résultats en terme de schéma d’extraction

Pour bien interpréter les accords quantitatifs obtenus par ce nouveau modèle, il nous faut d’abord comprendre les différences fondamentales qui opposent la théorie des modes couplés à trois résonateurs et le modèle séquentiel de transport.

La théorie des modes couplés est un formalisme *semi-classique* : de l’interaction du système avec son environnement, il ne décrit que les mécanismes *dissipatifs*, c’est-à-dire les mécanismes qui dissipent les populations des modes $|a_i|^2$ (qui dissipent de la puissance vers l’extérieur du système). Ces mécanismes, mécaniquement, amortissent également les cohérences $a_i a_j^*$ entre ces modes : il n’y a pas de dissipation sans décohérence [122]. À

	a. Fit réflectivité ($T = 300\text{K}$)	b. Fit photo-courant ($T = 78\text{K}$)
n_{eff}	3.333 ± 0.001	3.219 ± 0.001
γ_c (meV)	3.5 ± 0.01	3.4 ± 0.01
α_c (meV. μm^2)	38.6 ± 0.1	29.1 ± 1.2
ω_{ISB} (meV)	115.0 ± 0.1	115.1 ± 0.1
γ_{ISB} (meV)	5.2 ± 0.1	3.3 ± 0.1
ω_P (meV)	25.6 ± 0.1	29.2 ± 0.1
ω_E (meV)	-	125.2 ± 0.1
γ_E (meV)	-	11.5 ± 0.1
Ω_T (meV)	-	3.7 ± 0.1

TABLE 4.2 – Paramètres retournés par les fits CMT : **(a)** spectres de réflectivité, $n_{2\text{D}} = 5 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $T = 300$ K. Fit avec le modèle deux résonateurs, cf. Figure 4.8 **(b)** spectres de photo-courant, $n_{2\text{D}} = 5 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$, $T = 78$ K. Fit avec le modèle trois résonateurs, cf. Figure 4.16.

l'inverse, ce formalisme est incapable de décrire les mécanismes de pure *décohérence*, c'est-à-dire les mécanismes qui dissipent uniquement les cohérences, sans affecter les populations. En particulier dans notre système, la CMT est incapable de décrire les effets de la dynamique intra-sousbande γ_{intra} , qui n'affecte pas les populations des différentes sousbandes, mais qui efface progressivement les cohérences entre elles, via le processus de thermalisation. En d'autres termes, la CMT fait l'hypothèse sous-jacente que la dynamique intra-sousbande est nettement moins rapide que les mécanismes de transport ISB entre les modes couplés, et en particulier ici, que $\gamma_{\text{intra}} \ll \Omega_T$. C'est l'hypothèse inverse de celle du modèle séquentiel abordé dans Section 4.3.2.

La conséquence de cette hypothèse se matérialise par une modification du courant tunnel \mathcal{J}_T , détaillée Section 4.3.3. À une composante séquentielle, habituellement décrite dans le transport en couplage faible, s'ajoute une composante *délocalisée* du courant, qui repose sur des cohérences de *longues portées*, $a_c a_E^*$, entre le mode de cavité et le mode extracteur. Par comparaison, dans un système dominé par la dynamique intra-sousbande, ces cohérences seraient très rapidement amorties, et le courant tunnel serait restreint à l'habituelle composante séquentielle entre le mode ISB et l'extracteur. La CMT trois résonateurs modélise donc des courants cohérents et délocalisés, traditionnellement absent des modèles de transport.

La capacité de la théorie des modes couplés à trois résonateurs à reproduire les données expérimentales suggère donc que cette composante *délocalisée* du courant tunnel est nécessaire pour modéliser les données expérimentales de photo-courant, et donc contribue effectivement d'une manière non-négligeable aux spectres mesurés. La mémoire de la nature *photonique* des excitations est donc conservée lors de l'extraction.

Ce raisonnement se transpose dans la base polaritonique : la mémoire de la nature polaritonique des excitations est conservée lors de l'extraction vers la cascade. Il apparaît donc que *la plupart des excitations polaritoniques sont directement extraites depuis les états polaritoniques, sans transiter par les états noirs* et confirme donc le schéma d'extraction de la figure 4.14.

Ces affirmations sont à pondérer par la simplicité de ce modèle de transport semi-

classique. La limite principale du modèle se trouve en effet dans son incapacité à inclure explicitement les termes de décohérence γ_{intra} , et donc à pouvoir explorer continûment les rapports d'amplitudes $\Omega/\gamma_{\text{intra}}$ et $\Omega_T/\gamma_{\text{intra}}$. Il faut en effet insister sur le caractère asymptotique des deux modèles (séquentiel CMT deux résonateurs, et délocalisé CMT trois résonateurs) présentés dans les sections 4.2.2 et section 4.3.3, qui ne sont que des cas limites de la dynamique intra-sousbande.

L'impossibilité de modéliser les termes intra-sousbandes γ_{intra} engendre également une confusion sur l'interprétation physique des termes de dissipation non-radiative γ_{ISB} et γ_E , ignorée jusque ici. Pour illustration, prenons la valeur du taux d'extraction $\gamma_E = 11.5$ meV retournée par le fit de la CMT trois résonateurs (cf. Tableau 4.2). Cette valeur est anormalement élevée pour un taux de transition inter-sousbande : en l'occurrence, les taux $\Gamma_{A2 \rightarrow A3}$ et $\Gamma_{A3 \rightarrow A4}$ d'extraction (cf. Figure 4.5), calculés avec notre modèle séquentiel de transport, sont environ un ordre de grandeur inférieurs et de l'ordre du meV. La valeur de γ_E s'apparente plus à l'ordre de grandeur des mécanismes intra-sousbandes. En effet, puisque la CMT ne modélise que les phénomènes dissipatifs, *elle est incapable de distinguer élargissements et amplitude de transport*. L'intégralité des effets de décohérence étant nécessairement imputée aux mécanismes de dissipation, la valeur de γ_E en est mécaniquement augmentée. Mathématiquement, on aimerait donc pouvoir piloter l'amplitude de la fonction de transfert $\text{TF}(\omega)$ indépendamment de son élargissement, ce qui n'est pas possible dans le formalisme de la CMT.

Tout l'enjeu désormais est donc d'introduire un nouveau formalisme, qui serait capable d'inclure explicitement la dynamique intra-sousbande dans le modèle de transport, ce qui permettrait d'explorer plus largement les effets de la décohérence sur le transport. En particulier, en ajustant γ_{intra} , on s'attend à passer continûment d'un modèle séquentiel à modèle de transport délocalisé, ce qui nous permettrait d'affiner et de nuancer la discussion précédente sur les différents scénarios d'extraction des excitations polaritoniques. C'est l'objectif du chapitre 5.

Dans la suite de ce chapitre, nous répondrons d'abord à la seconde problématique énoncée dans le chapitre 1, section 1.5.3 : est-il possible d'obtenir un gain sur l'énergie d'activation dans des dispositifs en régime de couplage fort ?

4.4 Influence du dopage sur le courant d'obscurité

Pour répondre à cette seconde problématique, on se tourne vers l'étude du courant d'obscurité de structures conçues pour fonctionner en couplage fort. Si le fonctionnement sous illumination de ces dispositifs nécessite une adaptation du modèle de transport, on s'attend à ce que le fonctionnement sous obscurité suive le modèle séquentiel du transport décrit dans le chapitre 2. L'objectif de cette partie est donc d'étudier l'influence du dopage sur des mesures de courant d'obscurité $\mathcal{J}_{\text{dark}}$ sous tension appliquée et de les calculer dans le cadre du modèle séquentiel.

4.4.1 Mesures de courants d'obscurité

Dans la suite, on va étudier trois structures différentes, et pour chaque structure, on étudiera deux situations de dopage : une situation faible dopage ($n_{2D} \approx 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) et une situation fort dopage ($n_{2D} \approx 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Les structures de bande des trois dispositifs (répétitions de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As} / \text{Al}_{0.52}\text{In}_{0.48}\text{As}$ sur InP) sont représentées figure 4.17 (pour $T = 78\text{K}$ et à l'équilibre thermodynamique), et nommées [A], [B] et [C]. Dans la suite, les épaisseurs données en gras correspondent à des puits d'InGaAs, en texte normal, les barrières d'AlInAs, et en soulignées, les couches dopées. Toutes les structures sont prévues pour une détection autour de $\lambda = 8\mu\text{m}$.

- Structures [A] : 90/45/**33**/39/**39**/34/**47**/36 (Å), épitaxiées au III-Vlab. La structure de bande est conçue pour que le niveau de Fermi de la structure fortement dopée à $n_{2D} = 1.35 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ soit légèrement en dessous du dernier niveau de la cascade électronique.
- Structures [B] : 87/35/**31**/33/**36**/28/**43**/25 (Å), épitaxiées à l'université de Leeds. La structure [B] diffère de la structure [A] par des épaisseurs de barrière plus larges, et par un niveau de Fermi ($n_{2D} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) situé à environ un phonon $\omega_{LO} = 33 \text{ meV}$ du dernier niveau de la cascade.
- Structures [C] : 87/35/**31**/33/**36**/28/**43**/25/**54**/25 (Å). La structure [C] est similaire à la structure [B] pour les 4 premiers puits, mais un puits supplémentaire a été ajouté, pour que cette fois le niveau de Fermi de la structure fortement dopée soit juste en dessous du dernier niveau de la cascade.

Toutes les structures sont réalisées dans une optique de robustesse, sans particularité de conception. La conception respecte les règles classiques d'alignement de niveaux, énoncées dans le chapitre 3 : espacement LO dans la cascade, quasi-résonance entre niveau excité du puits optique et premier niveau extracteur.

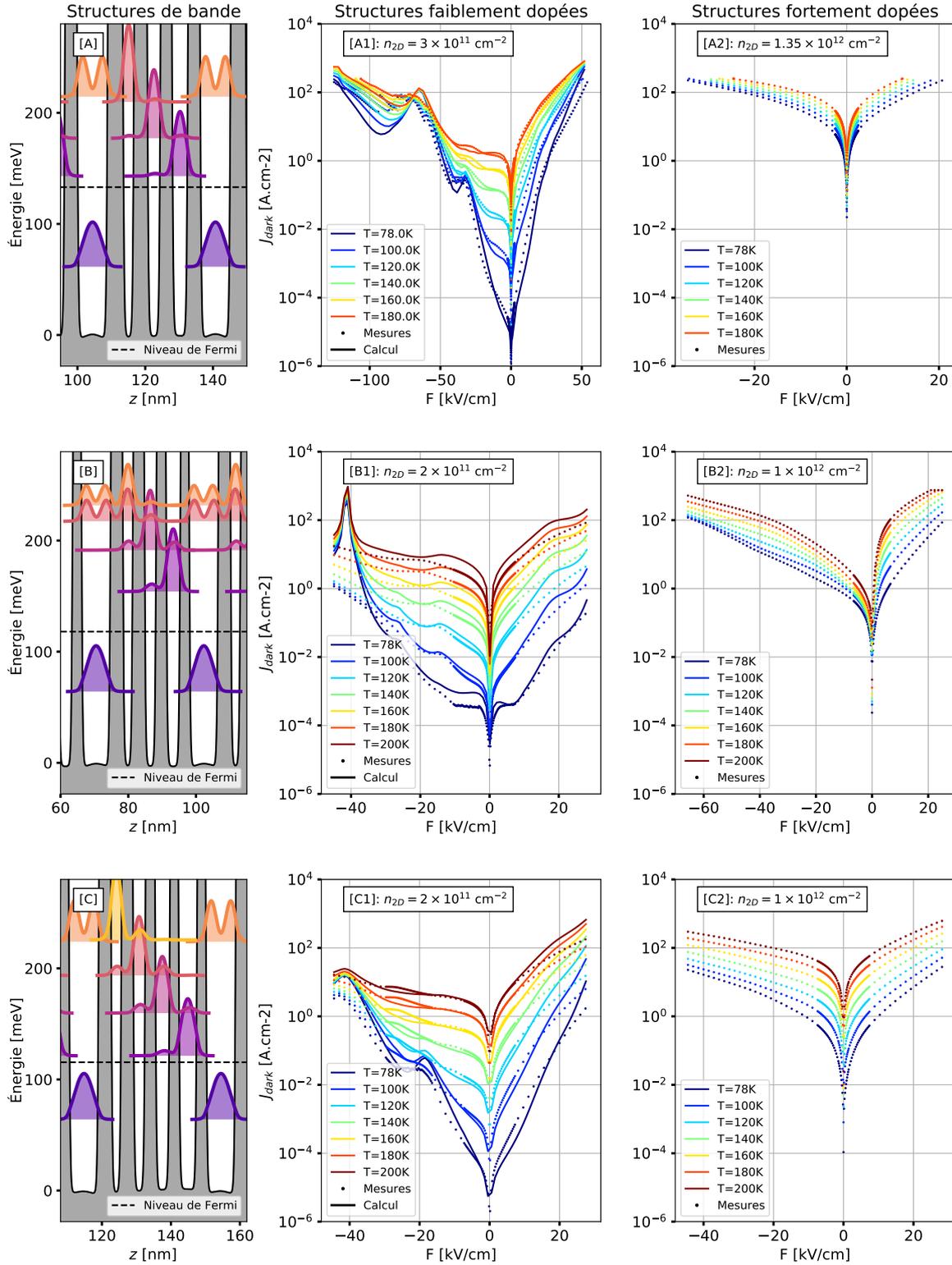


FIGURE 4.17 – Caractérisation du courant d’obscurité pour trois structures de bande [A], [B] et [C] (une ligne correspond à une structure), et deux situations de dopages 1 (dopage modéré, colonne centrale) et 2 (dopage élevé, colonne de droite). Les données expérimentales (traits pointillés) sont superposées aux calculs (traits pleins). Les structures de bandes sont calculées à $T = 78\text{K}$, pour les structures fortement dopées. Les calculs sont menés avec les paramètres nominaux d’épitaxie.

Une campagne de caractérisation du courant d’obscurité a été menée sur ces six structures¹¹, sur une large gamme de tension, de températures, et pour plusieurs surfaces de dispositifs (on vérifie que les densités de courant sont indépendantes de la surface du dispositif). Les résultats de cette campagne de caractérisation sont donnés dans la figure 4.17. La colonne 1 ([A1], [B1] et [C1]) correspond aux courants d’obscurité des dispositifs peu dopés, la colonne 2 ([A2], [B2] et [C2]) aux dispositifs fortement dopés. Quelques observations générales :

- Les niveaux de densité de courant sont plus élevés dans le cas des forts dopages.
- Les courants d’obscurité pour les structures faiblement dopées sont nettement plus asymétriques que leurs homologues fortement dopés. De manière générale, les tendances d’évolution des courbes en fonction du champ, d’un dopage à l’autre, sont extrêmement différentes. L’ajout de dopage ne se traduit donc pas par une simple translation des courbes de courant vers une plus forte amplitude, en conservant les tendances d’évolution, mais une modification profonde de ces tendances, plus lisses et plus symétriques. En l’occurrence, une telle symétrie des courbes [A2] et [C2] pourrait suggérer des courants de fuite, par exemple sur les flancs des dispositifs. Cette hypothèse est réfutée par la bonne superposition des courbes de courant surfacique pour plusieurs dimensions de dispositifs.
- Les courbes des dispositifs fortement dopés ne présentent aucune signature caractéristique de régime de résistance différentielle négative et d’anticroisements entre fonctions d’ondes¹². Par exemple, là où [C1] présente clairement deux anticroisements (pour $F \approx -20$ et $F \approx -40$ kV.cm⁻¹), [C2] est d’allure complètement lisse. Pour [B1], à $T = 78$ K et dans la plage de champ $F = [-10 : 0]$ kV.cm⁻¹, on trouve un régime de résistance différentielle négative en “dents de scie” (le courant présente une forme dentelée) [123, 124]. Cette caractéristique est absente pour les courbes à fort dopage [B2].

11. Remerciements à Mathieu Jeannin du C2N pour la fabrication des structures *mesas* et de leurs mesures.

12. Attention : si les échelles des ordonnées sont effectivement alignées, les gammes de tension explorées en abscisses sont différentes d’un échantillon à l’autre.

4.4.2 Résultats de simulations pour le courant d'obscurité

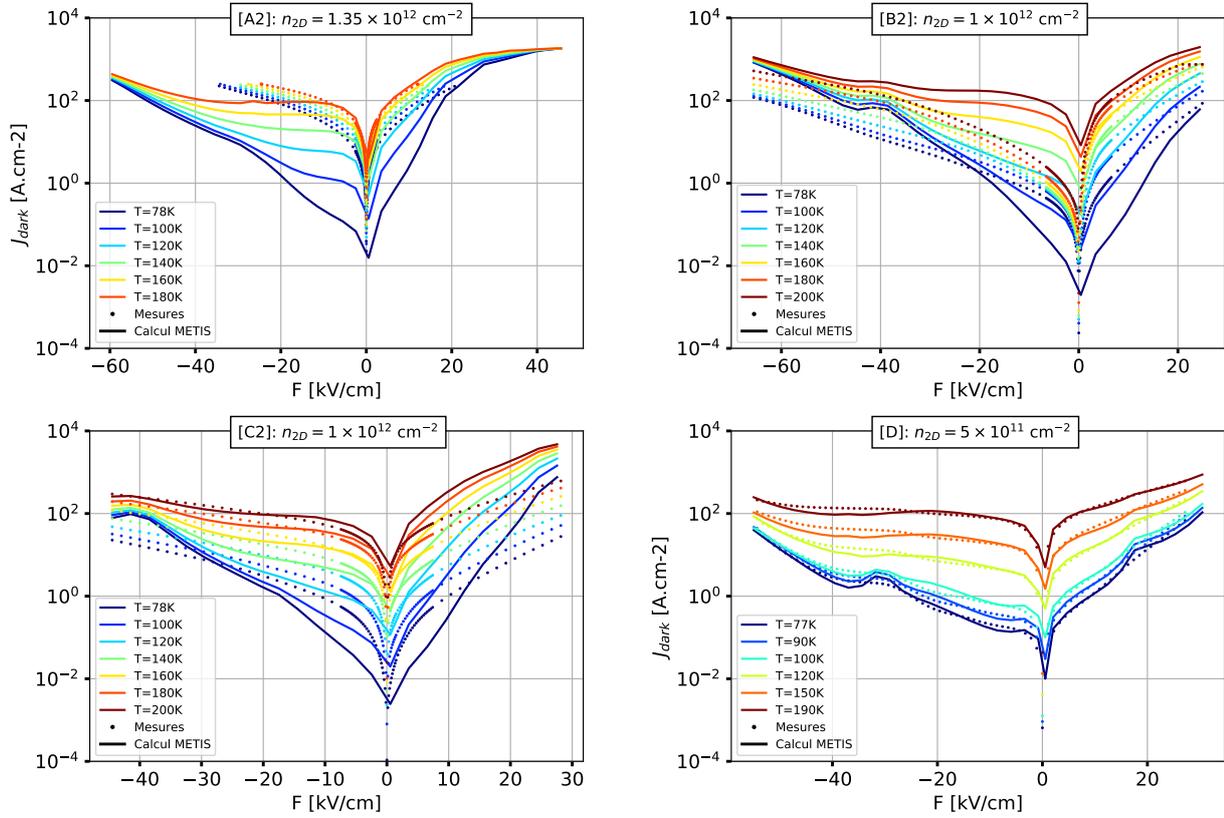


FIGURE 4.18 – Courant d’obscurité $\mathcal{J}_{\text{dark}}$ mesuré (points) et calculé (traits pleins) pour 4 structures différentes, toutes susceptibles de susciter un régime de couplage fort. La structure de bande associée aux mesures de [D] se trouve en figure 4.5-[b]. À noter que cette structure [D] est un QCD $\lambda = 10 \mu\text{m}$, tandis que les QCDs [A2], [B2] et [C2] sont des QCDs $\lambda = 8 \mu\text{m}$: cela explique que, malgré un plus faible niveau de dopage, le courant d’obscurité de [D] est à des niveaux comparables aux autres structures. Les calculs sont menés avec les paramètres nominaux de l’épitaxie.

Au jeu de six structures présentées précédemment, on ajoute également la structure utilisée dans les mesures optiques et de photo-courant présentées dans les sections 4.2.2 et 4.3, qu’on nommera [D] (on rappelle que ce QCD est conçu pour une détection autour de $10 \mu\text{m}$, cf. figure 4.5-[b] pour la structure de bande). Pour toutes ces structures, on utilise notre modèle séquentiel de transport sous obscurité pour calculer les densités de courant surfacique $\mathcal{J}_{\text{dark}}$. On commence par comparer les structures conçues pour un fonctionnement à $\lambda = 8 \mu\text{m}$.

Les résultats pour les **structures faiblement dopées** [A1], [B1] et [C1] sont présentés dans la figure 4.17 et superposés aux mesures. Pour les trois structures, on obtient des accords quantitatifs, sur une large gamme de champs électriques appliqués F et pour toute la gamme de température considérée (de 78K à 200K). En particulier, les épaulements, signatures caractéristiques des anticroisements entre fonctions d’ondes à l’origine d’un courant

tunnel exacerbé, sont bien représentés. On notera qu’aucun paramètre n’a été ajusté pour obtenir ces courbes : on a directement injecté les épaisseurs et les dopages nominaux utilisés pour l’épitaixie de ces plaques. Une différence notable s’observe cependant pour [B1], où le calcul prédit de forts pics dans le courant autour de $F = -40 \text{ kV.cm}^{-1}$. Ces pics sont la conséquence du choix de la base de représentation des fonctions d’onde dans le calcul, à savoir, la base délocalisée (cf. chapitre 2). Dans une telle base, les fonctions d’ondes résonnantes (ici, pour $F = -40 \text{ kV.cm}^{-1}$, le niveau fondamental du puits optique et le dernier niveau de la cascade) se délocalisent dans les deux puits concernés et provoquent des courts-circuits électriques, qui se manifestent par des pics dans le courant d’obscurité. Bien que ce choix de base soit manifestement mauvais pour reproduire les courbes expérimentales autour de $F = -40 \text{ kV.cm}^{-1}$, la base délocalisée est tout de même utilisée car elle donne de bons résultats sur le reste de la gamme de tension. On pourrait imaginer une concaténation de résultats calculés dans les deux bases pour une meilleure représentation du courant d’obscurité sur l’intégralité de la gamme de tension.

Les résultats pour les **structures fortement dopées** [A2], [B2] et [C2] sont présentés dans la figure 4.18 et superposés aux mesures. Malgré un ajustement sur le dopage, l’étalement des interfaces, et les largeurs de puits (les calculs présentés sont menés avec les paramètres nominaux de l’épitaixie), le modèle séquentiel est incapable de reproduire correctement les courbes de courant. Si certaines plages de tension/température semblent approximativement reproduites, notamment à haute température, les calculs sont majoritairement éloignés des données expérimentales : différences de un à plusieurs ordres de grandeur sur l’amplitude, évolutions différentes et prédiction de résistances différentielles négatives inobservables sur les mesures.

Le succès du modèle à faible dopage contraste avec l’apparent échec à fort dopage et semble indiquer une lacune dans la modélisation du courant d’obscurité à fort dopage. L’évolution du courant avec le dopage n_{2D} ne suit pas une simple translation d’amplitude, ce qui est un indice de l’activation d’un mécanisme de transport, qui prend une place prépondérante à fort dopage. Pour remédier à ce problème, quelques pistes sont à envisager. En particulier, la modélisation actuelle des mécanismes *d’impuretés ionisées* mériterait une révision et un étalonnage sur des données de la littérature. Si on s’attend effectivement à l’activation de ce mécanisme pour des valeurs élevées de dopage, dans l’état actuel de l’implémentation, nos calculs prédisent au contraire de faibles contributions relativement aux autres mécanismes. Ils ont tout de même été ajoutés aux résultats de la figure 4.18, mais dans l’état actuel d’implémentation, leur contribution est restée négligeable. Une idée à explorer notamment serait la diffusion des entités dopantes dans les couches adjacentes aux puits optiques. Une campagne expérimentale paramétrique sur le dopage n_{2D} est en cours de réalisation : une large gamme de dopage sera étudiée, entre $n_{2D} = 10^{11}$ et $n_{2D} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, pour mettre en évidence l’apparition de ce mécanisme et tenter de le modéliser.

En plus de générer une incompréhension sur son origine, ces hautes valeurs de courant d’obscurité affectent les performances du détecteur : pour les trois dispositifs [A2], [B2] et [C2], les niveaux de bruit à faible température (78K) rendent impossible l’extraction expérimentale de photo-courant. À ce jour, seul l’échantillon présenté dans les sections 4.2.2 et 4.3 (structure de bande figure 4.5-[b]) nous a permis de générer des données

expérimentales de photo-courant exploitables à 78K¹³, puisque étant dopé de manière intermédiaire ($n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). Les mesures de courant d'obscurité de cet échantillon sont présentées sur la figure 4.18-[D], et sont bien reproduites par le modèle séquentiel.

On comprend donc dans cette étude que de plus grandes valeurs de couplage lumière-matière Ω , qui permettraient une meilleure résolution des pics polaritoniques, s'accompagnent nécessairement d'une augmentation drastique du bruit d'obscurité, et se fait donc au détriment des performances du détecteur. Au delà de cette augmentation, un mécanisme de génération de porteurs semble s'activer lorsque le dopage est augmenté. Ce mécanisme, en cours d'étude, n'est pas modélisé pour le moment.

Dans la partie suivante, nous renforcerons ces considérations sur les performances d'un QCD en régime de couplage fort en étudiant la question de l'énergie d'activation dans ces structures fortement dopées.

4.5 Bilan sur les performances d'un QCD en régime de couplage fort lumière-matière

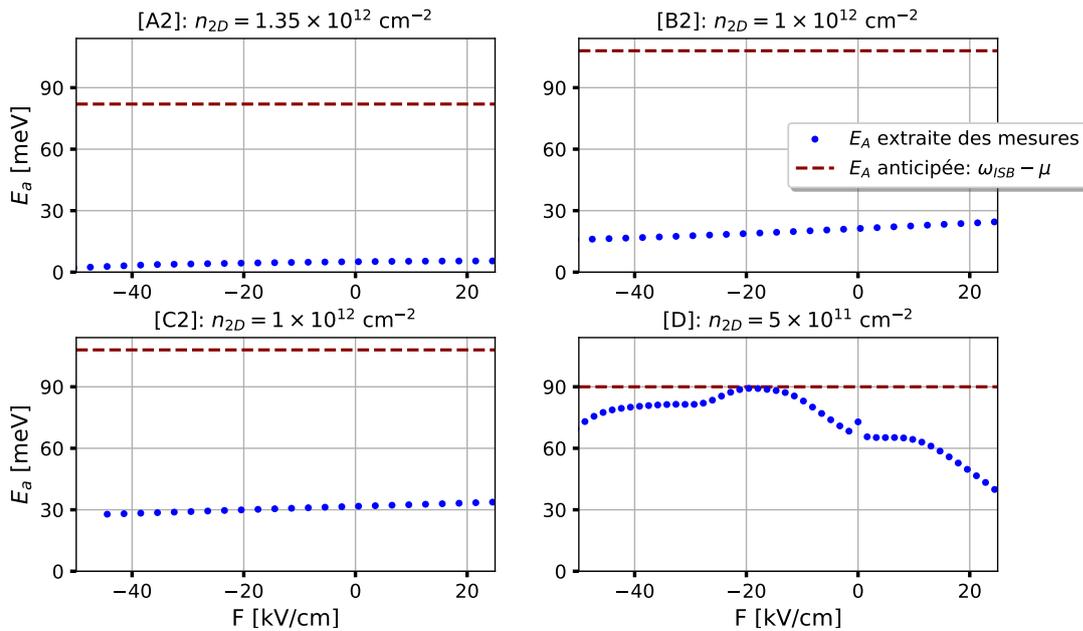


FIGURE 4.19 – Énergies d'activations extraites (courbes pointillées bleues) des courbes de courant d'obscurité de la Figure 4.18 de dispositifs fortement dopés, et estimées (courbes pointillées rouges) à partir de la transition ISB et du niveau de Fermi de ces dispositifs.

Des mesures de courant d'obscurité de la Figure 4.18, on extrait les énergies d'activation 4.19 par l'utilisation d'une loi d'Arrhenius (cf. Eq (2.45)). Le cas de l'échantillon "moyennement" dopé [D] mis à part, les autres échantillons montrent que l'énergie d'activation extraite est très éloignée de l'énergie d'activation anticipée lors de la conception $E_A^{\text{Anticipée}} = \omega_{\text{ISB}} - \mu$. Cette observation laisse supposer que l'énergie d'activation pour des

13. Des mesures réalisées à plus hautes températures sont inexploitables à cause de l'intensité du bruit.

structures fortement dopées est surestimée par cette relation. On l'utilisera tout de même dans les développements qui suivent, comme la borne supérieure idéale de l'énergie d'activation, en gardant en tête que les situations réelles sont vraisemblablement moins favorables.

Dans cette section, on reprend les concepts présentés dans le chapitre 1, section 1.5.3 : l'idée consistait à utiliser la séparation de Rabi 2Ω pour obtenir un gain sur l'énergie d'activation par rapport à une situation équivalente de couplage faible. Cette considération reposait cependant sur la comparaison entre deux situations d'environnements électromagnétiques différents : dans un cas la puissance incidente était directement injectée dans la transition ISB, dans le second, la puissance incidente transitait par un résonateur optique fortement couplé à la transition ISB (comme présenté dans ce chapitre).

Dans cette partie, on se propose d'étudier une même situation d'environnement électromagnétique : un environnement susceptible de générer un couplage fort entre le mode optique résonnant et la transition ISB (par exemple, un réseau d'antennes patches). Cette fois, nous libérons la contrainte sur le dopage des puits quantiques, ce qui nous permettra d'ajuster la valeur du couplage lumière-matière Ω . En revanche, on conserve la contrainte de détecter à une énergie donnée ω_0 , alignée sur l'état polaritonique bas ω_- . Par conséquent, pour garder ω_- résonnant avec ω_0 lorsqu'on va modifier le dopage, il nous faudra modifier l'épaisseur du puits quantique abritant la transition ISB, de manière à re-déplacer la transition ISB ω_{ISB} et par conséquent ré-aligner $\omega_- = \omega_0$.

On va donc explorer continûment les valeurs de couplage Ω et en étudier les effets sur l'évolution relative de deux grandeurs, l'énergie de détection (la référence en énergie est l'énergie de sousbande fondamentale) :

$$\omega_0 = \omega_- \approx \omega_{\text{ISB}} - \Omega \quad (4.83)$$

et l'énergie d'activation E_A :

$$E_A \approx \omega_{\text{ISB}} - \mu \quad (4.84)$$

où μ représente la position du niveau de Fermi dans le puits quantique (on suppose qu'on est à l'équilibre thermodynamique et que μ est commun aux deux sousbandes de la transition). Des deux expressions précédentes, on comprend donc que les deux véritables grandeurs d'intérêt évoluant avec le dopage $n_{2\text{D}}$ sont :

- le couplage Ω , qui évolue avec la racine carrée du dopage $n_{2\text{D}}$ injecté dans les puits quantiques :

$$\Omega = \frac{\omega_P}{2} \sqrt{f_w} \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{n_{2\text{D}} e^2 f_w f_\alpha}{\epsilon_0 \epsilon_r m^* L_{\text{QW}}}} \quad (4.85)$$

- le niveau de Fermi, qui dans le cas de niveaux de dopage tels que μ est situé au dessus de la sousbande fondamentale de la transition, s'exprime linéairement respectivement au dopage :

$$\mu \approx \frac{n_{2\text{D}}}{\rho_{2\text{D}}} = \frac{\pi}{m^*} n_{2\text{D}} \quad (4.86)$$

De ces expressions on comprend que *le niveau de Fermi μ remonte plus rapidement dans le puits que l'écartement Ω provoqué par le couplage, entre le polariton bas ω_- et le niveau haut de la transition ISB*. Il n'existe des situations de gain sur l'énergie d'activation que lorsque la distance $E_A - \omega_0$ augmente avec le dopage, c'est-à-dire lorsque :

$$\frac{d}{dn_{2D}}(E_A) = \frac{d}{dn_{2D}}(\Omega - \mu) > 0 \quad (4.87)$$

Par conséquent, on obtient un gain si :

$$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{e^2 f_w f_\alpha}{\epsilon_0 \epsilon_r m^* L_{QW}}} \frac{1}{\sqrt{n_{2D}}} - \frac{\pi}{m^*} > 0 \quad (4.88)$$

Expression qui donne la limite *haute* de dopage à ne pas dépasser pour obtenir un gain sur l'énergie d'activation :

$$\boxed{n_{2D} < \frac{1}{16} \frac{e^2 f_w f_\alpha m^*}{\pi^2 \epsilon_0 \epsilon_r L_{QW}}} \quad (4.89)$$

À noter que la dépendance en ω_0 de l'équation précédente se trouve implicitement dans L_{QW} . Dans les développements précédents, on a fait le choix de fixer la masse effective m^* constante : en réalité, elle doit être évaluée pour l'énergie de Fermi, et dépend donc elle-même du dopage et des effets de non-parabolicité. Cette correction est négligée ici.

La Figure 4.20 trace en [a] l'évolution de l'énergie d'activation E_A en fonction du dopage et en [b] les deux grandeurs d'intérêt μ et Ω , pour une situation favorable au couplage lumière matière : force d'oscillateur $f_\alpha = 1$, recouvrement parfait $f_w = 1$, puits fin $L_{QW} = 70$ Å. Dans cette situation idéale, on calcule le dopage critique $n_{2D}^{\text{critique}} \approx 0.8 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (via l'évaluation de l'équation (4.89)). En pratique, un tel niveau de dopage correspond à une situation de couplage faible où les états polaritoniques ne sont pas discernables. De plus, jusqu'ici on a fait l'approximation favorable de considérer que la séparation polaritonique s'effectue autour de ω_{ISB} . En réalité, c'est la transition déplacée par la fréquence plasma $\tilde{\omega}_{\text{ISB}} > \omega_{\text{ISB}}$ qui doit être considérée, plus haute dans le puits (et donc moins favorable à un gain sur l'énergie d'activation).

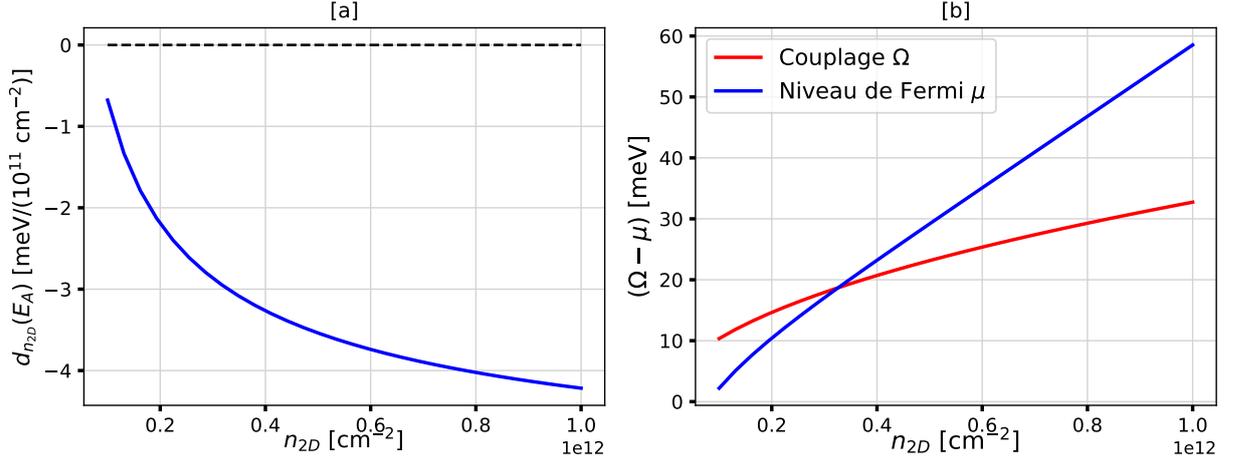


FIGURE 4.20 – [a] Calcul des variations de la distance $\Omega - \mu$ entre le couplage Ω et la position du niveau de Fermi μ en fonction du dopage n_{2D} [b] Calcul de Ω et de μ (avec pour référence d'énergie la sousbande fondamentale). [a] et [b] sont calculés dans une situation favorable de couplage : force d'oscillateur $f_\alpha = 1$, recouvrement parfait $f_w = 1$, puits fin $L_{QW} = 70 \text{ \AA}$.

À partir de considérations sur les évolutions relatives du niveau de Fermi μ et du couplage lumière-matière Ω et leur dépendance avec le dopage n_{2D} , nous avons pu déterminer que, dans le cas d'un QCD embarqué dans un résonateur optique, les situations de couplage fort (fort dopage) n'apparaissent pas comme favorables à un gain sur les mécanismes de bruit thermique par rapport à une situation de couplage faible (faible dopage).

4.6 Bilan

Dans ce chapitre, nous avons démontré le fonctionnement de détecteurs à cascades quantiques embarqués dans des résonateurs antennes patches et opérant dans le régime de couplage fort lumière-matière ($2\Omega = 10.7 \text{ meV}$ et $2\Omega = 12.9 \text{ meV}$). Successivement, nous avons caractérisé le comportement optique (mesures de réflectivité) et le comportement photo-électrique (mesures de photo-courant) des dispositifs. La comparaison entre ces deux mesures nous a permis de mettre en évidence les singularités des mesures de photo-courant.

À partir de ces observations expérimentales, nous avons progressivement construit un modèle de transport, basé sur le formalisme semi-classique de la théorie des modes couplés. Si la première approche de la description du système, basée sur l'utilisation de deux résonateurs (cavité et ISB), nous a permis de reproduire avec une bonne fidélité les données de réflectivité, nous avons mis en évidence qu'elle n'était pas suffisante pour reproduire correctement les singularités des mesures de photo-courant. En effet, nous avons démontré que la modélisation explicite de l'extraction était nécessaire pour obtenir une bonne reproduction des mesures de photo-courant, et qu'une fonction de transfert dépendante de la fréquence de l'excitation incidente ω était requise pour décrire l'asymétrie présente dans le jeu de données.

En étudiant l'interprétation physique des modèles de théorie des modes couplés à deux et trois résonateurs, et notamment en comparant les amplitudes relatives du couplage tunnel Ω_T et de la dynamique intra-sousbande décohérente γ_{intra} , nous avons dressé un schéma

d'extraction des excitations polaritoniques : dans ce système, l'extraction tunnel résonnante depuis les états polaritoniques semble être le mécanisme d'extraction dominant. La plupart des excitations polaritoniques sont directement extraites dans la cascade électronique, sans transiter par les états noirs, contrairement à ce qui est observé dans les dispositifs en injection.

Nous nous sommes ensuite penchés sur l'influence du dopage sur les performances sous obscurité des détecteurs à cascades quantiques. Nous avons d'abord examiné des mesures de courant d'obscurité pour plusieurs structures, étudiées dans deux situations de dopage, l'une faible ($\approx 2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$), l'autre forte ($\approx 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). Ces mesures ont mis en évidence que de forts dopages, au delà de simplement translater l'amplitude des courbes de courant, modifient significativement l'évolution de ces courbes avec la température et la tension appliquée. Par ailleurs, notre modèle de transport est incapable de reproduire de manière satisfaisante ces courbes de courant dans le cas des dispositifs fortement dopés. Ces considérations suggèrent donc qu'un mécanisme de transport s'active lorsque le dopage augmente et ce mécanisme n'est pas modélisé dans notre implémentation actuelle.

Ces mauvais résultats de fonctionnement sous obscurité sont renforcés par une étude entre l'évolution relative du couplage lumière-matière Ω et de la position du niveau de Fermi μ , et leur influence sur l'énergie d'activation E_A en fonction du dopage. Dans cette étude, nous montrons que, lorsque le dopage augmente, le niveau de Fermi μ s'élève plus rapidement dans le puits que la séparation de Rabi Ω entre l'énergie ISB et celle du polariton bas ω_- . Cette idée se traduit par l'incapacité à obtenir un gain sur l'énergie d'activation, comme il avait été envisagé section 1.5.3 du chapitre 1.

Ces conclusions sur les performances des QCDs en régime de couplage fort sont à pondérer par la faible quantité de données à notre disposition, et notamment en photocourant. En effet, notre raisonnement s'est uniquement penché sur la dégradation du bruit thermique avec le dopage, sans considérer les évolutions des niveaux de réponse, et par conséquent de la détectivité de ces dispositifs. Une étude plus approfondie de cette figure de mérite serait nécessaire pour pouvoir trancher sur les évolutions des performances théoriques lorsqu'on augmente le dopage dans nos dispositifs.

En revanche, ces travaux renforcent le rôle des QCDs comme des dispositifs clés dans l'étude des polaritons ISB, et constituent une démonstration de la possibilité de concevoir une extraction résonnante de polaritons vers un réservoir électronique, avec une implication seulement secondaire des états noirs dans le processus d'extraction.

Chapitre 5

Vers un modèle quantique du transport électronique en régime de couplage fort lumière-matière

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié la réponse électro-optique expérimentale de QCDs embarqués dans des réseaux d'antennes patchs, fonctionnant en régime de couplage fort. Cette étude est basée sur des mesures *en l'absence de champ électrique appliqué sur la structure* ($F = 0$). Pour décrire ces données, nous avons développé un formalisme basé sur la théorie des modes couplés : l'ajout d'un troisième résonateur, modélisant de manière effective la cascade d'extraction, nous a permis de reproduire quantitativement les spectres de photo-courant expérimentaux, pour tous les paramètres de cavité p, s mesurés. Deux points viennent cependant nuancer les résultats obtenus précédemment :

1. les mesures de photo-courant ont été normalisées pour éviter des erreurs d'interprétation sur les amplitudes relatives des spectres d'échantillons de géométries différentes (certaines plaques présentent en effet des défauts de fabrication rendant les comparaisons impossibles). Par conséquent, nous n'avons pas pu étudier la capacité de ce modèle à reproduire l'amplitude des spectres de photo-courant mesurés.
2. la valeur obtenue pour le taux d'extraction $\gamma_E = 11$ meV est trop élevée par rapport à l'ordre de grandeur d'un taux de transition inter-sousbande usuel (plutôt de l'ordre du meV), et se rapproche plutôt de l'ordre des taux de transition intra-sousbande. De cette observation, nous avons compris que la théorie des modes couplées, par sa nature de formalisme semi-classique, est incapable de dissocier les processus décohérents des processus dissipatifs. Autrement dit, la théorie des modes couplés ne peut pas dissocier élargissements et amplitudes spectraux.

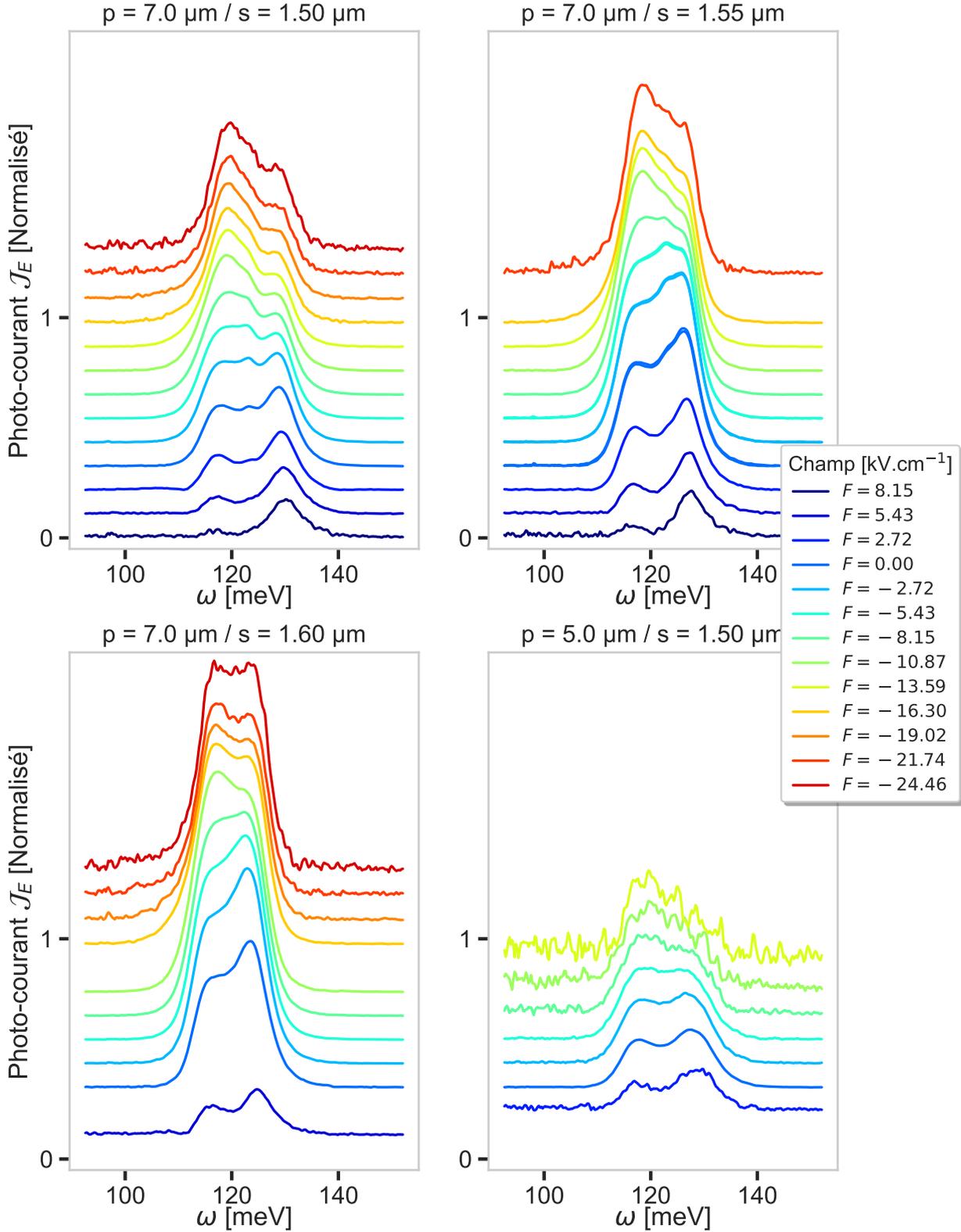


FIGURE 5.1 – Mesures de photo-courant pour différents champ électrique F appliqués sur la structure, pour une gamme $F = [-25 : 8]$ kV.cm $^{-1}$. Différentes géométries du réseau de patches (p, s) sont explorées. Les mesures sont réalisées à $T = 78\text{K}$. Les puits quantiques optiques sont dopés à $n_{2\text{D}} = 5 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$. Les spectres sont normalisés relativement au maximum d'amplitude observé sur le jeu de données présenté.

Les mesures présentées dans la suite viennent confirmer ces limites de la théorie des modes couplés. La figure 5.1 présente des mesures¹ de photo-courant sous champ électrique appliqué, pour les mêmes échantillons que ceux présentés dans la section 4.3 du chapitre 4 : les échantillons se présentent sous la forme de matrices de patches d'environ $50 \times 50 \mu\text{m}^2$, dont les patches sont reliés électriquement par des fils métalliques. Seuls les échantillons dopés $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ ont été fabriqués et donc mesurés. Les échantillons sont placés dans un cryostat ($T = 78 \text{ K}$), illuminés par la source global du FTIR. Le signal est amplifié par un amplificateur trans-impédance à faible bruit. À noter qu'au delà de $T = 78 \text{ K}$, le rapport signal à bruit s'écroule. Cette fois, les échantillons sont étudiés sur une gamme² de champ électrique $F = [-25 : 8] \text{ kV.cm}^{-1}$. Plusieurs géométries (p, s) de réseaux sont mesurées, avec p la période inter-patch du réseau, et s les dimensions latérales des patches. Ces mesures sous champ électrique se font pour le *même* échantillon et il est donc pertinent de comparer l'amplitude relative des spectres pour un même couple de paramètres p, s . Attention cependant aux comparaisons d'amplitude pour des couples p, s différents : le protocole expérimental ne garantit pas une illumination constante entre chaque mesure de dispositifs.

On fait les observations suivantes :

- pour tous les couples (p, s) étudiés, l'amplitude globale des spectres de photo-courant évolue avec le champ F appliqué. On observe un maximum d'amplitude autour de $F \approx -10 \text{ kV.cm}^{-1}$.
- les niveaux de bruit augmentent fortement lorsque l'amplitude absolue du champ $|F|$ augmente. Ces niveaux de bruits sont la conséquence directe de l'augmentation du courant d'obscurité avec le champ électrique. Ils conditionnent la gamme de champ F exploitable
- on distingue nettement deux pics prépondérants, signature du couplage fort. L'écart entre ces pics (pour un couple p, s donné) est *constant quel que soit le champ F appliqué*.
- les amplitudes relatives de ces pics s'inversent avec le champ F appliqué. À F fortement négatif, c'est le pic de basse énergie qui domine. À $F > 0$, c'est le pic de haute énergie qui domine. Le croisement d'égale amplitude se fait pour un champ négatif $F \approx -5 \text{ kV.cm}^{-1}$.
- on observe un troisième pic, particulièrement pour les paramètres $s = 1.5, 1.55 \mu\text{m}$, $p = 7 \mu\text{m}$, centré sur $\omega = 123 \text{ meV}$, dont la position semble indépendante du champ électrique appliqué. Une observation similaire est faite dans [25] pour des mesures de réflectivité dans des puits quantiques paraboliques en régime de couplage ultra-fort. Dans ces travaux, les auteurs observent également un troisième pic, indépendant de la dispersion polaritonique, qu'ils assimilent à la résonance non-couplée de la transition ISB : un pic positionné à la même énergie de résonance est retrouvé dans des mesures en l'absence de résonateur optique (en couplage faible). Dans notre cas, nous n'avons pas de mesures de couplage faible à comparer ; cependant l'indépendance aux variations du champ électrique appliqué semble également indiquer que ce pic correspond à la transition ISB.

Ces nouvelles mesures, et notamment l'observation sur l'évolution relative des pics de photo-courant avec le champ électrique, semblent confirmer qu'il est possible d'extraire des polari-

1. Remerciements à Salvatore Pes pour les mesures.

2. avec la convention qu'un champ négatif correspond à une chute de potentiel $V(z_1) - V(z_0) < 0$ pour $z_1 > z_0$

tons de manière sélective : en déplaçant l’alignement de l’extracteur (la cascade électronique) autour de la dispersion polaritonique, on favorise l’extraction sélective depuis un état polaritonique vers la cascade électronique.

Ces mesures ré-introduisent également les problématiques sur la capacité de décrire les évolutions d’amplitudes. En effet, dans le cadre de ces mesures sous champ, les amplitudes relatives des spectres de photo-courant étant désormais comparables, il devient important de reproduire leur évolution.

Cependant, on sait par avance que la théorie des modes couplés n’en sera pas capable de manière satisfaisante. En effet, le taux γ_E introduit en CMT recouvrait simultanément deux phénomènes physiques différents : il décrivait à la fois le taux d’extraction depuis l’extracteur, dépendant du champ électrique appliqué (le désalignement de la cascade avec le champ va modifier les taux ISB entre les niveaux de la cascade), et les mécanismes intra-sousbandes qui contrôlent eux l’élargissement spectral du mode ISB, indépendants du champ.

La CMT ne pourra donc pas à la fois décrire les variations d’intensité d’extraction et l’élargissement de l’extracteur. En annexe [G], on présente tout de même une tentative infructueuse de description des données par la théorie des modes couplés.

L’objectif de ce chapitre est donc d’introduire un nouveau formalisme, plus complet et plus général, qui sera à même de faire la distinction entre élargissement intra-sousbande et extraction inter-sousbande, condition nécessaire à la description des données présentées sur la Figure 5.1. Cela nous permettra de correctement interpréter les résultats sur l’extraction sélective depuis les états polaritonique vers la cascade électronique. Ce formalisme est celui de la matrice densité appliqué aux systèmes quantiques ouverts.

Si ce chapitre est consacré à la description d’un processus de détection, la problématique de la modélisation de l’injection a fait l’objet de plusieurs études théoriques [125, 30, 33]. En particulier, les auteurs de [33] se sont penchés extensivement sur la problématique de l’injection. Ils présentent notamment la description quantique et non-perturbative de l’interaction entre des polaritons ISB de micro-cavité et un état électronique simple. Leurs résultats mettent en avant la possibilité d’exalter l’efficacité radiative d’émission d’un dispositif électroluminescent en utilisant les propriétés du couplage fort. Les auteurs précisent qu’une telle exaltation n’est possible que par la possibilité d’injecter sélectivement un état polaritonique. Injecter sélectivement un état polaritonique n’est possible que si la largeur spectrale de l’injecteur est suffisamment faible pour éviter une injection parasite dans les états noirs, non-couplés à la lumière. En particulier, les expériences récentes d’électroluminescence de dispositifs ISB en couplage fort [32] n’ont pas d’injecteur suffisamment fin spectralement pour réaliser cette injection sélective. Injecter sélectivement (et donc efficacement) des états polaritoniques ISB permettrait d’accéder à une nouvelle génération de dispositifs ISB à base de polaritons : les auteurs de [31] décrivent notamment comment il serait possible de réaliser un laser à partir de l’émission stimulée de polariton assistée par la diffusion de phonon LO.

Dans ce chapitre, nous verrons comment cette problématique de sélectivité s’étend à un processus de détection.

5.1 Introduction aux systèmes quantiques ouverts

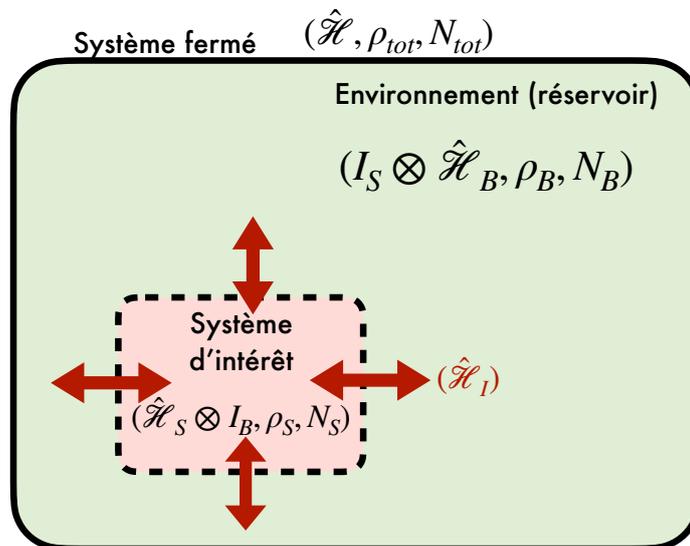


FIGURE 5.2 – Représentation schématique d’un système fermé (d’Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$) décomposé en un sous-système d’intérêt (d’Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_S$) et un environnement (d’Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_B$). Le système d’intérêt interagit avec son environnement via l’Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_I$

Tout système quantique appréhendé dans le monde réel peut être assimilé à un système quantique *ouvert* : quelle que soit la volonté de l’opérateur d’isoler son système, il restera toujours, si tant est qu’elle soit faible, une interaction, un couplage, entre ce système et son environnement extérieur. Par ailleurs, la simple action de mesurer un système implique nécessairement une interaction entre le dispositif de mesure et le système lui-même, qui est une forme d’interaction avec l’environnement. L’objectif de cette partie est donc d’introduire un nouveau formalisme, capable de décrire la dynamique d’un système quantique soumis à des interactions dissipatives et décohérentes de la part de l’environnement extérieur. Cette introduction aux systèmes quantiques ouverts se base principalement sur l’introduction de [66] et les développements de [126].

La dynamique d’un système fermé est décrite par l’équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.1)$$

où $\Psi(\mathbf{r}, t)$ est une fonction d’onde, et $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, t)$ est l’Hamiltonien du système. On souhaite étudier l’évolution d’un sous-système S (le système d’intérêt), inclus dans le système fermé et en interaction avec son environnement (aussi communément appelé *réservoir* ou *bain*). L’espace d’Hilbert H du système fermé (dimension N_{tot}) est alors décomposé en deux sous-espaces $H = H_S \otimes H_B$ (dimensions N_S et N_B). L’Hamiltonien de ce système fermé peut donc s’écrire :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_S \otimes \mathcal{I}_B + \mathcal{I}_S \otimes \hat{\mathcal{H}}_B + \hat{\mathcal{H}}_I \quad (5.2)$$

où $\hat{\mathcal{H}}_S$ est l'Hamiltonien du sous-système d'intérêt, $\hat{\mathcal{H}}_B$ l'Hamiltonien du réservoir et $\hat{\mathcal{H}}_I$ l'Hamiltonien d'interaction entre ces deux sous-systèmes. Il est impossible de suivre explicitement la dynamique simultanée de l'intégralité de ce système fermé : si en principe, l'équation 5.3 peut être résolue par diagonalisation de l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$, les dimensions du problème N_{tot} sont la plupart du temps trop grandes pour pouvoir envisager une résolution, même numérique.

Dans l'hypothèse que le réservoir interagit *faiblement* avec le système d'intérêt, la dynamique des deux systèmes peut être considérée suffisamment distincte pour envisager un traitement aux dimensions réduites. Dans cette première partie, on présente donc brièvement le formalisme qui permet de traiter efficacement la dynamique des systèmes quantiques ouverts et faiblement couplés à leur environnement. Dans la suite, on adoptera une représentation vectorielle des fonctions d'ondes, tel que l'équation (5.1) est ré-écrite de la manière suivante :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \mathcal{H}|\psi\rangle \quad (5.3)$$

où $|\psi\rangle$ est un vecteur d'état du système, et \mathcal{H} est la représentation matricielle de l'Hamiltonien.

5.1.1 Matrice densité

Si l'évolution du vecteur d'état $|\psi\rangle$ dans un système fermé est déterministe, l'évolution de systèmes ouverts est de nature stochastique : soumises aux perturbations de l'extérieur, les transitions entre les différents niveaux d'énergie se font de manière probabiliste, et désaccordent les relations de phase entre les états du système. Pour décrire cette évolution stochastique, il est courant d'utiliser le formalisme *matrice densité*.

La matrice densité ρ est la représentation matricielle de l'opérateur de densité. Elle permet de décrire des états du système que la formulation par le biais des vecteurs d'états $|\psi\rangle$ était incapable de décrire, les mélanges statistiques d'états purs :

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (5.4)$$

où p_n représente la probabilité du système d'être dans l'état pur $|\psi_n\rangle \langle \psi_n|$:

$$|\psi_n\rangle = \sum_i c_i^n |u_i\rangle \quad (5.5)$$

$$\sum_i |c_i^n|^2 = 1 \quad (5.6)$$

où $\{|u_i\rangle\}$ est une base orthonormée de l'espace des états, et les $c_i^n = \langle u_i | \psi_n \rangle$ sont les coefficients de $|\psi_n\rangle$ dans cette base. Dans la suite, nous utiliserons l'expression de la matrice densité représentée dans une base $\{|u_i\rangle\}$:

$$\rho = \sum_i \sum_j \sum_n p_n c_i^{n*} c_j^n |u_j\rangle \langle u_i| = \sum_i \sum_j \rho_{ij} |u_j\rangle \langle u_i| \quad (5.7)$$

Les termes diagonaux ρ_{ii} représentent la probabilité du système d'être dans l'état $|u_i\rangle$. Les termes non-diagonaux ρ_{ij} sont les *cohérences*, une grandeur qui permet de quantifier les relations de phase entre deux états $|u_i\rangle, |u_j\rangle$ du système.

5.1.2 Équation maîtresse de Lindblad pour la matrice densité réduite

Pour un système fermé générique décrit figure 5.2, l'équation d'évolution de la matrice densité ρ_{tot} est l'équation de Liouville-Von Neumann [126] :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\text{tot}} = [\mathcal{H}, \rho_{\text{tot}}] \quad (5.8)$$

où $[A, B]$ est l'opérateur commutateur entre A et B :

$$[A, B] = AB - BA \quad (5.9)$$

L'équation (5.8) est une généralisation, pour la matrice densité, de l'équation de Schrödinger Eq.(5.3). Elle décrit l'évolution unitaire d'un système fermé, sans interaction avec un environnement extérieur. Dans ce système, \mathcal{H} s'écrit selon l'équation (5.2). Pour réduire les dimensions du problème aux dimensions du système d'intérêt N_S , on utilise une forme réduite de la matrice densité, ρ_S , qui s'affranchit de la dynamique de l'environnement via l'opérateur *trace* appliqué aux degrés de liberté de l'environnement :

$$\boxed{\rho_S = \text{Tr}_B(\rho_{\text{tot}})} \quad (5.10)$$

où Tr_B est la trace partielle appliquée sur l'espace d'Hilbert H_B de l'environnement. ρ_S contient toute l'information utile pour calculer les observables du sous-système d'intérêt. Cette opération permet la réduction des dimensions du problème (N_{tot}) aux dimensions du système d'intérêt ($N_S \ll N_B, N_{\text{tot}}$). L'équation d'évolution de la matrice densité (5.8) s'en retrouve nécessairement affectée : l'équation de Liouville-Neumann d'évolution de la matrice densité réduite s'écrit :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_S = \text{Tr}_B[\mathcal{H}, \rho_{\text{tot}}] \quad (5.11)$$

Pour obtenir une forme plus développée de cette équation, qui s'affranchit totalement des degrés de liberté de l'environnement, il nous faudra utiliser deux hypothèses principales :

- l'approximation de Born, qui est une approximation de faible interaction : l'état de l'environnement ne doit pas changer significativement avec l'interaction avec le système d'intérêt.
- l'approximation de Markov : le temps caractéristique τ_B d'évolution de l'environnement doit être beaucoup plus court que l'ensemble de la dynamique d'évolution du système, de temps caractéristique $\tau_S \gg \tau_B$.

En utilisant ces deux approximations, on peut montrer que l'équation (5.11) peut être modifiée sous la forme de *l'équation maîtresse de Lindblad* pour la matrice densité réduite ρ_S [126, 127, 128] :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_S(t), \rho_S(t)] + \sum_n [2C_n \rho_S(t) C_n^\dagger - \rho_S(t) C_n^\dagger C_n - C_n^\dagger C_n \rho_S(t)]} \quad (5.12)$$

où \mathcal{H}_S est l'Hamiltonien réduit au système d'intérêt, les $C_n = \sqrt{\gamma_n} A_n$ sont les opérateurs de dissipation, les A_n sont les opérateurs de Lindblad (ou opérateurs de *saut*), sans dimensions,

qui décrivent les formes d'interactions entre le système et son environnement, et les γ_n sont les taux correspondant à ces interactions (on les dimensionnera en meV ou en s^{-1}), qui permettent des interactions entre le système et son environnement (ce seront des produits d'opérateurs création/annihilation) et les γ_n sont les taux correspondants à ces interactions. L'équation (5.12) se décompose donc en deux catégories distinctes :

- $-\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}_S(t), \rho_S(t)]$ représente l'évolution unitaire du système, c'est-à-dire l'évolution conservatrice du système, sans dissipation ni de l'énergie contenue dans le système ni des cohérences entre les états du système.
- $\sum_n [2C_n\rho_S(t)C_n^\dagger - \rho_S(t)C_n^\dagger C_n - C_n^\dagger C_n\rho_S(t)]$ représente l'interaction dissipative et décohérente du système avec son environnement. C'est via ces termes que l'on pourra modéliser la dissipation de l'énergie dans l'environnement et l'amortissement des cohérences entre les états du système. Par la suite, on condensera l'écriture de ces termes à l'aide du super-opérateur³ \mathcal{L} , qu'on nommera *dissipateur* :

$$\mathcal{L}(A_n, \rho_S) = 2A_n\rho_S A_n^\dagger - \rho_S A_n^\dagger A_n - A_n^\dagger A_n \rho_S \quad (5.13)$$

tel que l'équation (5.12) devient :

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}_S(t), \rho_S(t)] + \sum_n \gamma_n \mathcal{L}(A_n, \rho_S)} \quad (5.14)$$

On note que cette décomposition entre évolution unitaire et dissipative du système est semblable à la formulation des équations de la théorie des modes couplés du chapitre 4 (cf. Eq. (4.50)). Après résolution de l'équation (5.14), on pourra calculer la valeur moyenne d'un opérateur O du système d'intérêt à partir de ρ_S :

$$\langle O \rangle := \text{Tr}_S(O\rho_S) \quad (5.15)$$

5.2 Résolution de l'équation de Lindblad : l'exemple d'un unique résonateur

Dans cette partie, on adapte le développement présenté dans [129], chapitre IV. L'objectif est d'illustrer l'équation de Lindblad (5.14) dans un cas restreint à un système simple. Ce système est représenté sur la figure 5.3.

3. Un super-opérateur est un opérateur qui agit sur des opérateurs

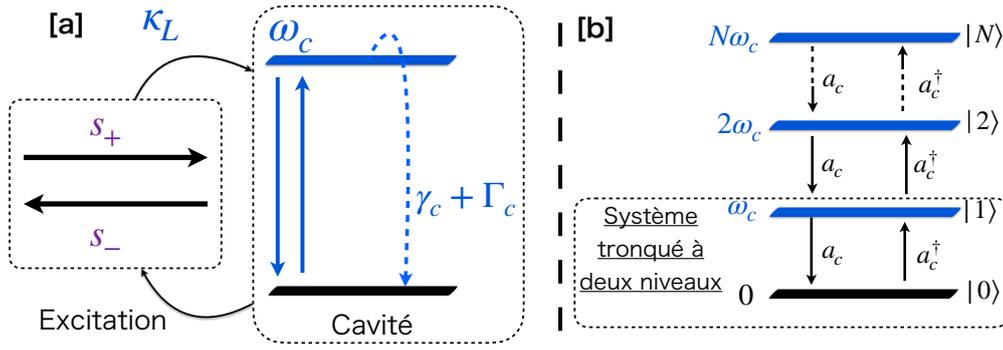


FIGURE 5.3 – [a] Représentation schématique d'un résonateur unique pompé par une source incidente d'amplitude s_+ . [b] Représentation schématique des états à n excitations $|n\rangle$ de ce résonateur. On passe d'un état $|n\rangle$ à un état $|n+1\rangle$ par application d'un opérateur création a^\dagger .

On souhaite modéliser l'évolution d'un système composé d'un résonateur (par exemple, une cavité optique) en interaction avec une source monochromatique cohérente de fréquence ω . L'amplitude de cette interaction est $\Omega_L = \kappa_L s_+ e^{i\omega t}$, où s_+ est l'amplitude de l'onde de cette source incidente, et κ_L quantifie la qualité du couplage indépendamment de l'amplitude de la source. Dans l'approximation du champ tournant, l'Hamiltonien du système {cavité+interaction avec la source} s'écrit :

$$\mathcal{H}_S(t) = \omega_c a_c^\dagger a_c + (\Omega_L a_c + \Omega_L^* a_c^\dagger) \quad (5.16)$$

avec ω_c la fréquence propre de la cavité et a_c/a_c^\dagger les opérateurs création/annihilation associés à la cavité. L'équation d'évolution de ce sous-système en interaction avec son environnement est l'équation de Lindblad Eq. (5.14), portant sur la matrice densité ρ^4 associée à la cavité :

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[\mathcal{H}_S, \rho] + (\gamma_c + \Gamma_c)\mathcal{L}[a_c, \rho] \quad (5.17)$$

($\hbar = 1$), et où l'on a dissocié les termes de dissipation en deux contributions, γ_c le taux de dissipation non-radiative, et Γ_c le taux de dissipation radiative. On choisit de représenter la matrice ρ dans la base des états à n excitations $\{|n\rangle\}$ de l'espace de Fock, où $|n\rangle$ désigne donc l'état à n excitations dans la cavité (n photons dans notre exemple). En l'absence de contrainte sur l'accumulation d'excitations dans notre résonateur, cette base est de dimension infinie :

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} & \rho_{02} & \cdots & \rho_{0n} & \cdots \\ \rho_{10} & \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1n} & \cdots \\ \rho_{20} & \rho_{21} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \rho_{n0} & \rho_{n1} & \rho_{n2} & \cdots & \rho_{nn} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

4. On s'affranchit de l'indice S : désormais ρ fera toujours référence à la matrice densité réduite du sous-système S d'intérêt.

Dans un premier temps, on va restreindre ces dimensions à deux, pour deux états accessibles du système : l'état du vide $|0\rangle$, sans excitation, et l'état à une excitation $|1\rangle$. L'objectif est d'obtenir une description analytique du problème et puis dans un second temps, d'étudier l'influence des dimensions du problème pour comprendre sous quelles hypothèses notre problème peut être tronqué.

5.2.1 Équations de Bloch optiques

On restreint donc notre résonateur à un système à deux niveaux séparés de ω_c . L'Hamiltonien \mathcal{H}_S et la matrice densité ρ exprimés dans la base des états $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ s'écrivent :

$$\mathcal{H}_S(t) = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_L \\ \Omega_L^* & \omega_c \end{bmatrix}, \quad \rho = \begin{bmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

ρ_{11} désigne la probabilité du système d'être dans l'état $|1\rangle$ à une excitation, ρ_{00} la probabilité d'être dans l'état du vide. ρ_{10} et ρ_{01} sont les cohérences entre les deux niveaux, et permettront, en outre, de quantifier le courant de pompage entre $|0\rangle$ et $|1\rangle$. On évalue le commutateur de l'équation (5.17) :

$$[\mathcal{H}_S, \rho] = \begin{bmatrix} \Omega_L \rho_{10} - \Omega_L^* \rho_{01} & \omega_c \rho_{01} + \Omega_L (\rho_{11} - \rho_{00}) \\ -\omega_c \rho_{10} + \Omega_L^* (\rho_{00} - \rho_{11}) & \Omega_L^* \rho_{01} - \Omega_L \rho_{10} \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

On développe également le terme de dissipation :

$$(\gamma_c + \Gamma_c) \mathcal{L}[a, \rho_S] = \begin{bmatrix} 2(\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{11} & -(\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{01} \\ -(\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{10} & -2(\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{11} \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

On s'aperçoit ici que les populations sont dissipées deux fois plus efficacement $2(\gamma_c + \Gamma_c)$ que les cohérences $(\gamma_c + \Gamma_c)$. Sous sa forme vectorielle, ce système d'équations restreint à deux états porte le nom d'équations de Bloch optiques [129] :

$$\frac{d\rho_{00}}{dt} = i\Omega_L^* \rho_{01} - i\Omega_L \rho_{10} + 2(\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{11} \quad (5.22)$$

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = i\Omega_L \rho_{10} - i\Omega_L^* \rho_{01} - 2(\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{11} \quad (5.23)$$

$$\frac{d\rho_{01}}{dt} = -i\omega_c \rho_{01} + i\Omega_L (\rho_{00} - \rho_{11}) - (\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{01} \quad (5.24)$$

$$\frac{d\rho_{10}}{dt} = i\omega_c \rho_{10} + i\Omega_L^* (\rho_{11} - \rho_{00}) - (\gamma_c + \Gamma_c) \rho_{10} \quad (5.25)$$

On effectue un changement de variable pour se débarrasser des dépendances temporelles contenues dans Ω_L :

$$\sigma_{01} = \rho_{01} e^{i\omega t} \quad (5.26)$$

$$\sigma_{10} = \rho_{10} e^{-i\omega t} \quad (5.27)$$

$$\sigma_{00} = \rho_{00} \quad (5.28)$$

$$\sigma_{11} = \rho_{11} \quad (5.29)$$

On obtient alors la forme indépendante du temps des équations de Bloch optiques :

$$\frac{d\sigma_{00}}{dt} = i\kappa_L s_+ (\sigma_{01} - \sigma_{10}) + 2(\gamma_c + \Gamma_c)\sigma_{11} \quad (5.30)$$

$$\frac{d\sigma_{11}}{dt} = i\kappa_L s_+ (\sigma_{10} - \sigma_{01}) - 2(\gamma_c + \Gamma_c)\sigma_{11} \quad (5.31)$$

$$\frac{d\sigma_{01}}{dt} = i(\omega - \omega_c)\sigma_{01} + i\kappa_L s_+ (\sigma_{00} - \sigma_{11}) - (\gamma_c + \Gamma_c)\sigma_{01} \quad (5.32)$$

$$\frac{d\sigma_{10}}{dt} = -i(\omega - \omega_c)\sigma_{10} + i\kappa_L s_+ (\sigma_{11} - \sigma_{00}) - (\gamma_c + \Gamma_c)\sigma_{10} \quad (5.33)$$

en utilisant $\Omega_L = \kappa_L s_+ e^{i\omega t}$.

Solutions stationnaires

En régime stationnaire, on résout ce système d'équations et on obtient les solutions stationnaires suivantes :

$$\sigma_{00} = \frac{1}{2} \frac{1}{1+s} \quad (5.34)$$

$$\sigma_{11} = \frac{1}{2} \frac{s}{1+s} \quad (5.35)$$

$$\sigma_{01} = \frac{(\omega - \omega_c) + i\gamma}{2\kappa_L s_+} \frac{s}{1+s} \quad (5.36)$$

$$\sigma_{10} = \frac{(\omega - \omega_c) - i\gamma}{2\kappa_L s_+} \frac{s}{1+s} \quad (5.37)$$

où l'on a introduit le *paramètre de saturation* s :

$$s = \frac{2\kappa_L s_+^2}{(\omega - \omega_c)^2 + (\gamma_c + \Gamma_c)^2} \quad (5.38)$$

s est un indicateur de la *saturation* du système, c'est-à-dire sa capacité à dissiper des excitations $(\gamma_c + \Gamma_c)$ par rapport au rythme de pompage $(\kappa_L s_+)$ qu'on lui impose. s est maximum lorsque l'excitation incidente est accordée sur la résonance du résonateur :

$$s_{\max} = \frac{2\kappa_L s_+^2}{(\gamma_c + \Gamma_c)^2} \quad (5.39)$$

On distingue deux régimes de fonctionnement :

- $s_{\max} \ll 1$: **régime linéaire**, de faible excitation. Les mécanismes de dissipation sont beaucoup plus rapides que les mécanismes de pompage. La probabilité du système d'être dans l'état à une excitation $|1\rangle$ est faible devant celle d'être dans l'état du vide $|0\rangle$ ($\sigma_{11} \ll \sigma_{00}$).
- $s_{\max} > 1$: **régime non-linéaire**, d'excitation intense. Les mécanismes de dissipation sont très lents devant les mécanismes de pompage. La nature fermionique du système à deux niveaux est révélée : σ_{11} et σ_{00} tend vers $1/2$ lorsque s_{\max} augmente ; on dit que la transition est *blanchie* [129]. Nous verrons dans la suite les effets de saturation de la transition sur le spectre d'absorption du système.

Puissance dissipée et absorption

Pour remonter à l'absorption, il nous faut d'abord calculer le nombre moyen d'excitations contenues dans la cavité $\langle a^\dagger a \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle a^\dagger a \rangle &= \text{Tr}(a^\dagger a \sigma) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} n \sigma_{nn}\end{aligned}\quad (5.40)$$

où $N-1$ est le nombre maximal d'excitations que l'on peut introduire dans notre résonateur. Dans notre cas précis où $N = 2$:

$$\begin{aligned}\langle a^\dagger a \rangle &= \langle 0|a^\dagger a|0\rangle \sigma_{00} + \langle 1|a^\dagger a|1\rangle \sigma_{11} \\ &= \sigma_{11}\end{aligned}\quad (5.41)$$

L'absorption \mathcal{A}_c du système s'exprime à partir de la puissance moyenne dissipée $\mathcal{P}_c = 2\gamma_c \langle a^\dagger a \rangle$ par les mécanismes non-radiatifs, renormalisée par la puissance incidente $|s_+|^2$:

$$\boxed{\mathcal{A}_c = \frac{2\gamma_c \langle a^\dagger a \rangle}{|s_+|^2}}\quad (5.42)$$

L'expression précédente est valable quel que soit la dimension du système considéré. Dans notre cas simplifié à deux états, on obtient :

$$\mathcal{A}_c = \frac{\gamma_c}{|s_+|^2} \frac{s}{1+s}\quad (5.43)$$

Si on se place dans le régime de faible excitation $s_{\max} \ll 1$:

$$\boxed{\mathcal{A}_c = \frac{2\gamma_c \kappa_L^2}{(\omega - \omega_c)^2 + (\gamma_c + \Gamma_c)^2}} \quad s \ll 1\quad (5.44)$$

En identifiant, comme nous l'avons fait pour la théorie des modes couplés, $\kappa_L = \sqrt{2\Gamma_c}$, on constate que *l'expression de l'absorption de l'équation (5.44) est exactement similaire à l'expression obtenue dans le cas d'un simple résonateur en théorie des modes couplés*. Cette égalité est obtenue à condition que le paramètre de saturation s soit très inférieur à 1, ce qui correspond à une situation de faible excitation. En d'autres termes, tant que le système n'entre pas dans un régime de saturation, la description en matrice densité de l'état stationnaire d'un résonateur optique pompé par une onde incidente est absolument similaire à la description donnée par la théorie des modes couplés. Sur cet aspect, le formalisme matrice densité est plus général dans le sens qu'il peut décrire des situations de forte excitation, où il est possible de saturer un système de faible dimension.

À noter que si les dimensions du système augmentent, donc qu'on considère les états $|0\rangle, |1\rangle, \dots |N\rangle$, jusqu'à N excitations, on repousse les limites du critère s_{\max} pour lequel on rentre dans un régime de fonctionnement non-linéaire. C'est la propriété d'étudier un système de dimension finie qui instaure la possibilité de saturation. Un système de dimension infini traité en matrice densité est donc totalement similaire à un système de dimension

2 traité en CMT, puisque aucun des deux systèmes n'est saturable.

De cette étude d'un système simple, composé d'un unique résonateur, on a compris qu'il était possible de faire une *jonction* entre le formalisme de la matrice densité et celui de la théorie des modes couplés. En l'occurrence, dans un cas de fonctionnement linéaire, de faible excitation s_+ , le comportement d'un système à deux niveaux traité en matrice densité est absolument équivalent à celui d'un résonateur traité en théorie des modes couplés. Cette *jonction* de formalisme est importante pour deux raisons :

- les résultats du chapitre précédent en théorie des modes couplés vont nous servir de point de départ. Nous pourrions les comparer au formalisme matrice densité lorsque nous l'élargirons avec l'ajout de termes plus complexes (notamment les termes de décohérence intra-sousbande γ_{intra} , absents de la CMT).
- les différents modes composants notre système n'étant pas saturables, travailler dans un régime de faible excitation nous permettra de réduire les dimensions du système en ne considérant que les états à une excitation pour chacun de ces modes (plasmon ISB et cavité).

5.3 Système à trois niveaux : l'exemple du QCD en couplage faible

Dans cette partie, dans une optique similaire à la partie précédente, nous verrons s'il est possible de faire une jonction entre un modèle séquentiel du transport et un modèle basé sur la matrice densité dans lequel les termes de décohérence intra-sousbande sont explicitement décrits. Pour ce faire, nous approcherons le problème graduellement : on commencera donc avec l'étude d'un système qui s'apparente à un QCD en couplage *faible*, et nous étendrons plus tard ce formalisme à l'étude de QCD en couplage fort.

5.3.1 Description du système

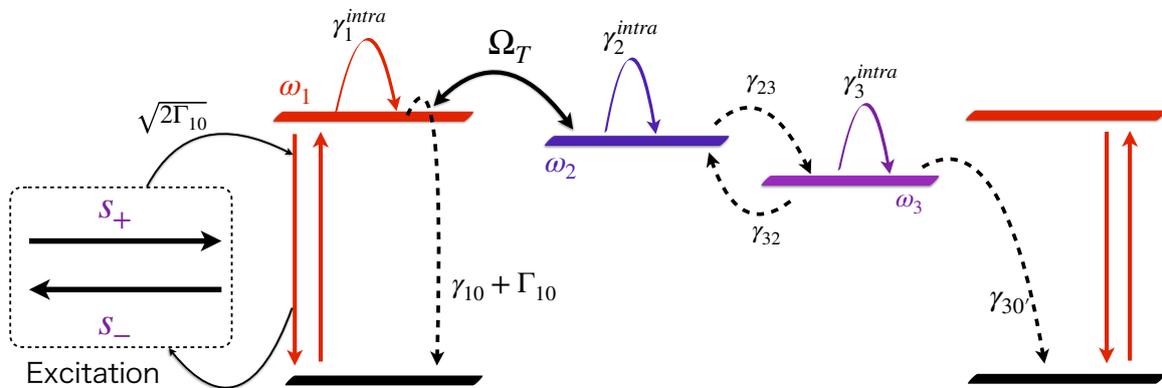


FIGURE 5.4 – Représentation schématique d'une période à 4 niveaux d'un QCD, assimilée à un système ouvert équivalent en interaction avec une source incidente d'amplitude s_+ .

On s'intéresse à l'évolution d'un système composé de quatre niveaux, par exemple une période d'un QCD (cf. figure 5.4). Les mécanismes d'absorption d'un photon se font entre les sousbandes 0 et 1, pour une fréquence de transition ω_1 . Les photo-électrons promus dans 1 transitent via les sousbandes 2 et 3 (situées aux énergies ω_2 et ω_3), jusqu'à l'extraction dans l'état $0'$ de la période suivante. En faisant l'hypothèse que les interactions inter-périodes sont négligeables (mis à part dans la transition optique), on applique des conditions périodiques : les sousbandes 0 et $0'$ représentent la même sousbande. Par ailleurs, la sousbande fondamentale étant fortement peuplée, sa population sera faiblement affectée par le transport : on ne l'intégrera pas explicitement dans le suivi de la dynamique du système. Seules les sousbandes susceptibles d'accueillir des excitations, ici 1, 2 et 3 seront explicitement suivies.

On choisit d'assimiler la période de QCD à un système ouvert équivalent, décrit par une matrice densité ρ . L'évolution de ρ est donnée par l'équation maîtresse de Lindblad :

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}(t), \rho(t)] + \sum_n \gamma_n \mathcal{L}(A_n, \rho) \quad (5.45)$$

Dans les sections suivantes, nous allons progressivement construire l'Hamiltonien \mathcal{H} , les opérateurs de sauts A_n et les différents termes qui composent $\sum_n \gamma_n \mathcal{L}(A_n, \rho)$. Pour simplifier les notations, on utilisera $\hbar = 1$.

Opérateurs création/annihilation

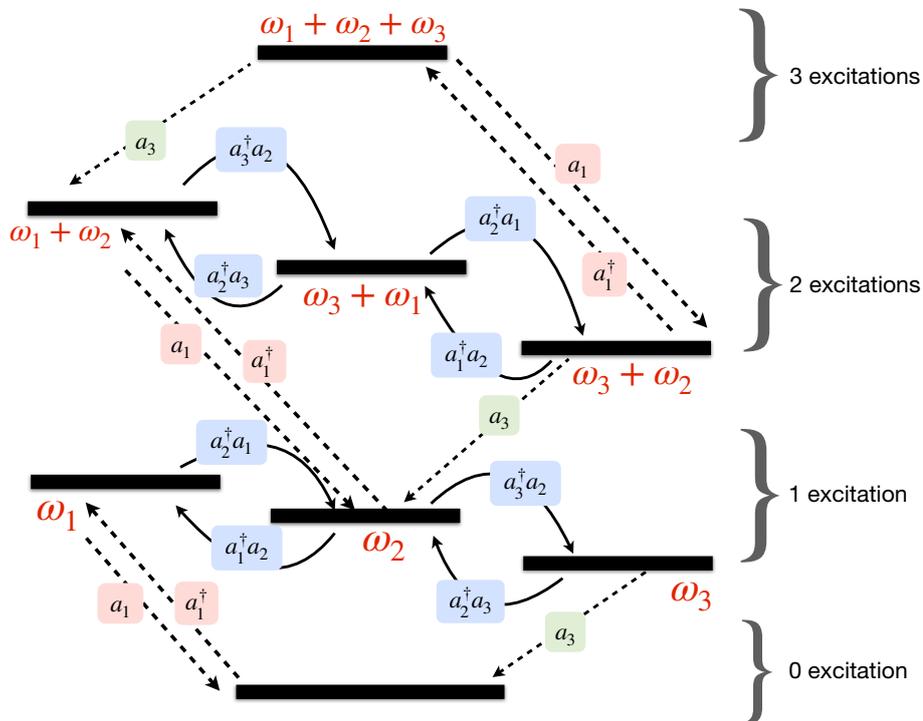


FIGURE 5.5 – Représentation schématisée des différents états accessibles au système présenté dans la figure 5.4. Les interactions principales entre les différents états du système sont représentées.

À chaque sousbande 1, 2 et 3, on associe un opérateur de création/annihilation a_i , correspondant au processus d'annihilation (a_i) ou de création (a_i^\dagger) d'un électron dans la sousbande i . En se plaçant en régime de faible excitation, on choisit de restreindre la description de chaque sousbande à deux états ($N_i = 2$, avec N_i la dimension du sous-système composé par la sousbande i) : la sousbande i peut être soit vide, soit remplie d'un seul électron. Les opérateurs a_i s'écrivent donc :

$$a_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \mathcal{I}d_2 \otimes \mathcal{I}d_2, \quad a_2 = \mathcal{I}d_2 \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \mathcal{I}d_2 \quad a_3 = \mathcal{I}d_2 \otimes \mathcal{I}d_2 \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.46)$$

La dimension du système total est donc donnée par $N = N_1 N_2 N_3 = 2^3$. Pour que le système respecte bien la condition de faible excitation, on devra s'assurer que la probabilité qu'il n'y ait pas d'excitations dans le système est largement supérieure à la probabilité d'être dans les $N-1$ autres états du système (3 états à une excitation dans une des trois sousbandes, 3 états à deux excitations réparties dans les trois sousbandes, 1 état à trois excitations réparties dans chacune des sousbandes, cf. Figure 5.5).

Ce choix de représentation suppose implicitement de ne pas suivre la dispersion en k des sousbandes : les sousbandes sont assimilées à des modes dans lesquels on peut accumuler des excitations sans discernement sur la nature de ces excitations.

Hamiltonien

L'Hamiltonien \mathcal{H} du système se décompose en trois contributions : l'Hamiltonien des sousbandes isolées \mathcal{H}_0 , l'Hamiltonien d'interaction tunnel \mathcal{H}_T (on suppose que seules les sousbandes 1 et 2 sont couplées de manière significatives) et l'Hamiltonien d'interaction avec la lumière $\mathcal{H}_L(t)$, qui décrit le processus de pompage de la transition ISB (on suppose que seule la transition $0 \rightarrow 1$ est pompée) :

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_T + \mathcal{H}_L(t) \quad (5.47)$$

$$= \sum_i \omega_i a_i^\dagger a_i + \Omega_T (a_1^\dagger a_2 + a_1 a_2^\dagger) + \Omega_L^* a_1^\dagger + \Omega_L a_1 \quad (5.48)$$

où $\Omega_L = \sqrt{2\Gamma_{10}} s_+ e^{i\omega t}$, avec Γ_{10} le taux de dissipation radiatif de la sousbande 1 vers la sousbande 0, et $|s_+|^2$ est la puissance de l'excitation incidente.

Évolution dissipative : modélisation de la diffusion inter-sousbande

La dynamique inter-sousbande provoquée par les mécanismes diffusifs (par exemple la diffusion assistée par les phonons LO) va être traitée comme une interaction entre l'environnement et le système, en utilisant les super-opérateurs de Lindblad \mathcal{L} . On distinguera deux types d'opérateurs de saut A_n :

1. Les opérateurs de saut entre les sousbandes 1, 2, 3 dont on suit explicitement la dynamique sont décrits par les opérateurs A_{ij} :

$$A_{ij} = a_i a_j^\dagger \quad i \neq j \quad (5.49)$$

$$A_{ji} = a_i^\dagger a_j \quad i \neq j \quad (5.50)$$

Les A_{ij} décrivent bien le passage d'un électron d'une sousbande i (annihilation d'un électron dans la sousbande i via a_i) vers une sousbande j (création d'un électron dans la sousbande j via a_j^\dagger).

2. Les opérateurs de saut entre une sousbande $i = 1, 2, 3$ et la sousbande fondamentale 0 :

$$A_{i0} = a_i \quad (5.51)$$

$$A_{0i} = a_i^\dagger \quad (5.52)$$

Puisque l'on ne suit pas explicitement la dynamique de la sousbande fondamentale, les opérateurs a_i et a_i^\dagger suffisent à décrire ces processus inter-sousbandes.

Pour ces deux types d'opérateurs de saut A_{ij} , on associe un dissipateur \mathcal{L} correspondant :

$$\gamma_{ij}\mathcal{L}[A_{ij}, \rho] = \gamma_{ij}(2A_{ij}\rho A_{ij}^\dagger - A_{ij}^\dagger A_{ij}\rho - \rho A_{ij}^\dagger A_{ij}) \quad (5.53)$$

où γ_{ij} est le taux total de diffusion inter-sousbande entre deux sousbandes i et j . Pour illustrer et comprendre les effets de ces termes de diffusion sur la dynamique du système, il est utile de les représenter sous une forme matricielle. Dans notre cas, $N = 2^3 = 8$, donc la matrice densité est de dimension 8×8 , ce qui rend la représentation matricielle compliquée. On restreint donc cette représentation à l'interaction entre l'état à une excitation dans la sousbande i et l'état à une excitation dans la sousbande j :

$$\mathcal{L}[A_{ij}, \rho] = 2A_{ij}\rho A_{ij}^\dagger - (A_{ij}^\dagger A_{ij}\rho + \rho A_{ij}^\dagger A_{ij}) \quad (5.54)$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2\rho_{ii} \end{bmatrix}}_{\text{Repopulation}} - \underbrace{\begin{bmatrix} 2\rho_{ii} & \rho_{ij} \\ \rho_{ji} & 0 \end{bmatrix}}_{\text{Dissipation}} \quad (\text{restreint à } i, j) \quad (5.55)$$

$(A_{ij}^\dagger A_{ij}\rho + \rho A_{ij}^\dagger A_{ij})$ est le terme de *dissipation* : il dissipe la population ρ_{ii} contenue dans la sousbande i à un taux $2\gamma_{ij}$ et amortit les cohérences entre les sousbandes i et j à un taux γ_{ij} ⁵. $2A_{ij}\rho A_{ij}^\dagger$ est le terme de *repopulation* : les électrons diffusés depuis la sousbande i sont ajoutés à la population de la sousbande j .

On comprend donc que les termes diagonaux de ces dissipateurs $\mathcal{L}[A_{ij}, \rho]$ décrivent un bilan de population classique, similaire aux équations de bilan de population décrites dans le chapitre 2 et 3 dans le cadre d'un modèle séquentiel de transport, tandis que les termes non-diagonaux décrivent le comportement quantique du système par l'amortissement des cohérences.

Termes de décohérence pure

La dynamique intra-sousbande décrit les processus de diffusion entre deux états k d'une même sousbande. Puisque notre modèle ne suit pas explicitement la dispersion dans l'espace des k des sousbandes, un saut A_{ii} intra-sousbande correspond à l'application successive d'un opérateur annihilation a_i et d'un opérateur création a_i^\dagger [122], i.e. l'opérateur population N_i :

$$A_{ii} = N_i = a_i^\dagger a_i \quad (5.56)$$

5. plus exactement, il diminue la probabilité ρ_{ii} pour le système d'être dans l'état où la sousbande i a une excitation et les autres sousbandes sont vides, et amortit les cohérences ρ_{ij} et ρ_{ji} entre ces deux états.

Le dissipateur \mathcal{L} correspondant est donc :

$$\gamma_i^{\text{intra}} \mathcal{L}[N_i, \rho] = \gamma_i^{\text{intra}} (2N_i \rho N_i^\dagger - N_i^\dagger N_i \rho - \rho N_i^\dagger N_i) \quad (5.57)$$

où γ_i^{intra} est le taux de dissipation intra-sousbande. De nouveau, il est utile d'utiliser une représentation matricielle du dissipateur \mathcal{L} , restreinte à l'interaction entre deux sousbandes i et j , pour appréhender les effets de ce super-opérateur sur la dynamique du système et notamment sur le couplage entre ces deux sousbandes :

$$\mathcal{L}[N_i, \rho] = 2N_i \rho N_i^\dagger - (N_i^\dagger N_i \rho + \rho N_i^\dagger N_i) \quad (5.58)$$

$$= \begin{bmatrix} 2\rho_{ii} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2\rho_{ii} & \rho_{ij} \\ \rho_{ji} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{restreint à } i, j) \quad (5.59)$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -\rho_{ij} \\ -\rho_{ji} & 0 \end{bmatrix} \quad (5.60)$$

Les termes de dissipation et de repopulation sont de formes similaires à l'équation (5.55), mais cette fois les termes diagonaux de population s'annulent, ne laissant que les termes non-diagonaux d'amortissement des cohérences. Le dissipateur intra-sousbande $\mathcal{L}[N_i, \rho]$ est donc un super-opérateur de pure décohérence, puisqu'il n'affecte pas l'évolution des populations. C'est l'ingrédient qui manquait à la théorie des modes couplés et qui permet d'exprimer explicitement l'influence des mécanismes intra-sousbandes sur l'évolution du système. On notera que si l'on a présenté ici une représentation matricielle restreinte à deux sousbandes, cet opérateur amortit toutes les cohérences reliées à la sousbandes i .

Les deux parties précédentes nous ont permis de comprendre les effets de dissipation et de décohérence des mécanismes *inter* et *intra*-sousbandes. En l'occurrence, les échanges de population sont régis par la dynamique inter γ^{inter} (nous verrons plus loin le rôle de l'interaction tunnel Ω_T), et l'amortissement des cohérences par $\gamma^{\text{inter}} + \gamma^{\text{intra}}$. Nous avons donc rempli notre premier objectif, qui consistait à dissocier les deux dynamiques pour bien distinguer leurs effets sur l'évolution du système. Si dans la littérature, on trouve des modèles de transport ISB en matrice densité [130, 131, 132, 133], ces modèles sont limités à l'interaction cohérente entre des sousbandes deux-à-deux et ne décrivent donc pas l'évolution des cohérences de *longues portées*, c'est-à-dire entre deux sousbandes qui ne sont couplées que par l'intermédiaire d'une tierce sousbande.

Système d'équations

Pour rester concis, on se restreint aux transitions inter-sousbandes prépondérantes (celles représentées sur la figure 5.4). Par conséquent, dans la cascade, l'interaction entre 1 et 2 est dominée par des effets tunnels, tandis que l'interaction entre 2 et 3 est dominée par la diffusion inter-sousbande. L'ensemble des transitions depuis les sousbandes 0 et 0' vers les états de la cascade sont également négligées.

Dans ce système modèle simple, on peut écrire explicitement les contributions de l'équation

maîtresse portant sur ρ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho = & \underbrace{-i[\mathcal{H}(t), \rho]}_{\text{Dynamique unitaire}} + \underbrace{(\gamma_{10} + \Gamma_{10})\mathcal{L}[a_1, \rho] + \gamma_{23}\mathcal{L}[a_3^\dagger a_2, \rho] + \gamma_{32}\mathcal{L}[a_2^\dagger a_3, \rho] + \gamma_{30'}\mathcal{L}[a_3, \rho]}_{\text{Dynamique inter-sousbande}} \\ & + \underbrace{\gamma_1^{\text{intra}}\mathcal{L}[a_1^\dagger a_1, \rho] + \gamma_2^{\text{intra}}\mathcal{L}[a_2^\dagger a_2, \rho] + \gamma_3^{\text{intra}}\mathcal{L}[a_3^\dagger a_3, \rho]}_{\text{Dynamique intra-sousbande}} \end{aligned} \quad (5.61)$$

avec $\mathcal{H}(t)$ l'Hamiltonien décrit en équation (5.47). En utilisant une représentation vectorielle de l'équation (5.61), on obtient un système d'équations différentielles d'ordre 1, de dimension $N \times N = 64$.

Comme nous l'avons déjà fait pour la CMT, nous allons écrire quelques équations représentatives du système d'équations, pour tenter d'en tirer une compréhension intuitive. En particulier, on s'intéresse aux populations ρ_{11} et ρ_{33} des sousbandes 1 et 3, et aux cohérences ρ_{10} (entre les sousbandes 1 et 0) et ρ_{12} (entre les sousbandes 1 et 2). Dans la suite, on néglige les termes liés à la dynamique à *plus d'une excitation* (par exemple, l'interaction entre l'état {une excitation dans 2 et zéro excitation dans 1 et 3} et l'état {une excitation dans 1 et 2 et zéro dans 3}), puisqu'on se place dans le régime de faible excitation. Lorsqu'on résoudra numériquement le système de l'équation (5.61), on gardera ces termes et on vérifiera qu'ils sont effectivement négligeables.

1.

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -2(\gamma_{10} + \Gamma_{10})\rho_{11} - i(\Omega_L^* \rho_{01} - \Omega_L \rho_{10}) - i\Omega_T(\rho_{12} - \rho_{21}) \quad (5.62)$$

L'équation (5.62) donne un bon aperçu du transport dans la structure. Les fluctuations de population de la sousbande 1 sont le résultat du bilan de flux entre les électrons pompés via le terme de courant optique $i(\Omega_L^* \rho_{01} - \Omega_L \rho_{10})$, les électrons dissipés via les termes de dissipation non-radiative et radiative $2(\gamma_{10} + \Gamma_{10})\rho_{11}$, et ceux extraits de manière cohérente par le couplage tunnel avec la sousbande 2 $i\Omega_T(\rho_{12} - \rho_{21})$. On remarque que la structure de cette équation (5.62) est très similaire à l'équation (4.68) du chapitre 4, établie dans le cadre de la théorie des modes couplés (au détail près que le système était différent puisque le pompage optique se faisait donc dans le mode de cavité).

2.

$$\frac{d\rho_{33}}{dt} = -(2\gamma_{30'} + 2\gamma_{32})\rho_{33} + 2\gamma_{23}\rho_{22} \quad (5.63)$$

L'équation (5.63) portant sur les variations de population de la sousbande 3 est un simple bilan sur les flux de courants particulières, similairement aux équations (2.36) présentées dans le cadre du modèle séquentiel du chapitre 2 et 3.

3.

$$\frac{d\rho_{10}}{dt} = -(\gamma_{01} + \Gamma_{01} + \gamma_1^{\text{intra}})\rho_{10} - i\omega_1\rho_{10} - i(\Omega_L^* \rho_{00} - \Omega_L \rho_{11} + \Omega_T \rho_{20}) \quad (5.64)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{12}}{dt} = & -(\gamma_{23} + \gamma_{10} + \Gamma_{10} + \gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_2^{\text{intra}})\rho_{12} + i(\omega_2 - \omega_1)\rho_{12} \\ & -i\Omega_T(\rho_{00} - \rho_{11}) - i\Omega_L \rho_{02} \end{aligned} \quad (5.65)$$

Enfin, les équations (5.64) et (5.65) illustrent que les cohérences ρ_{10} et ρ_{12} sont amorties à la fois par la dynamique inter et intra-sousbande. Dans le cas de ρ_{12} , la cohérence tunnel entre les sousbandes 1 et 2, on constate que l'intégralité des mécanismes inter et intra des *deux* sousbandes participe à l'amortissement de cette cohérence.

Résolution

On se tourne maintenant vers la résolution de l'équation (5.61). Pour retirer la dépendance temporelle explicite contenue dans les termes de pompage de l'Hamiltonien $\mathcal{H}_L(t)$, on se place dans le référentiel du champ tournant par un changement de variables :

$$\sigma_{ii} = \rho_{ii} \quad (5.66)$$

$$\sigma_{ij} = \rho_{ij} e^{i\omega t} \quad (5.67)$$

$$\sigma_{ji} = \rho_{ji} e^{-i\omega t} \quad (5.68)$$

La matrice densité pivotée σ suit une équation maîtresse équivalente, similaire à l'équation (5.61), mais d'Hamiltonien modifié $\tilde{\mathcal{H}}$, désormais indépendant du temps :

$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_i (\omega - \omega_i) a_i^\dagger a_i + \Omega_T (a_1^\dagger a_2 + a_1 a_2^\dagger) + \sqrt{2\Gamma_{10s_+}} (a_1 + a_1^\dagger) \quad (5.69)$$

Les dissipateurs s'appliquent désormais sur σ plutôt que ρ mais restent inchangés. On résout le système pour une solution $\sigma_{\text{s.s.}}$ de la matrice densité en régime stationnaire $\frac{d\sigma_{\text{s.s.}}}{dt} = 0$. On peut calculer la valeur moyenne de tout observable décrit par un opérateur O via l'équation (5.15) : $\langle O \rangle = \text{Tr}(O\sigma_{\text{s.s.}})$. En particulier, l'absorption totale dans le système \mathcal{A} s'exprime à partir des puissances dissipées par les sousbandes 1 et 3 vers l'extérieur :

$$\boxed{\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_3 = 2\gamma_{10} \frac{\langle a_1^\dagger a_1 \rangle}{|s_+|^2} + 2\gamma_{30'} \frac{\langle a_3^\dagger a_3 \rangle}{|s_+|^2}} \quad (5.70)$$

Le photo-courant \mathcal{J}_E généré est lui simplement proportionnel à la puissance dissipée dans la sousbande fondamentale $0'$ de la période suivante :

$$\boxed{\mathcal{J}_E = 2\gamma_{30'} \langle a_3^\dagger a_3 \rangle} \quad (5.71)$$

La fonction de transfert $\text{TF}(\omega)$ entre la puissance utile dissipée (i.e. le photo-courant) et la puissance totale dissipée par le système est donc :

$$\boxed{\text{TF}(\omega) = \frac{\mathcal{A}_3}{\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_3}} \quad (5.72)$$

Expression du courant tunnel

Une dernière grandeur intéressante à calculer est l'expression du courant tunnel \mathcal{J}_T [85] :

$$\mathcal{J}_T = i\Omega_T (\langle a_2^\dagger a_1 \rangle - \langle a_2 a_1^\dagger \rangle) \quad (5.73)$$

Dans notre cas particulier, on peut montrer à partir du système d'équations précédent :

$$\mathcal{J}_T = \frac{2\Omega_T^2 \sum \gamma}{(\omega_2 - \omega_1)^2 + (\sum \gamma)^2} (\langle a_1^\dagger a_1 \rangle - \langle a_2^\dagger a_2 \rangle) + 2\Re \left[\frac{i\Omega_T \sqrt{2\Gamma_{10} s} \langle a_2^\dagger \rangle}{(\omega_2 - \omega_1) - i(\sum \gamma)} \right] \quad (5.74)$$

où $\sum \gamma$ recense l'ensemble des contributions décohérentes dans l'interaction tunnel entre les sousbandes 1 et 2 :

$$\sum \gamma = \underbrace{\gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_{10} + \Gamma_{10}}_{\text{Élargissement sousbande 1}} + \underbrace{\gamma_2^{\text{intra}} + \gamma_{23}}_{\text{Élargissement sousbande 2}} \quad (5.75)$$

L'expression du courant tunnel obtenue est l'équivalent en formalisme matrice densité de l'expression de \mathcal{J}_T obtenue dans le cas de la théorie des modes couplés Eq. (4.77) (dans un système différent, sans action de la cavité). \mathcal{J}_T se dissocie en deux contributions, une contribution de *courant tunnel séquentiel*, trouvée habituellement dans la littérature [83, 84], et une contribution de *courant délocalisé*, qui exprime la capacité du système à transporter du courant entre des états qui ne sont pas directement couplés (ici entre la sousbande fondamentale 0 et la sousbande d'extraction 2). Dans nos QCDs en couplage faible, on s'attend à ce que cette seconde contribution soit négligeable par rapport au terme de courant tunnel séquentiel. Par rapport à l'expression obtenue dans le cadre de la CMT, les élargissements distinguent explicitement les contributions inter et intra-sousbandes. On vérifiera par ailleurs numériquement que l'expression du courant extrait par la structure est indépendante de l'interface considérée, c'est-à-dire que $\mathcal{J}_E = \mathcal{J}_T$.

Dans la section suivante, nous illustrerons tous les résultats précédents en réalisant une étude paramétrique de l'influence des dynamiques intra et inter-sousbandes sur les spectres d'absorption et de photo-réponse du système de la figure 5.4.

5.3.2 Étude paramétrique de l'influence des dynamiques intra-sousbandes et inter-sousbandes

Influence des termes intra-sousbandes

On s'intéresse à deux structures modèles théoriques, composées de 4 niveaux par périodes : la structure 1 (Figure 5.6-[A1]), dont la sousbande 1 est faiblement couplée avec la sousbande 2 ($\Omega_T = \frac{\sum \gamma}{10}$) et la structure 2 (Figure 5.6-[A2]), dont la sousbande 1 est suffisamment couplée avec la sousbande 2 ($\Omega_T = \frac{\sum \gamma}{2}$) pour être représentée dans une base délocalisée. La position de la sousbande extractrice 2 est légèrement désaccordée par rapport à la sousbande 1 ($\omega_2 \approx 0.98\omega_1$).

L'objectif de cette partie étant d'étudier l'influence relative des termes intra-sousbandes par rapport aux termes inter-sousbandes, on fixe la condition suivante : *la somme des contributions dissipatives et décohérentes $\sum \gamma$ agissant sur les sousbandes 1 et 2 doit rester constante*. On fixe donc :

$$\sum \gamma = \underbrace{\gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_{10} + \Gamma_{10}}_{\text{Élargissement sousbande 1}} + \underbrace{\gamma_2^{\text{intra}} + \gamma_{23}}_{\text{Élargissement sousbande 2}} = \frac{\omega_1}{10} \quad (5.76)$$

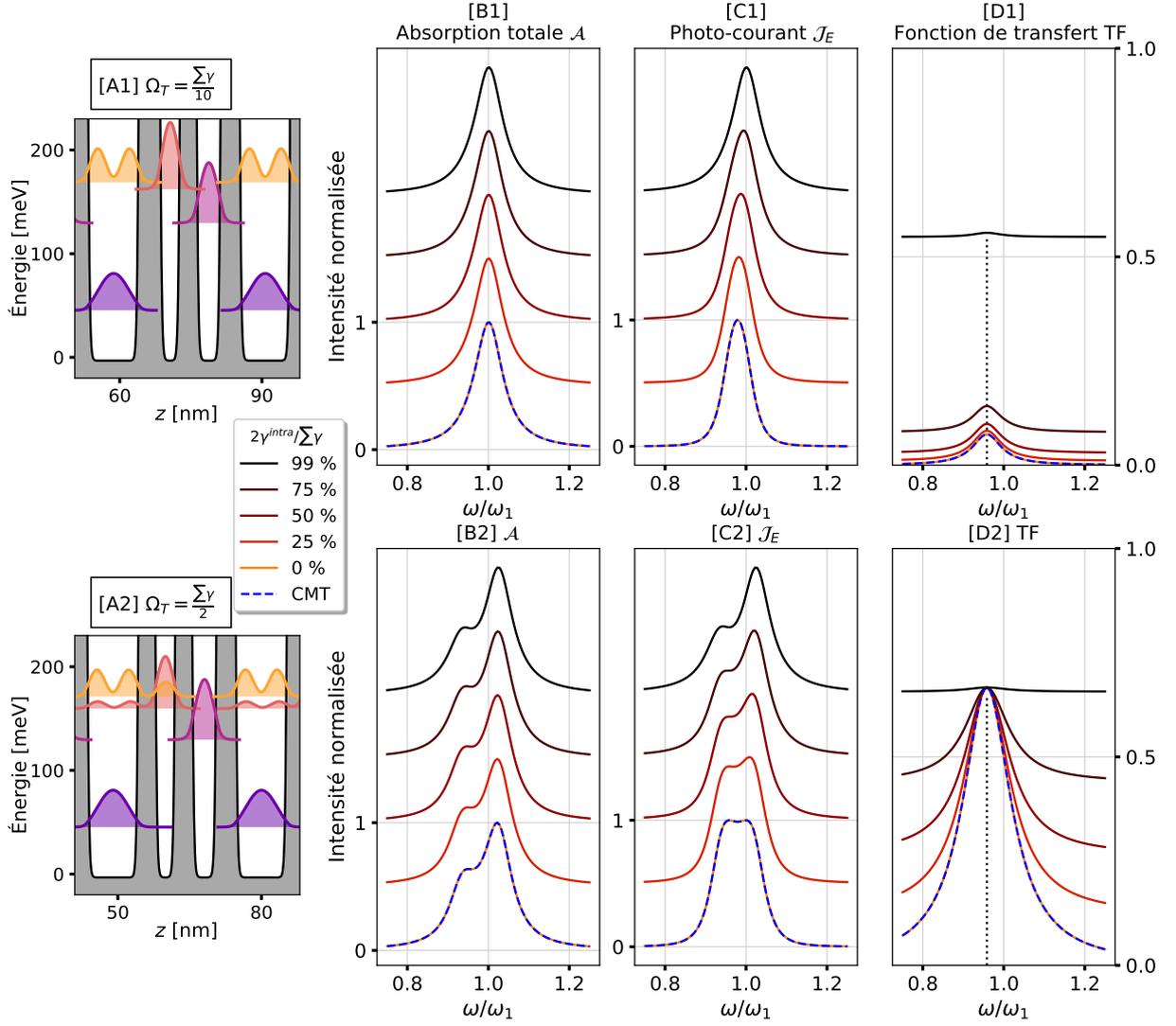


FIGURE 5.6 – Étude paramétrique de l’influence des termes intra-sousbandes, pour deux situations de couplage tunnel (**ligne 1**) $\Omega_T = \sum \gamma / 10$ (**ligne 2**) $\Omega_T = \sum \gamma / 2$, sur [B] l’absorption \mathcal{A} [C] le photo-courant \mathcal{J}_E [D] la fonction de transfert $\text{TF} = \mathcal{A}_1 / (\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_3)$. Les calculs en formalisme matrice densité sont effectués avec le support de la librairie Python Qutip [66]. Les résultats obtenus dans le cadre de la théorie des modes couplés sont superposés (courbes bleues pointillées).

On ajustera ensuite la proportion des termes intra-sousbandes ($\gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_2^{\text{intra}}$) par rapport à l’élargissement total $\sum \gamma$ des deux sousbandes, fixé constant. Mécaniquement, la proportion des termes inter-sousbandes variera dans le sens opposé des termes intra-sousbandes. Pour les calculs qui suivent, on fixe également que le rapport entre les processus inter-sousbandes des deux sousbandes doit être constant et que la dynamique intra-sousbande est aussi efficace dans les deux sousbandes 1 et 2 :

$$\gamma_{23} = \gamma_{10} + \Gamma_{10} \quad (5.77)$$

$$\gamma_1^{\text{intra}} = \gamma_2^{\text{intra}} \quad (5.78)$$

De telles conditions garantissent que les élargissements spectraux des deux sousbandes seront constants quel que soit le rapport $(\gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_2^{\text{intra}})/\sum \gamma$ étudié. Dans la Figure 5.6, pour les deux structures 1 et 2 (qui représentent deux situations de couplage Ω_T différentes), on trace l'absorption totale $\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2$ ([B1] et [B2]), le photo-courant \mathcal{J}_E ([C1] et [C2]) et la fonction de transfert TF ([D1] et [D2]), pour 5 rapports de dynamique intra $(\gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_2^{\text{intra}})/\sum \gamma$. On fait le choix dans cette partie de tracer nos spectres en amplitude normalisée : seules les formes spectrales nous intéressent ici. On étudiera dans la partie suivante les effets d'amplitude.

Dans les deux situations de couplage, la forme spectrale de l'absorption \mathcal{A} reste inchangée quel que soit le rapport $2\gamma^{\text{intra}}/\sum \gamma$. Pour la situation de faible couplage, le maximum de photo-courant se déplace de $\omega = \omega_2$ vers ω_1 lorsqu'on augmente la proportion de termes intra-sousbandes. Les effets sont plus marqués pour la situation de fort couplage : l'écart en énergie et l'amplitude relative des pics associés aux deux sousbandes varient fortement avec la proportion de termes intra. Pour une faible proportion, les allures spectrales sont également plus abruptes.

Ces différences s'interprètent avec la fonction de transfert TF. *Lorsque la proportion de termes intra-sousbande augmente, la fonction de transfert s'aplatit* : d'une fonction lorentzienne piquée en absence de termes intra-sousbande, elle passe progressivement à une fonction quasi-constante pour 99% de proportion de termes intra-sousbandes. Seule la gamme de fréquence proche de la résonance $\omega = \omega_2$ conserve une allure piquée.

Dans les deux situations de couplage, les résultats d'absorption, de photo-courant et de fonction de transfert sont comparés aux calculs d'une situation équivalente modélisée en théorie des modes couplés (où, nécessairement, $\gamma_1^{\text{intra}} = \gamma_2^{\text{intra}} = 0$). Les résultats de la CMT sont tracés en pointillés bleus : ils se superposent parfaitement aux courbes calculées via la matrice densité et une proportion $2\gamma^{\text{intra}}/\sum \gamma = 0$. Comme nous l'avons déjà vu dans le cas d'un unique résonateur, *la CMT et le formalisme matrice densité coïncident lorsque les termes de décohérence purs ne sont pas inclus*.

On comprend ici qu'en ajustant l'efficacité de la dynamique intra-sousbande relativement à la dynamique inter-sousbande, on peut passer d'une situation type "théorie des modes couplés" (fonction de transfert piquée, donc formes spectrales différentes entre le photo-courant et l'absorption), à une situation type "modèle séquentiel" (fonction de transfert scalaire \mathcal{P}_E , la probabilité d'extraction, donc mêmes formes spectrales entre absorption et photo-courant). Effectivement, lorsqu'on augmente cette proportion de termes intra-sousbande, on *séquentialise* le transport : après chaque transition inter-sousbande, les électrons se localisent dans la sousbande d'arrivée, avant d'avoir la possibilité d'entreprendre une autre transition inter-sousbande.

Il nous reste à étudier les effets de la dynamique inter-sousbande sur l'amplitude de la fonction de transfert pour s'assurer du bon comportement du système.

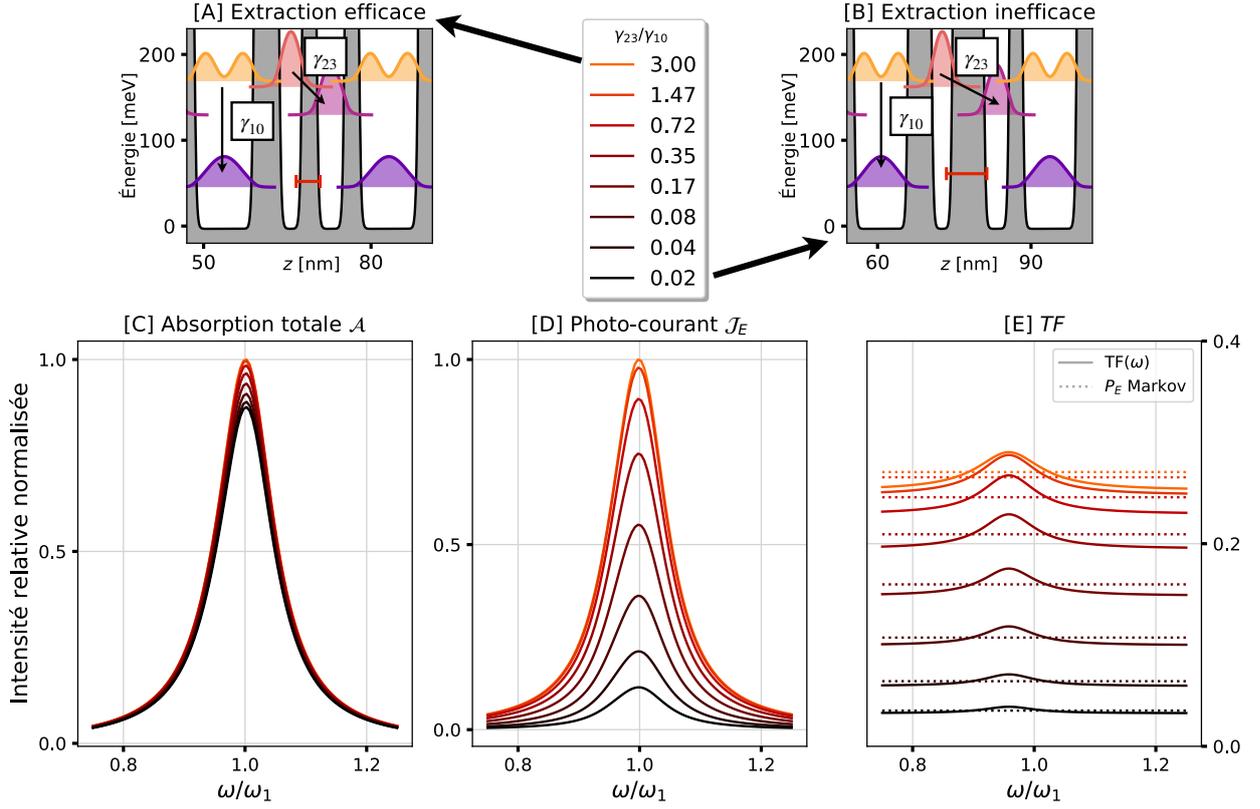


FIGURE 5.7 – Étude paramétrique de l’influence des termes inter-sousbandes, sur [C] l’absorption \mathcal{A} [D] le photo-courant \mathcal{J}_E [E] la fonction de transfert $TF = \mathcal{A}_1 / (\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_3)$. Les calculs en formalisme matrice densité sont effectués avec le support de la librairie Python Qutip [66]. La probabilité d’extraction \mathcal{P}_E calculée à partir d’un modèle séquentiel de transport est superposée (courbes pointillées) aux courbes de fonction de transfert TF. [A] et [B] sont des illustrations de structures qui correspondraient à des rapports d’extraction γ_{23}/γ_{10} respectivement efficaces et inefficaces.

Influence des termes inter-sousbandes

On s’intéresse de nouveau à un système modèle théorique constitué de 4 niveaux (figure 5.7-[A] et [B]). Les niveaux 1 et 2 sont faiblement couplés ($\Omega_T = \sum \gamma/10$). Pour ces calculs, on prend une situation réaliste de rapport de dynamique inter/intra-sousbande et on fixe des élargissements constants :

$$\gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_2^{\text{intra}} = 0.9 \sum \gamma \quad (5.79)$$

$$\sum \gamma = \gamma_1^{\text{intra}} + \gamma_{10} + \Gamma_{10} + \gamma_2^{\text{intra}} + \gamma_{23} = \frac{\omega_1}{10} \quad (5.80)$$

où 90% des élargissements sont donc dus aux mécanismes intra-sousbandes. Dans un système réel, on s’attend à ce que l’efficacité interne du dispositif augmente lorsque le rapport γ_{23}/γ_{10} augmente, et on souhaite ici vérifier que ces tendances sont bien respectées dans notre modèle. Pour cela, on va comparer l’amplitude de la fonction de transfert de l’équation (5.72) avec le calcul de la probabilité d’extraction \mathcal{P}_E , calculée dans le cadre d’un modèle

séquentiel et d'une chaîne de Markov (cf. section 2.5.1). La matrice de passage M utilisée prend la forme :

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_{1 \rightarrow 0} & 0 & p_{1 \rightarrow 2} & 0 & 0 \\ 0 & p_{2 \rightarrow 1} & 0 & p_{2 \rightarrow 3} & 0 \\ 0 & 0 & p_{3 \rightarrow 2} & 0 & p_{3 \rightarrow 0'} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.81)$$

où la probabilité de passage de l'état i vers j s'exprime via :

$$p_{i \rightarrow j} = \frac{\gamma_{ij}}{\sum_p \gamma_{ip}} \quad (5.82)$$

où les taux ISB utilisés sont ceux détaillés dans la section 5.3.1, exception faite pour les taux de transition tunnel γ_{12} et γ_{21} exprimés uniquement à l'aide de la contribution tunnel séquentiel de \mathcal{J}_T :

$$\gamma_{1 \rightarrow 2} = \gamma_{2 \rightarrow 1} = \frac{\Omega_T^2 \sum \gamma}{(\omega_2 - \omega_1)^2 + (\sum \gamma)^2} \quad (5.83)$$

On note que Γ_{10} n'intervient pas dans les contributions de $p_{1 \rightarrow 0}$ et $p_{1 \rightarrow 2}$.

La figure 5.7 présente les résultats du calcul de l'absorption totale \mathcal{A} [C], du photocourant \mathcal{J}_E [D] et la fonction de transfert TF [E] pour plusieurs rapports entre le taux d'extraction depuis la sousbande 2 γ_{23} et le taux de dissipation γ_{10} vers la sousbande fondamentale. Au calcul de la fonction de transfert, on a donc superposé la probabilité d'extraction \mathcal{P}_E calculée dans un modèle séquentiel.

On remarque que si l'absorption totale \mathcal{A} , en amplitude et en élargissement, est faiblement affectée par les variations des taux inter-sousbandes, le photo-courant \mathcal{J}_E suit bien l'évolution escomptée : lorsque le rapport γ_{23}/γ_{10} augmente, son amplitude augmente. Pour le rapport de dynamique inter/intra-sousbande utilisé Eq.(5.80), la fonction de transfert TF(ω) calculée est quasi-scalaire. En l'occurrence, *dans cette situation où la dynamique intra-sousbande est dominante par rapport à la dynamique inter-sousbande, la fonction de transfert TF(ω) coïncide avec la fonction de transfert scalaire \mathcal{P}_E calculée dans un modèle séquentiel du transport*, pour tous les rapports γ_{23}/γ_{10} . De nouveau, ces résultats confirment que l'ajout explicite de termes de décohérence intra-sousbande atténuent la contribution délocalisée du transport tunnel (Eq.(5.74)) dans la structure, et re-séquentialise le transport. Dans de telles conditions, le transport peut être à nouveau modélisé simplement via le bilan des flux particulières γ_{ij} et la probabilité d'extraction \mathcal{P}_E .

L'étude de ce système simple, apparenté à un QCD fonctionnant en régime de couplage faible, nous a donc permis de faire deux *jonctions* :

1. Une jonction entre le formalisme matrice densité et la théorie des modes couplés, possible lorsque les termes intra-sousbandes de décohérence pure ne sont pas pris en compte dans l'équation maîtresse de Lindblad ($\sum \gamma^{\text{intra}} \ll \sum \gamma$). Une telle situation s'associe à une fonction de transfert lorentzienne, centrée autour du niveau extracteur, dont la forme piquée est une conséquence de la présence des termes de *courant délocalisé* dans l'expression du courant tunnel \mathcal{J}_T .

2. Une jonction entre le formalisme matrice densité et un formalisme de transport séquentiel, possible lorsque les termes intra-sousbandes de décohérence pure dominant la dynamique inter-sousbande ($\sum \gamma^{\text{intra}} \approx \sum \gamma$).

Jusqu'à présent, la décohérence intra-sousbande γ_{intra} apparaît comme le principal degré de liberté qui permet de passer d'une fonction de transfert scalaire à une fonction de transfert dépendante de la fréquence ω et piquée. Dans la partie suivante, nous verrons comment l'intensité du couplage lumière-matière Ω intervient également sur cette fonction de transfert.

5.4 Équation maîtresse quantique d'un QCD en régime de couplage fort

L'objectif de cette partie est d'étendre la description de notre QCD en matrice densité au couplage avec un mode électromagnétique de micro-cavité.

5.4.1 Description du système

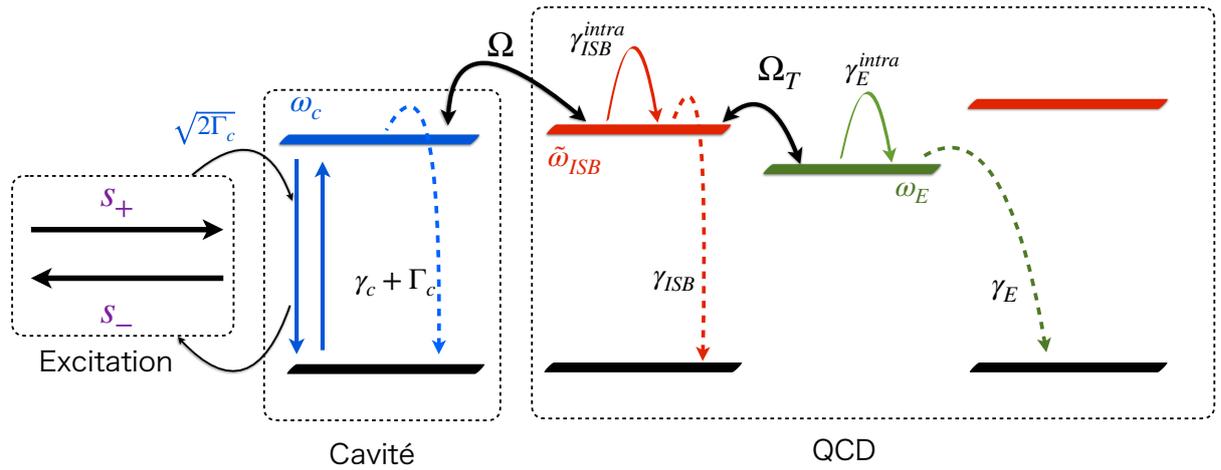


FIGURE 5.8 – Représentation schématique du système {QCD + cavité} en couplage fort.

Hamiltonien

Au mode électromagnétique de cavité, on associe un opérateur a_c d'annihilation et a_c^\dagger de création, qui correspond à la dissipation et l'injection d'un photon dans la cavité (figure 5.8). Dans le chapitre 4, nous avons vu que le mode de cavité ne se couple qu'à l'état brillant [30, 19] de la transition ISB. Associé à cet état brillant, on avait défini les opérateurs b^\dagger et b de création/annihilation d'excitations dans l'état brillant :

$$b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{1\mathbf{k}}^\dagger c_{0\mathbf{k}} \quad (5.84)$$

à partir des opérateurs $c_{1\mathbf{k}}$ et $c_{0\mathbf{k}}$ électronique. On rappelle que l'introduction de b permet de passer d'une description fermionique du système (via les opérateurs $c_{i\mathbf{k}}$) à une description bosonique, sous réserve de faible excitation. En incorporant les effets d'interaction électron-électron (cf. section 4.1.1), on peut définir les opérateurs p et p^\dagger de création/annihilation du plasmon ISB. L'Hamiltonien \mathcal{H}_{LM} lumière-matière du sous-système {cavité+ plasmon ISB}, s'écrit dans l'approximation du champ tournant :

$$\mathcal{H}_{LM} = \tilde{\omega}_{\text{ISB}} p^\dagger p + \omega_c a_c^\dagger a_c + \Omega (a_c^\dagger p + a_c p^\dagger) \quad (5.85)$$

où :

$$\Omega = \frac{\omega_P}{2} \sqrt{f_w} \quad (5.86)$$

$$\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = \sqrt{\omega_{\text{ISB}}^2 + \omega_P^2} \quad (5.87)$$

Si cet Hamiltonien est bien défini⁶, toute la difficulté de modélisation repose dans la bonne description de l'interaction entre le mode plasmonique ISB et les états électroniques fermioniques des sousbandes de la cascade du QCD, impliqués dans l'extraction d'un photocourant. Ces difficultés sont abordées extensivement dans les publications [30, 33]. En particulier, les auteurs y font une remarque cruciale : l'utilisation d'opérateurs *bosoniques* associés aux excitations polaritoniques est pertinente dans la modélisation des processus optiques (par exemple, pour modéliser les spectres de réflectivité d'un système en couplage fort) ; en revanche, la modélisation du transport doit passer par l'utilisation de l'Hamiltonien électronique et d'opérateurs *fermioniques* (les opérateurs $c_{i,\mathbf{k}}$). La modélisation des processus d'injection entre les états polaritoniques (bosoniques) et électroniques (fermioniques) ne peut se faire sans rester dans une base des états fermioniques.

Dans la suite, on fait un choix de modélisation très réducteur : on va traiter la sousbande d'extraction de la même manière qu'on traite le mode de cavité et le mode plasmonique ISB, à l'aide d'opérateurs a_E et a_E^\dagger *bosoniques*. Ce choix de s'affranchir de la complexité d'interaction entre les états bosoniques et fermioniques est donc une simplification de modélisation. Notre modèle s'apparentera plus à une description *phénoménologique* qu'à un traitement rigoureux et extensif. En particulier, notre modèle n'incorporera pas explicitement l'interaction avec les états noirs. Cependant, la simplicité de ce modèle sera en partie compensée par sa facilité d'utilisation et d'interprétation.

L'Hamiltonien \mathcal{H} total de notre système {cavité + plasmon ISB + extracteur}, soumis au pompage optique du mode cavité par une onde incidente de fréquence ω et de puissance $|s_+|^2$ s'écrit donc sous la forme (dans le référentiel du champ tournant) :

$$\mathcal{H} = (\omega - \tilde{\omega}_{01}) p^\dagger p + (\omega - \omega_c) a_c^\dagger a_c + (\omega - \omega_E) a_E^\dagger a_E + \underbrace{\Omega (a_c^\dagger p + a_c p^\dagger)}_{\text{Couplage lumière-matière}} + \underbrace{\Omega_T (a_E^\dagger p + a_E p^\dagger)}_{\text{Couplage tunnel}} + \underbrace{\sqrt{2\Gamma_c} s_+ (a_c + a_c^\dagger)}_{\text{Pompage optique}} \quad (5.88)$$

où Γ_c désigne le taux de dissipation radiatif de la cavité. L'interaction entre le mode plasmonique ISB et le mode extracteur sera donc traitée comme un couplage tunnel cohérent, d'amplitude Ω_T .

6. on a tout de même fait des approximations importantes : sousbandes parallèles, transitions verticales pour l'absorption.

Équation maîtresse de Lindblad

On choisit donc de représenter ce système {cavité + plasmon ISB + extracteur} sous la forme d'un système ouvert équivalent, décrit par la matrice densité ρ et suivant l'équation d'évolution :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho = & -i[\mathcal{H}, \rho] + \gamma_{\text{ISB}}\mathcal{L}[p, \rho] + \gamma_E\mathcal{L}[a_E, \rho] + \gamma_c\mathcal{L}[a_c, \rho] \\ & + \gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}}\mathcal{L}[p^\dagger p, \rho] + \gamma_E^{\text{intra}}\mathcal{L}[a_E^\dagger a_E, \rho] \end{aligned} \quad (5.89)$$

En régime stationnaire, on résout l'équation (5.89), et on calcule les différentes grandeurs intéressantes du système, à savoir l'absorption totale $\mathcal{A} = \mathcal{A}_c + \mathcal{A}_{\text{ISB}} + \mathcal{A}_E$, l'absorption du QCD $\mathcal{A}_{\text{QCD}} = \mathcal{A}_{\text{ISB}} + \mathcal{A}_E$ et le photo-courant \mathcal{J}_E :

$$\mathcal{A} = 2\gamma_c \frac{\langle a_c^\dagger a_c \rangle}{|s_+|^2} + 2\gamma_{\text{ISB}} \frac{\langle p^\dagger p \rangle}{|s_+|^2} + 2\gamma_E \frac{\langle a_E^\dagger a_E \rangle}{|s_+|^2} \quad (5.90)$$

$$\mathcal{A}_{\text{QCD}} = 2\gamma_{\text{ISB}} \frac{\langle p^\dagger p \rangle}{|s_+|^2} + 2\gamma_E \frac{\langle a_E^\dagger a_E \rangle}{|s_+|^2} \quad (5.91)$$

$$\mathcal{J}_E = 2\gamma_E \langle a_E^\dagger a_E \rangle \quad (5.92)$$

Comme précédemment, la fonction de transfert $\text{TF}(\omega)$ est définie comme le rapport de la puissance utile dissipée par le mode extracteur sur la puissance totale dissipée par le QCD :

$$\text{TF}(\omega) = \frac{\mathcal{A}_E}{\mathcal{A}_{\text{ISB}} + \mathcal{A}_E} \quad (5.93)$$

Courant tunnel

On calcule le courant tunnel à partir de :

$$\mathcal{J}_T = i\Omega_T [\langle a_E^\dagger p \rangle - \langle a_E p^\dagger \rangle] \quad (5.94)$$

$$= 2\Omega_T \Re[i\langle a_E^\dagger p \rangle] \quad (5.95)$$

où \Re désigne la partie réelle. Après quelques manipulations, on montre que :

$$\mathcal{J}_T = \frac{2\Omega_T^2 (\sum_{\text{QCD}} \gamma)}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_E)^2 + (\sum_{\text{QCD}} \gamma)^2} (\langle p^\dagger p \rangle - \langle a_E^\dagger a_E \rangle) + \Re \left[\frac{2i\Omega_T \Omega}{(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_E) - i(\sum_{\text{QCD}} \gamma)} \langle a_c a_E^\dagger \rangle \right] \quad (5.96)$$

où $\sum_{\text{QCD}} = \gamma_E + \gamma_E^{\text{intra}} + \gamma_{\text{ISB}} + \gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}}$. L'expression est très similaire à l'équation qui avait été trouvée dans le cadre de la théorie des modes couplés, Eq. (4.77). Les amplitudes des modes de la CMT sont remplacées par les valeurs moyennes des opérateurs création/annihilation en formalisme matrice densité :

CMT	Matrice densité
(amplitudes des modes)	(valeur moyenne des opérateurs)
$ a_E ^2 = a_E^* a_E$	$\longrightarrow \langle a_E^\dagger a_E \rangle$
$ n_{\text{ISB}} ^2 = a_{\text{ISB}}^* a_{\text{ISB}}$	$\longrightarrow \langle p^\dagger p \rangle$
$a_c a_E^*$	$\longrightarrow \langle a_c a_E^\dagger \rangle$

Par rapport à la CMT, les élargissements des fonctions lorentziennes intègrent désormais les contribution intra-sousbandes. En revanche, la structure du courant tunnel est la même : elle se décompose en deux contributions, l’une qu’on reconnaît être la contribution séquentielle, l’autre étant une contribution délocalisée, car faisant intervenir les cohérences *longues portées* entre le mode de cavité et le mode extracteur. On vérifie numériquement que le courant d’extraction \mathcal{J}_E est bien strictement égal au courant tunnel \mathcal{J}_T .

5.4.2 Étude paramétrique de l’influence du couplage lumière-matière

La figure 5.9 trace les différentes grandeurs d’intérêt \mathcal{A} , \mathcal{A}_{QCD} , \mathcal{J}_E et TF associées à la résolution de l’équation (5.89). On se place également dans une situation réaliste de rapport entre la dynamique inter et intra-sousbande au sein du QCD :

$$\gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}} + \gamma_E^{\text{intra}} = 0.9 \sum_{\text{QCD}} \gamma \quad (5.97)$$

où $\sum_{\text{QCD}} \gamma$ représente l’intégralité des contributions inter et intra-sousbande au sein du QCD. Ces grandeurs sont tracées pour différentes valeurs d’amplitude de couplage lumière-matière Ω , jusqu’à 10% de la valeur de la transition ISB. Les résonances de cavité ω_c et d’extracteur ω_E sont légèrement décalées par rapport à la transition ISB ω_1 :

$$\omega_c = 1.05\omega_{\text{ISB}}, \quad \omega_E = 0.95\omega_{\text{ISB}} \quad (5.98)$$

À cette étude paramétrique, on superpose les résultats d’un système en l’absence de cavité (système déjà étudié dans les sections précédentes, cf. figure 5.4). Dans ce système en couplage faible, le pompage optique s’effectue donc directement dans la transition ISB ($\Gamma_{\text{ISB}} \neq 0$, $\Omega = 0$, $\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = \omega_{\text{ISB}}$).

Quelques observations sur ces résultats numériques :

- Les pics associés aux états polaritoniques sont plus espacés pour l’absorption totale \mathcal{A} que pour l’absorption dans le QCD.
- À cause du désaccord entre ω_c et ω_{ISB} , les spectres calculés pour une situation $\Omega \rightarrow 0$ ne coïncident pas avec les spectres calculés en absence de cavité : ils sont légèrement décentrés vers la résonance ω_c .
- l’observation principale se fait sur l’évolution de la fonction de transfert en fonction de l’amplitude Ω du couplage lumière-matière. Lorsque le ratio $\Omega/\omega_{\text{ISB}}$ augmente, le caractère “piqué” de la fonction de transfert est exalté. En couplage faible, lorsque $\Omega \ll \omega_{\text{ISB}}$ la fonction de transfert est quasi-scalaire : elle coïncide avec la fonction de transfert calculée dans le cadre d’un QCD qui n’est pas en cavité. Lorsque le couplage Ω augmente, la ligne de base de la fonction de transfert s’abaisse progressivement, et l’amplitude de son pic augmente : augmenter Ω permet à la fonction de transfert de se rapprocher d’une allure lorentzienne.

Là où la dynamique intra-sousbande γ^{intra} permet de retrouver une description séquentielle du transport dans nos QCDs, ce qui se matérialise par la convergence de la fonction de transfert vers une fonction scalaire lorsque la proportion de termes intra-sousbandes augmente, la dynamique engendrée par le couplage lumière-matière Ω exalte le caractère *délocalisé*

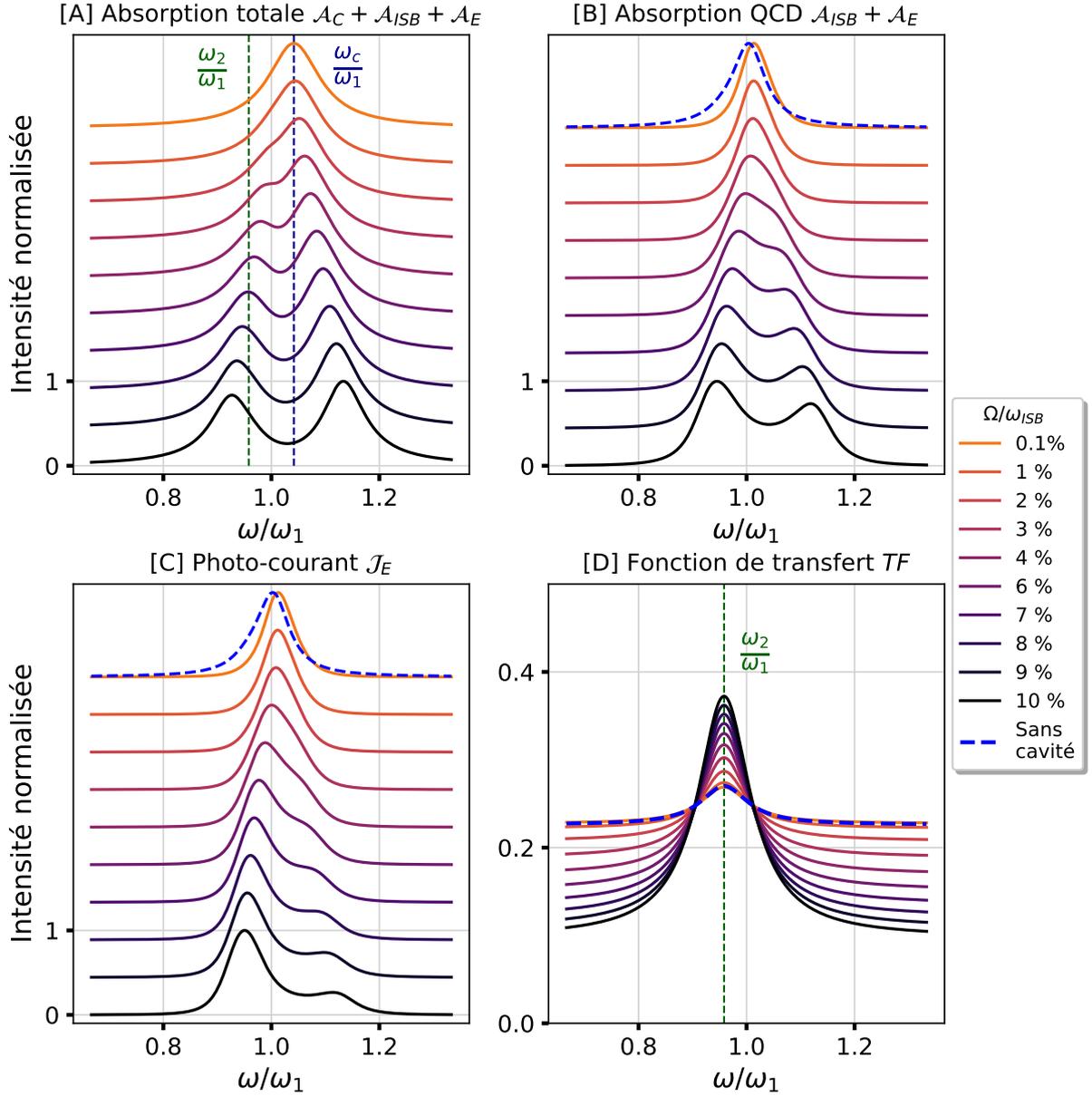


FIGURE 5.9 – Étude paramétrique de l’influence du couplage lumière-matière Ω sur l’absorption totale \mathcal{A} , l’absorption du QCD \mathcal{A}_{QCD} , le photo-courant \mathcal{J}_E et la fonction de transfert. Les calculs sont réalisés pour un faible couplage tunnel $\Omega_T = \sum \gamma/10$ entre l’état ISB et l’extracteur. Une situation de calcul en l’absence de cavité optique est superposée aux résultats (traits pointillés bleus). Les calculs sont réalisés avec le support de la librairie Python Qutip [66].

du transport. Ces observations s’interprètent avec l’expression du courant tunnel \mathcal{J}_T de l’équation (5.96). Les cohérences $\langle a_c a_E^\dagger \rangle$ de longue portée, qui décrivent le transport cohérent et délocalisé au sein du système, vont être nécessairement renforcées par l’augmentation de ce couplage cohérent Ω .

Cette partie nous permet de comprendre pourquoi nous avons obtenu une bonne description par la CMT des données expérimentales de photo-courant dans le chapitre 4, malgré l'absence de description des termes intra-sousbandes. En effet, la théorie des modes couplés prédit *par défaut* une fonction de transfert lorentzienne, donc “piquée”. Si cette description n'est pas adaptée à une situation de couplage faible, où le transport séquentiel induit une fonction de transfert scalaire, la figure 5.9 nous montre qu'elle est en revanche tout à fait adaptée à une situation de couplage fort, où l'amplitude du couplage lumière-matière permet de retrouver cette allure spectrale piquée, malgré la présence des termes de décohérence intra-sousbande. La théorie des modes couplés manquait cependant d'une capacité à distinguer amplitude du transport inter-sousbande et élargissement, incapacité à laquelle nous avons remédié avec notre nouveau modèle.

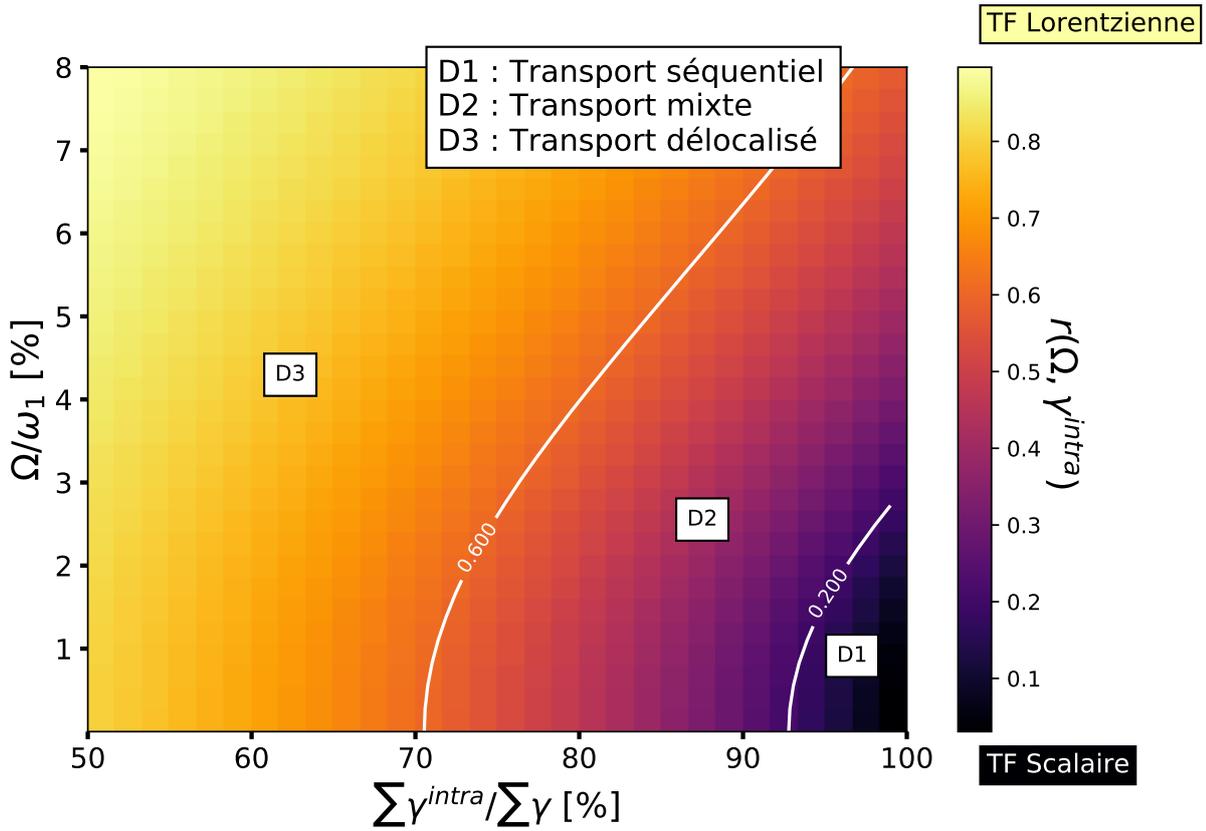


FIGURE 5.10 – Étude paramétrique 2D sur le critère $r(\Omega, \gamma^{\text{intra}})$ défini équation (5.99). Une couleur claire correspond à une fonction de transfert *piquée*, proche d'une allure lorentzienne, (transport délocalisé $D3$) et une couleur sombre correspond à une fonction de transfert proche d'une fonction scalaire (transport séquentiel $D1$). Le domaine intermédiaire $D2$ correspond à un régime de transport mixte.

Domaines de validité des différents modèles abordés

Dans la section 5.3.2, nous avons étudié la capacité du modèle matrice densité à passer continûment d'une description séquentielle à une description délocalisée du transport, via l'ajustement de la proportion des termes intra-sousbandes γ_{intra} . Dans la section 5.4.2,

nous avons étudié la capacité de ce même modèle à passer continûment d'une description séquentielle du transport à une description délocalisée du transport, via l'ajustement de l'amplitude du couplage lumière-matière Ω .

Dans cette section, nous allons explorer les domaines de validité des différents modèles abordés jusqu'ici (modèle séquentiel, modèle CMT, modèle matrice densité), en fonction de γ_{intra} et de Ω . Pour cela, nous utiliserons un critère basé sur l'allure spectrale de la fonction de transfert : nous avons en effet compris qu'une fonction de transfert piquée décrit un transport délocalisé (bien décrit par la CMT) tandis qu'une fonction scalaire décrit un transport séquentiel. On utilisera $r(\Omega, \gamma^{\text{intra}})$, qu'on définit par :

$$r(\Omega, \gamma^{\text{intra}}) = \frac{\text{Max}\{\text{TF}(\omega)\} - \text{Min}\{\text{TF}(\omega)\}}{\text{Max}\{\text{TF}(\omega)\}} \quad (5.99)$$

$r = 1$ signifie donc que la fonction de transfert calculée avec un couple $\Omega, \gamma^{\text{intra}}$ est une lorentzienne, et $r = 0$ que TF est une fonction scalaire. La figure 5.10 récapitule les résultats de cette exploration paramétrique.

On distingue trois domaines : $D1$, $D2$ et $D3$. Leurs limites sont fixées à des valeurs de r arbitraires.

- Domaine $D1$: transport séquentiel, fonction de transfert scalaire ($\text{TF}(\omega) \approx \mathcal{P}_E$), correctement décrit par le modèle des sousbandes thermalisées discuté chapitre 2.
- Domaine $D3$: transport délocalisé, fonction de transfert lorentzienne, formes spectrales correctement décrites par la théorie des modes couplés.
- Domaine $D2$: domaine intermédiaire, qui intègre les différentes contributions du transport. $D1$, $D2$ et $D3$ sont correctement décrits par le formalisme matrice densité et une équation maîtresse de Lindblad.

5.4.3 Application à des mesures de photo-réponse sous tension

Dans cette partie, nous allons finalement confronter le nouveau modèle basé sur la matrice densité aux données expérimentales de photo-courant sous tension que nous avons présentées en début de chapitre (Figure 5.1). L'objectif est de réaliser un fit global sur l'ensemble des données de photo-courant sous champ électrique à notre disposition, en utilisant la résolution de l'équation (5.89) en régime stationnaire pour évaluer le photo-courant (5.92).

Dans notre procédure de fit, nous devons trouver la valeurs des paramètres suivants :

Cavité :	$\omega_c(s)$	γ_c	$\Gamma_c(p)$
Plasmon ISB :	ω_{ISB}	γ_{ISB}	$\gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}}$
Extracteur :	$\omega_E(F)$	$\gamma_E(F)$	γ_E^{intra}
Couplages :	ω_P	Ω_T	

- Les paramètres de cavité sont indépendants du champ électrique F appliqué sur le dispositif. Ils vont cependant être contraints via les dépendances aux paramètres géométriques des cavités, comme nous l'avions déjà fait dans le cadre de la théorie des modes couplés :

$$\omega_c(s) = \frac{\pi c_0}{n_{\text{eff}} s}, \quad \Gamma_c = \frac{\alpha_c}{p} \quad (5.100)$$

- Les paramètres ISB sont considérés indépendants du champ électrique F appliqués (la transition ISB est une transition verticale dans un même puits quantique, qui dépend donc très marginalement de la tension). ω_{ISB} et $\gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}}$ sont laissés libres mais communs à l'ensemble des données. On contraint le taux de dissipation non-radiatif γ_{ISB} du plasmon au taux de transition ISB depuis la sousbande excitée vers la sousbande fondamentale, calculé via METIS :

$$\gamma_{\text{ISB}} = 0.66 \text{ meV} \quad (5.101)$$

- Les paramètres reliés à l'extracteur sont dépendants du champ électrique F : l'extracteur est désaligné par rapport à la transition ISB lorsque l'on applique un champ sur la structure. En première approche, le désalignement est linéaire avec le champ appliqué :

$$\omega_E(F) = \alpha_F F + \omega_E^0 \quad (5.102)$$

Ce désalignement est calculable via METIS, et sera contraint aux valeurs suivantes :

$$\alpha_F = 1.12 \text{ meV}/(\text{kV}\cdot\text{cm}^{-1}) \quad \omega_E^0 = 124 \text{ meV} \quad (5.103)$$

Par ailleurs le désalignement de la cascade avec le champ électrique modifie la valeur du taux d'extraction effectif $\gamma_E(F)$. Nous ferons deux études : dans l'étude présentée dans cette partie, à chaque valeur de champ F_i correspondant à une mesure effectuée, nous laisserons le paramètre $\gamma_E(F_i)$ libre pour le fit ($\gamma_E(F_i)$ sera évidemment indépendant des paramètres s et p de cavité). En annexe [H], on présente une seconde étude, où toutes les valeurs de $\gamma_E(F_i)$ sont contraintes aux résultats de calculs de METIS.

- la fréquence plasma sera laissée libre, et le couplage tunnel sera contraint à la valeur calculée en base localisée par METIS $\Omega_T = 4.2 \text{ meV}$.

Finalement, seuls les paramètres suivants sont laissés libres pour le fit global de nos données de photo-courant sous champ :

Cavité :	n_{eff}	γ_c	α_c
Plasmon ISB :	ω_{ISB}	$\gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}}$	
Extracteur :	γ_E^{intra}	$\gamma_E(F_i)$	
Couplage :	ω_P		

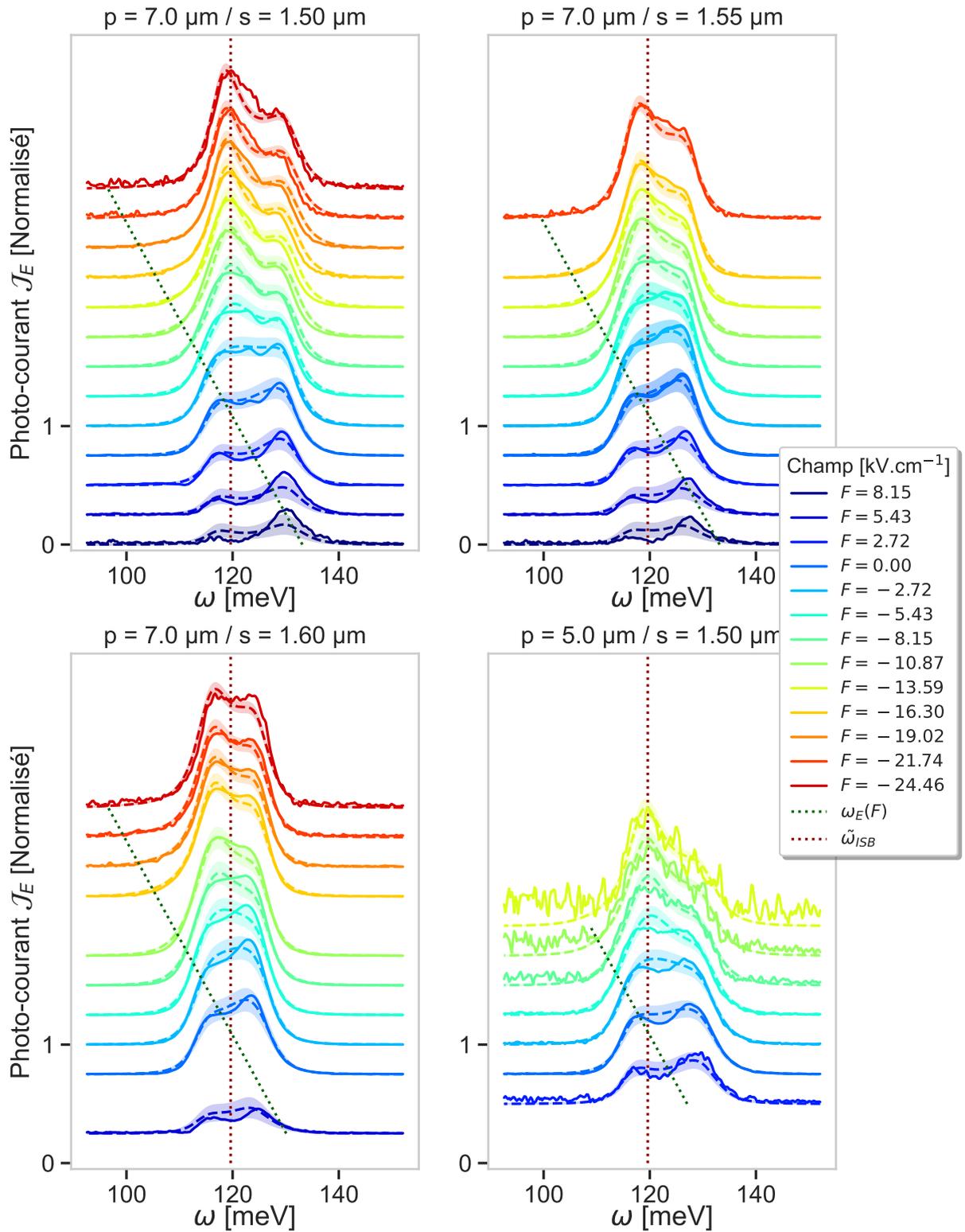


FIGURE 5.11 – Résultats de la procédure de fit par un modèle matrice densité (traits pointillés) sur des mesures de photo-courant (traits pleins), pour différents champs appliqués F et géométries de réseaux d’antennes patches (p, s). Aux courbes de photo-courant calculées et mesurées, on superpose la dispersion du mode extracteur ω_E (traits pointillés verts) et la position du mode plasmonique ISB $\tilde{\omega}_{ISB}$. Les erreurs retournées par la procédure de fit sur les paramètres sont propagées sur les spectres (zones pleines, cf. Annexe [E] pour le détail des calculs de ces erreurs).

Les spectres de photo-courant calculés à partir des paramètres retournés par le fit sont comparés aux données expérimentales figure 5.11. On obtient un accord quantitatif sur l'ensemble des triplets (p, s, F). En particulier, deux tendances importantes sont reproduites avec les variations d'alignement $\omega_E - \omega_{\text{ISB}}$: l'amplitude globale des spectres et le renversement d'amplitude relative entre les pics des deux branches polaritoniques.

a. Fit photo-courant sous champ ($T = 78$ K)	
n_{eff}	3.220 ± 0.001
γ_c (meV)	3.67 ± 0.01
α_c (meV. μm^2)	43.5 ± 2.3
ω_{ISB} (meV)	117.1 ± 0.1
$\gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}}$ (meV)	2.5 ± 0.1
γ_E^{intra} (meV)	8.8 ± 0.1
ω_P (meV)	24.2 ± 0.1

TABLE 5.1 – Paramètres retournés par le fit global des données de photo-courant sous champ et un modèle matrice densité.

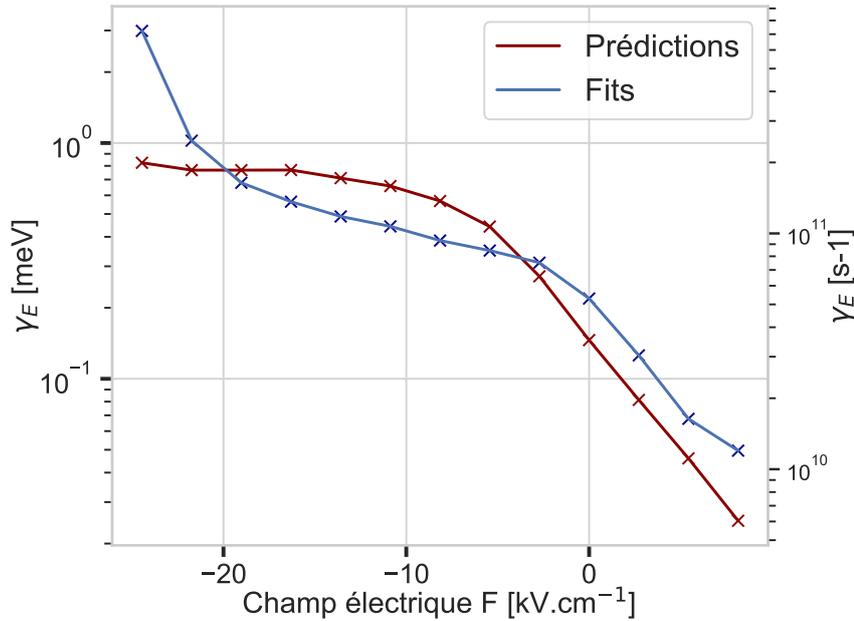


FIGURE 5.12 – Taux d'extraction $\gamma_E(F)$ retournés par la procédure de fit par un modèle matrice densité (courbe bleue) et calculés via la structure de bande (courbe rouge).

Les paramètres résultants du fit sont présentés dans le tableau 5.1. Les valeurs retournées sont cohérentes avec les fits précédents de théorie des modes couplés. En particulier, $\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_{\text{ISB}}^{\text{intra}} = 3.1$ meV correspond bien à l'élargissement trouvé dans le fit de la CMT (cf. tableau 4.2). Les valeurs de taux d'extraction sont tracés dans la figure 5.12 et comparées aux valeurs calculées par l'intermédiaire de METIS : on obtient le bon ordre de grandeur ($\gamma_E < 1$ meV) et les tendances d'évolution sont relativement bien reproduites (diminution de γ_E pour des

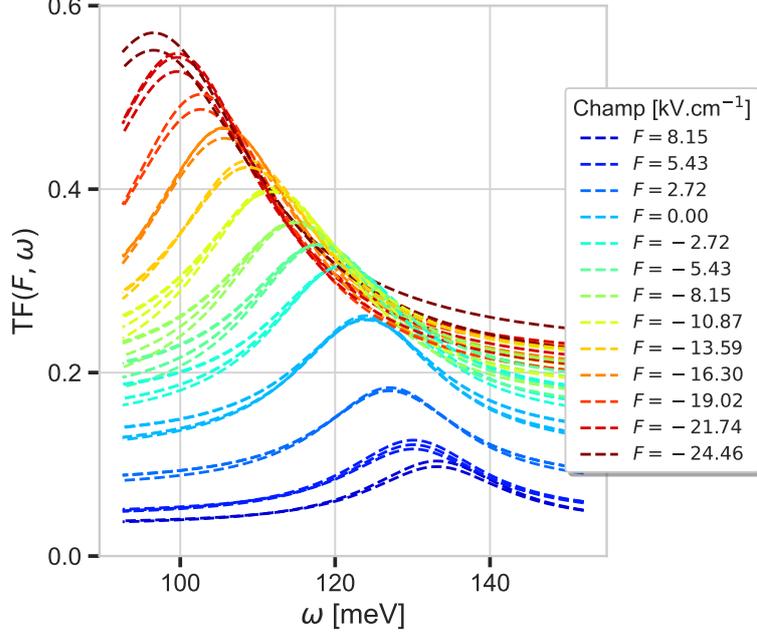


FIGURE 5.13 – Fonctions de transfert TF extraites des résultats de fit via un modèle matrice densité, pour plusieurs valeurs de champ électrique F appliqué. Les résultats pour les différents couples p, s de géométrie du réseau d’antennes patches sont superposés pour illustrer la faible dépendance de la fonction de transfert vis à vis des paramètres de la la cavité.

champs $F > 0$, rupture de pente autour $F = -4\text{kV.cm}^{-1}$). Des résultats issus d’un procédure de fit où les taux d’extraction $\gamma_E(F)$ sont contraints aux valeurs prédites par METIS se trouvent en Annexe [H]. Par ailleurs l’ordre de grandeur de $\gamma_E(F) + \gamma_E^{\text{intra}}$ coïncide avec la valeur de γ_E qui avait été trouvée en théorie des modes couplés. L’erreur élevée sur le paramètre de dispersion des pertes radiatives α_c s’interprète par la faible quantité de données sur p , et le faible impact de Γ_c sur des spectres de photo-réponse.

En revanche, on constate que notre modèle est incapable de décrire le troisième pic présent dans les mesures ($p = 7\mu\text{m}$, $s = 1.5, 1.55\mu\text{m}$) et situé autour de $\omega = 123\text{ meV}$. Si les auteurs de [25] ont assimilé ce pic à la transition ISB pour des résultats de réflectivité, dans ces résultats de photo-courant, il ne coïncide pas avec les valeurs $\omega_{\text{ISB}} = 117.1\text{ meV}$ et $\tilde{\omega}_{\text{ISB}} = 119.6\text{ meV}$ retournées par le fit. Par ailleurs, contraindre ω_{ISB} à 123 meV aboutit à de mauvais résultats de fit.

Enfin, la figure 5.13-[a] trace les fonctions transfert TF calculées pour différentes tensions. Les fonctions de transfert calculées pour des cavités différentes sont superposées : les paramètres p, s affectent marginalement les fonctions de transfert.

Cette étude confirme que c’est bien l’influence de l’extracteur (la cascade électronique du QCD) et son alignement relatif par rapport à la transition ISB qui gouvernent l’amplitude globale des spectres et l’amplitude relative des pics des branches polaritoniques. En appliquant un champ électrique sur la structure, on est donc capable d’extraire sélectivement

des excitations depuis un état polaritonique vers la cascade électronique (Figure 5.14). Cette capacité d'extraction se matérialise par la forme *piquée* de la fonction de transfert et l'espacement 2Ω entre les pics polaritoniques : une fonction de transfert plus fine et un couplage plus fort permettraient une meilleure sélectivité des polaritons ω_+ ou ω_- . Les résultats sont à nuancer par la quantité de données expérimentales à notre disposition : dans la situation étudiée, on se trouve au commencement du couplage fort. Un couplage Ω plus important ferait peut-être apparaître les limites des approximations utilisées.

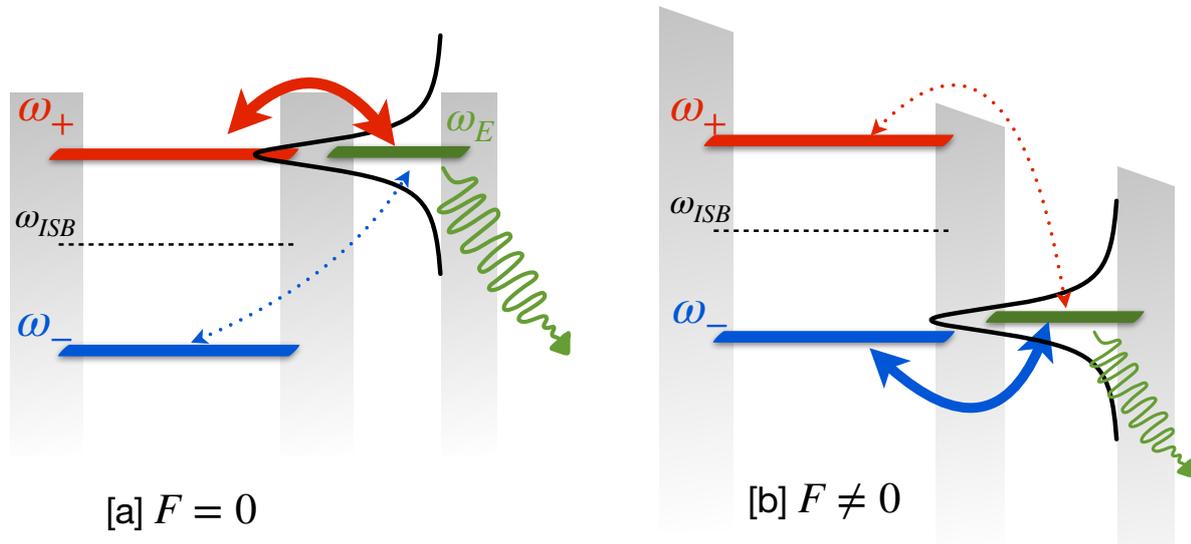


FIGURE 5.14 – [a] Représentation schématique de l'extraction sélective de l'état polaritonique *haut* : l'extracteur ω_E est aligné avec ω_+ . La fonction de transfert piquée favorise l'extraction des excitations polaritoniques $+$ générées par le pompage optique. [b] En appliquant un champ électrique F sur la structure on désaligne l'extracteur, jusqu'à l'aligner avec l'état polaritonique *bas*. Ce sont cette fois les excitations polaritoniques $-$ qui sont extraites sélectivement.

5.5 Bilan

Dans ce chapitre, pour répondre aux lacunes de modélisation de la théorie des modes couplés, nous avons développé un formalisme portant sur l'évolution de systèmes quantiques ouverts en interaction avec leur environnement, basé sur la matrice densité et l'équation maîtresse quantique de Lindblad. Dans les premières parties, nous avons extensivement discuté les différences entre les deux modèles développés jusqu'ici (théorie des modes couplés et modèle séquentiel du transport) avec ce nouveau modèle matrice densité. En particulier, il est apparu qu'il était possible de passer d'un modèle à l'autre en ajustant la proportion de termes intra-sousbandes γ^{intra} , à l'origine d'effets de pure décohérence.

En appliquant notre formalisme matrice densité et équation maîtresse de Lindblad à un QCD en régime de couplage fort lumière-matière, nous avons étendu notre problème à une dimension supplémentaire : le couplage Ω lumière-matière. Une étude paramétrique nous a permis de comprendre que ce couplage Ω permet de contre-balancer les effets décohérents

de la dynamique intra-sousbande : d'un transport séquentiel en couplage faible, on peut progressivement passer à un transport délocalisé en couplage fort en augmentant l'amplitude du couplage Ω . Cet antagonisme entre les effets cohérents du couplage lumière-matière et décohérents des processus intra-sousbandes a été extensivement exploré sur une large gamme ($\gamma^{\text{intra}}, \Omega$) : en étudiant l'allure spectrale de la fonction de transfert, nous avons pu mettre en évidence plusieurs domaines où la nature du transport est fondamentalement différente. Cette analyse nous a notamment permis de comprendre pourquoi, malgré l'absence de modélisation des termes intra-sousbandes, la théorie des modes couplés permet de reproduire fidèlement les spectres expérimentaux (normalisés) de photo-courant.

Pour éprouver ce modèle matrice densité, nous l'avons confronté à des mesures de photo-courant d'un QCD en couplage fort sous champ électrique. Ces mesures mettent en avant l'impact de l'alignement entre les états polaritoniques et les niveaux extracteurs, à la fois sur les allures spectrales (amplitudes relatives des pics polaritoniques) et l'amplitude globale de ces spectres. La capacité du modèle à distinguer les élargissements spectraux de l'amplitude d'extraction, via la distinction entre les termes intra et inter-sousbandes, nous a permis de reproduire quantitativement les données expérimentales. De plus, les paramètres retournés par la procédure de fit sont cohérents avec les paramètres imposés lors de la conception des dispositifs.

Finalement, cette étude nous a permis de comprendre qu'en déplaçant l'extracteur via un champ électrique sur la structure, ce qui mécaniquement décentre la fonction de transfert TF (dont la forme *piquée* est exaltée par l'intensité du couplage fort lumière-matière), on peut *extraire sélectivement des excitations depuis les états polaritoniques vers la cascade électronique*. Ces résultats renforcent donc les conclusions du chapitre précédent : il est possible d'extraire directement des excitations depuis les états polaritoniques, vers la cascade électronique. En l'occurrence, il n'est pas nécessaire d'intégrer explicitement les états noirs dans la modélisation pour reproduire quantitativement les résultats expérimentaux.

Conclusion et perspectives

Dans ce manuscrit, nous avons étudié la question du transport électronique dans les détecteurs à cascade quantique fonctionnant dans le moyen-infrarouge, dans différents régimes d'intensité de couplage lumière-matière.

Le chapitre 2 nous a permis de présenter extensivement notre modélisation du transport en régime de couplage faible, qui repose principalement sur l'hypothèse des sousbandes thermalisées et une vision *séquentielle* du transport. On a vu que ce modèle et les différentes évolutions qui ont été implémentées durant ce travail de thèse permettent de reproduire quantitativement les différentes métriques expérimentales des détecteurs à cascade quantique : absorption, photo-courant et courant d'obscurité principalement.

Dans le chapitre 3, nous avons mis à contribution ce modèle séquentiel du transport pour la conception optimisée de détecteurs à cascade quantique. Les différentes étapes de ce processus de conception ont été explicitement détaillées : conception de l'environnement électromagnétique (ici des antennes patches), conception optimisée des puits optiques, de la cascade d'extraction et des contacts aux bords de la zone active. Ce chapitre illustre donc le savoir-faire du laboratoire dans la conception de composants opto-électroniques performants, robustes et prédictifs.

Le chapitre 4 s'est tourné vers l'étude du régime de couplage fort lumière-matière dans les détecteurs inter-sousbandes. Dans un premier temps, nous avons présenté l'origine des modes polaritoniques et des états noirs, ces états non-couplés à la lumière qui détériorent les performances dans les dispositifs émetteurs. Nous avons ensuite caractérisé optiquement (par des mesures de réflectivité) et photo-électriquement (par des mesures de photo-courant) un détecteur à cascade quantique en régime de couplage fort. En corrélant ces mesures avec un modèle de transport basé sur le formalisme semi-classique de la théorie des modes couplés, nous avons mis en évidence une extraction tunnel directement depuis les états polaritoniques vers la cascade électronique, sans impliquer les états noirs. Ce formalisme a notamment permis de mettre en évidence la nature *délocalisée* du transport en régime de couplage fort, qui résulte de l'expression de cohérences de longues portées entre les états électroniques de la cascade et du mode électromagnétique de cavité. Si le détecteur à cascade quantique s'est donc révélé être une plateforme adaptée à l'étude fondamentale du régime de couplage fort, nous avons cependant montré dans ce chapitre qu'il ne bénéficiait pas de gain de performances d'obscurité lorsqu'il fonctionnait dans ce régime. En effet, nous avons constaté que l'augmentation du dopage injecté dans les puits optiques (pour augmenter l'intensité du couplage lumière-matière) engendre l'activation d'un mécanisme d'obscurité (non-modélisé par notre modèle de transport séquentiel) : le courant d'obscurité augmente drastiquement, au delà des prédictions de conception, au détriment des performances du détecteur.

Le chapitre 5 introduit un dernier modèle de transport, basé sur le formalisme matrice

densité et l'assimilation d'un QCD à un système quantique ouvert. En intégrant explicitement les termes de décohérence intra-sousbande, et en ajustant leur amplitude relativement à l'intensité du couplage lumière-matière, ce modèle quantique du transport permet d'établir une jonction entre les formalismes développés jusqu'ici : la théorie des modes couplés et le modèle séquentiel du transport apparaissent comme des situations asymptotiques des rapports d'amplitude entre couplage et décohérence intra-sousbande. En comparant ce modèle à des mesures expérimentales de photo-courant, nous avons notamment mis en évidence l'extraction sélective d'excitations depuis les états polaritoniques : en ajustant le positionnement relatif de la cascade d'extraction avec un mode polaritonique (par exemple en ajustant la tension appliquée aux bornes du dispositif), il est possible d'extraire sélectivement des polaritons.

Ces travaux de modélisation ouvrent la voie vers une meilleure compréhension du transport dans les dispositifs inter-sousbandes en régime de couplage fort. S'il apparaît que dans les *détecteurs* inter-sousbandes, il n'est pas nécessaire d'inclure explicitement les états noirs dans notre modèle de transport pour reproduire les données expérimentales (autrement dit, les états noirs ne participent pas de manière prépondérante à l'extraction), il est envisagé que cela soit nécessaire dans le cas d'un processus d'*injection*. À condition de rajouter la modélisation explicite de ces états, nous estimons que le modèle de transport en matrice densité développé dans ce manuscrit peut être extrapolé à l'étude de dispositifs inter-sousbandes émetteurs. L'application de ce modèle permettrait notamment l'exploration paramétrique du mécanisme d'injection, et par conséquent l'élaboration de stratégies expérimentales à mettre en œuvre pour contourner les effets délétères des états noirs.

Par ailleurs, les mauvais résultats de performances reportés dans ce manuscrit pour les QCDs en couplage fort doivent être pondérés par la faible quantité de données expérimentales à notre disposition. Une campagne expérimentale paramétrique sur le dopage est actuellement en cours : elle nous permettra de combler la lacune de modélisation sur le mécanisme d'obscurité activé à fort dopage. La bonne maîtrise de ce mécanisme ouvrira la voie à la conception optimisées de structures plus dopées ($n_{2D} \approx 1e12 \text{ cm}^{-2}$).

Annexe A

Courant d'obscurité dans une structure QWIP en couplage fort

A.1 Problématique

Les structures QWIP en régime de couplage fort lumière-matière doivent être conçues différemment des structures QWIP habituelles, en couplage faible : la sousbande haute de la transition ISB ne doit plus être placée en résonance avec le continuum, mais un peu plus bas dans le puits, à une énergie Δ (cf. figure A.1). Le courant d'obscurité $\mathcal{J}_{\text{dark}}$ associé à

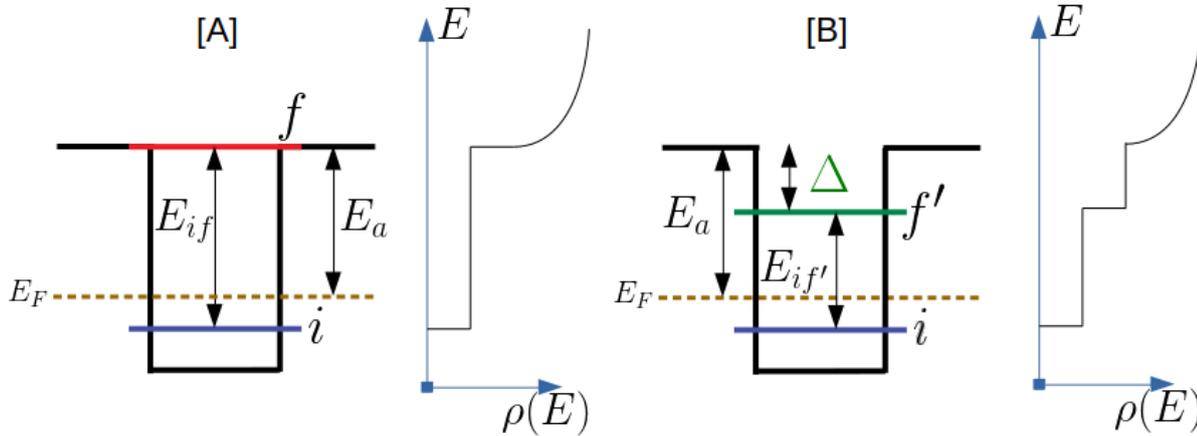


FIGURE A.1 – [A] : structure QWIP “habituelle”, avec sousbande haute f résonnante avec le continuum ; représentation de la densité d’états associée. [B] : structure QWIP type couplage fort, avec niveau haut f' décalé de Δ par rapport à f ; représentation de la densité d’états associée. Les deux structures sont représentées à même énergie d’activation E_a .

de telles structures est principalement gouverné par l’énergie d’activation E_a , qui dans un QWIP, s’approche comme l’écart d’énergie entre le niveau de Fermi et le haut de la barrière de potentiel (l’énergie nécessaire pour extraire un électron vers le continuum). Le courant d’obscurité sur une loi d’Arrhenius d’activation thermique :

$$\mathcal{J}_{\text{dark}} = A e^{-\frac{E_a}{k_B T}} \quad (\text{A.1})$$

Avec A le pré-facteur exponentiel, k_B la constante de Boltzmann et T la température. Dans la suite, on se place dans une situation où les deux structures de la figure A.1 ont la même énergie d'activation, et on pose la question suivante : comment évolue le courant d'obscurité avec Δ , à énergie d'activation E_a constante ? Peut-on envisager un gain sur le courant d'obscurité en utilisant des structures QWIP en couplage fort ?

A.2 Calcul analytique du courant d'émission

On développe dans cette section un calcul analytique simple, à faible Δ et proche de l'équilibre thermodynamique (V faible), dans l'optique de développer une compréhension intuitive de l'évolution du courant d'obscurité avec Δ .

On considère le mécanisme d'absorption de phonon LO comme étant le mécanisme diffusif prépondérant dans le courant d'obscurité, et on suppose les mécanismes intra-sousbandes très rapides devant les mécanismes inter-sousbandes. Ces hypothèses nous permettent de travailler dans le cadre de l'hypothèse des *sous-bandes thermalisées* [75, 76], et proche de l'équilibre on obtient :

$$\mathcal{J}_e(\Delta) = \frac{q^2 V}{k_B T} G(V = 0, \Delta) \quad (\text{A.2})$$

Avec \mathcal{J}_e le courant d'émission du QWIP, et $G(V = 0, \Delta)$ la conductance associée à l'ensemble des canaux de conductance entre l'état i et les états ν du continuum (cf. figure A.2). \mathcal{J}_e est une composante importante du courant d'obscurité, mais un calcul rigoureux prendrait en compte la probabilité de capture.

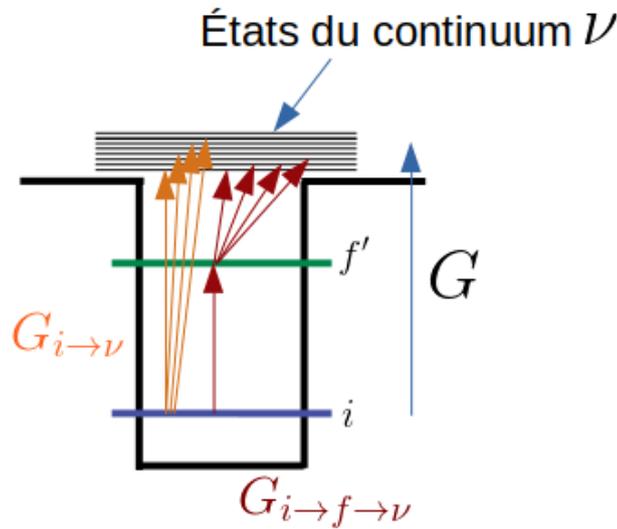


FIGURE A.2 – Structure schématique d'un QWIP en couplage fort. Les flèches symbolisent les canaux de conduction possible de l'état i vers les états du continuum. En orange, on représente les canaux dits “directs” (état i vers continuum) et en rouge, les canaux “indirects” (état i vers état f vers continuum).

A.2.1 Expression de G

Tous les canaux représentés dans la figure A.2 sont en parallèles ($G_{i\nu}$ et $G_{i\rightarrow f\rightarrow\nu}$). Les canaux rouges sont la mise en série de canaux (G_{if} et $G_{f\nu}$). On a peut donc écrire :

$$G(\Delta) = \sum_{\nu} \left[G_{i\nu} + G_{i\rightarrow f\rightarrow\nu}(\Delta) \right] = \sum_{\nu} \left[G_{i\nu} + \frac{1}{\frac{1}{G_{if}(\Delta)} + \frac{1}{G_{f\nu}(\Delta)}} \right] \quad (\text{A.3})$$

Dans la suite, on détaille le calcul des différents termes de l'équation précédente.

A.2.2 Calcul de $G_{if}(\Delta)$

On s'intéresse d'abord à $G_{if}(\Delta)$:

$$G_{if}(\Delta) = \int_{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} + \Delta}^{\infty} \rho_{2\text{D}} n_{\text{opt}} f(E) (1 - f(E + \hbar\omega_{\text{LO}})) P_{if}(E) dE \quad (\text{A.4})$$

où n_{opt} désigne la densité de phonons LO, et $P_{if}(E)$ désigne la probabilité de transition de l'état i vers l'état f à l'énergie E et $\rho_{2\text{D}}$ la densité d'état 2D. On sépare l'intégrale en deux :

$$G_{if}(\Delta) = \int_{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}}}^{\infty} \rho_{2\text{D}} n_{\text{opt}} f(E) (1 - f(E + \hbar\omega_{\text{LO}})) P_{if}(E) dE + \int_{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} + \Delta}^{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}}} \rho_{2\text{D}} n_{\text{opt}} f(E) (1 - f(E + \hbar\omega_{\text{LO}})) P_{if}(E) dE \quad (\text{A.5})$$

On identifie $G_{if}(0)$ et on utilise la statistique de Maxwell-Boltzmann (on a l'énergie de Fermi à l'équilibre $E_F \ll E_f$) :

$$G_{if}(\Delta) = G_{if}(0) + \rho_{2\text{D}} n_{\text{opt}} \int_{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} + \Delta}^{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}}} \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right) P_{if}(E) dE \quad (\text{A.6})$$

Sur l'intervalle $[E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} + \Delta; E_f - \hbar\omega_{\text{LO}}]$, on fait l'hypothèse que $P_{if}(E)$ est lentement variable avec E . Cela nous permet d'intégrer le terme restant :

$$G_{if}(\Delta) = G_{if}(0) - \rho_{2\text{D}} n_{\text{opt}} P_{if} k_B T \exp\left(-\frac{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} - E_F}{k_B T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)\right] \quad (\text{A.7})$$

En développant l'expression précédente au premier ordre en Δ autour de $\Delta = 0$:

$$G_{if}(\Delta) = G_{if}(0) - \rho_{2\text{D}} n_{\text{opt}} P_{if} \exp\left(-\frac{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} - E_F}{k_B T}\right) \Delta \quad (\text{A.8})$$

On a bien $G_{if}(0) \leq G_{if}\Delta$ avec $\Delta \leq 0$.

A.2.3 Calcul de $G_{f\nu}(\Delta)$

On s'intéresse maintenant à $G_{f\nu}(\Delta)$:

$$G_{f\nu}(\Delta) = \int_{\max}^{\infty} \rho_{2D} n_{\text{opt}} f(E) (1 - f(E + \hbar\omega_{\text{LO}})) P_{f\nu}(E) dE \quad \forall \nu \quad (\text{A.9})$$

avec $\max = \max(E_f + \Delta ; E_\nu - \hbar\omega_{\text{LO}})$. On a donc deux cas de figure :

— si $\max = E_\nu - \hbar\omega_{\text{LO}}$, on obtient :

$$\boxed{G_{f\nu}(\Delta) = G_{f\nu}(0)} \quad (\text{A.10})$$

— si $\max = E_f + \Delta$, on sépare l'intégrale en deux parties, de manière similaire au calcul de G_{if} . Attention aux bornes des intégrales pour la séparation : pour chaque état du continuum ν , il existe un écart Δ_ν tel que $E_f + \Delta_\nu = E_\nu - \hbar\omega_{\text{LO}}$. On obtient :

$$G_{f\nu}(\Delta) = \int_{E_f + \Delta_\nu}^{\infty} \rho_{2D} n_{\text{opt}} f(E) (1 - f(E + \hbar\omega_{\text{LO}})) P_{f\nu}(E) dE \quad (\text{A.11})$$

$$+ \int_{E_f + \Delta}^{E_f + \Delta_\nu} \rho_{2D} n_{\text{opt}} f(E) (1 - f(E + \hbar\omega_{\text{LO}})) P_{f\nu}(E) dE \quad (\text{A.12})$$

On identifie $G_{f\nu}(0)$, on sort de l'intégrale de droite les termes constants, et on suppose $P_{f\nu}$ indépendant de E sur l'intervalle $[E_\nu - \hbar\omega_{\text{LO}}; E_f + \Delta]$, ce qui nous permet d'intégrer :

$$G_{f\nu}(\Delta) = G_{f\nu}(0) - \rho_{2D} n_{\text{opt}} P_{f\nu} k_B T \exp\left(-\frac{E_f - E_F}{k_B T}\right) \left[\exp\left(-\frac{\Delta_\nu}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right) \right] \quad (\text{A.13})$$

Expression qu'on développe au premier ordre en Δ :

$$\boxed{G_{f\nu}(\Delta) = G_{f\nu}(0) - \rho_{2D} n_{\text{opt}} P_{f\nu} \exp\left(-\frac{E_f - E_F}{k_B T}\right) (\Delta - \Delta_\nu)} \quad (\text{A.14})$$

A.2.4 Calcul de $G_{i \rightarrow f \rightarrow \nu}(\Delta)$

Finalement, on a :

$$G_{i\nu}(\Delta) = G_{i\nu}(0) + G_{i\nu}^{(1)} \Delta \quad (\text{A.15})$$

$$G_{f\nu}(\Delta) = G_{f\nu}(0) \quad \forall \nu, \quad E_f + \Delta < E_\nu - \hbar\omega_{\text{LO}} \quad (\text{A.16})$$

$$G_{f\nu}(\Delta) = G_{f\nu}(0) + G_{f\nu}^{(1)} (\Delta - \Delta_\nu) \quad \forall \nu, \quad E_\nu - \hbar\omega_{\text{LO}} \leq E_f + \Delta \quad (\text{A.17})$$

Avec :

$$G_{if}^{(1)} = - \rho_{2D} n_{\text{opt}} P_{if} \exp\left(-\frac{E_f - \hbar\omega_{\text{LO}} - E_F}{k_B T}\right) \quad (\text{A.18})$$

$$G_{f\nu}^{(1)} = - \rho_{2D} n_{\text{opt}} P_{f\nu} \exp\left(-\frac{E_f - E_F}{k_B T}\right) \quad (\text{A.19})$$

En utilisant les expressions des équations précédentes, et en distinguant deux cas, on a donc :

1. si $\Delta < \Delta_\nu$:

$$G_{i \rightarrow f \rightarrow \nu}(\Delta) = \frac{1}{\frac{1}{G_{if}(0)} + \frac{1}{G_{f\nu}(0)}} \left[1 + \frac{G_{f\nu}(0)G_{if}^{(1)}}{G_{f\nu}(0)G_{if}(0) + G_{if}(0)^2} \Delta \right] \quad (\text{A.20})$$

2. si $\Delta_\nu \leq \Delta$:

$$G_{i \rightarrow f \rightarrow \nu}(\Delta) = \frac{1}{\frac{1}{G_{if}(0)} + \frac{1}{G_{f\nu}(0)}} \left[1 + \left(\frac{G_{if}^{(1)}G_{f\nu}(0)}{G_{if}(0)} \Delta + \frac{G_{f\nu}^{(1)}G_{if}(0)}{G_{f\nu}(0)} (\Delta - \Delta_\nu) \right) \frac{1}{G_{f\nu}(0) + G_{if}(0)} \right] \quad (\text{A.21})$$

Quelque soit la valeur de Δ , tous les termes prenant part à l'expression de $G_{i \rightarrow f \rightarrow \nu}$ étant positifs, on a :

$$G(\Delta) > G(0) \Rightarrow \mathcal{J}_e(\Delta) > \mathcal{J}_e(0) \quad (\text{A.22})$$

Le courant d'émission dans une structure QWIP conçue pour fonctionner en couplage fort est plus important que le courant d'émission d'une structure QWIP "habituelle", conçue pour fonctionner en couplage faible. Abaisser la sousbande haute de la transition ISB revient à ajouter un canal de conduction supplémentaire, dont l'importance augmente avec l'écart Δ entre la sousbande et le continuum électronique. Ce courant étant une composante importante du courant d'obscurité, on s'attend à ce qu'une structure conçue pour fonctionner en couplage fort n'ait pas d'avantage net vis-à-vis du courant d'obscurité par rapport à une structure conçue pour fonctionner en couplage faible.

Annexe B

Calcul du taux de dissipation radiatif Γ_c d'un réseau d'antennes patches.

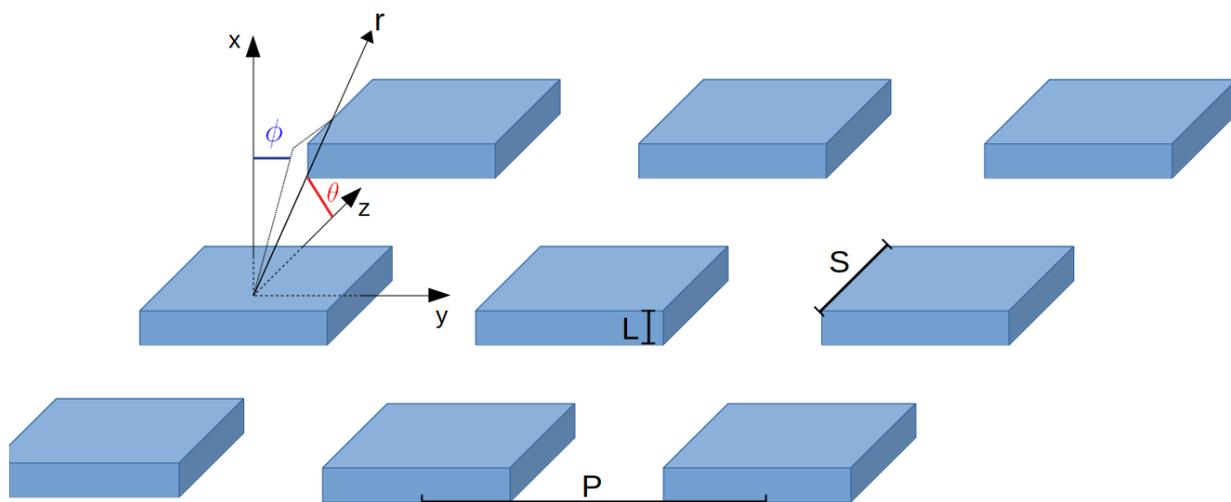


FIGURE B.1 – Représentation schématique d'un réseau de patches et des dimensions importantes du réseau. Attention, ces développements s'inspirent de [103], où le repère orthonormé est orienté d'une manière non conventionnelle (axe z et axe x inversé). Dans ce document, on conserve cette orientation originale pour réutiliser directement les équations de l'auteur.

B.1 Champ rayonné par une antenne patch

Une unique antenne patch s'assimile à deux fentes rayonnantes. On commence donc par calculer le champ rayonné en champ lointain par une fente de hauteur L et de largeur s .

Une fente

Le champ rayonné en champ lointain par une fente de hauteur L et de largeur s s'écrit [103](p.835) :

$$E_r^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi) = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$E_\theta^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi) = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$E_\phi^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi) = -jE_0k_0Ls \frac{e^{-jk_0r}}{2\pi r} \sin(\theta) \frac{\sin(Z)}{Z} \frac{\sin(X)}{X} \quad (\text{B.3})$$

avec :

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} \quad (\text{B.4})$$

$$X = \frac{k_0L}{2} \sin(\theta) \cos(\phi) \quad (\text{B.5})$$

$$Z = \frac{k_0s}{2} \cos(\theta) \quad (\text{B.6})$$

Dans l'approximation $\lambda_0 \gg s, L$:

$$E_\phi^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi) \approx -jE_0k_0Ls \frac{e^{-jk_0r}}{2\pi r} \sin(\theta) \quad (\text{B.7})$$

La puissance radiative est définie à partir du flux du vecteur de Poynting Π à travers une surface sphérique S qui englobe la fente :

$$P_r^{1\text{Slit}} = \iint_S \Pi(r, \theta, \phi) dS \quad (\text{B.8})$$

$$= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\eta_0} |E_\phi^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\phi \quad (\text{B.9})$$

où η_0 est l'impédance du vide. En utilisant l'approximation $\lambda_0 \gg s, L$, on trouve :

$$P_r^{1\text{Slit}} \approx \frac{k_0^2 L^2 s^2}{3\pi\eta_0} |E_0|^2 \quad (\text{B.10})$$

Deux fentes

Pour passer d'une fente radiative à deux fentes radiatives qui interfèrent (et donc une antenne patch), on utilise un facteur de forme AF (pour *Array Factor*) :

$$E_\phi^{2\text{Slits}}(r, \theta, \phi) = AF^{2\text{Slits}} E_\phi^{1\text{Slit}} \quad (\text{B.11})$$

$$P_r^{2\text{Slits}} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\eta_0} |AF^{2\text{Slits}} E_\phi^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\phi \quad (\text{B.12})$$

$$AF^{2\text{Slits}} = 2 \cos\left(\frac{k_0s}{2} \sin(\theta) \sin(\phi)\right) \quad (\text{B.13})$$

En utilisant notre approximation grande longueur d'onde, $AF^{2\text{Slits}} \approx 2$ et :

$$P_r^{2\text{Slits}} \approx \frac{4k_0^2 L^2 s^2}{3\pi\eta_0} |E_0|^2 \quad (\text{B.14})$$

B.1.1 Taux de dissipation radiatif pour une antenne patch

L'énergie contenue dans la cavité W_C s'exprime à l'aide du champ électromagnétique à l'intérieur de la cavité. Ici on considère un mode TM_{01} ($k_z = 0, k_x = 0$) :

$$W_C = \iiint_V \epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} |E_C|^2 dV \quad (\text{B.15})$$

$$= \int_0^s \int_0^s \int_0^L \epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} |E_0|^2 \cos^2\left(\frac{2\pi}{s}x\right) dx dy dz \quad (\text{B.16})$$

On obtient :

$$W_C = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{\text{eff}} |E_0|^2}{2} s^2 L \quad (\text{B.17})$$

Finalement, on exprime le taux de dissipation radiatif $\Gamma_{\text{rad}}^{2\text{Slits}}$ en utilisant $\frac{1}{\eta_0} = \epsilon_0 c_0$ et :

$$\Gamma_{\text{rad}}^{2\text{Slits}} = \frac{P_r^{2\text{Slits}}}{2W_C} = \frac{8\pi c_0 L}{3\lambda_0^2 n_{\text{eff}}^2} \quad (\text{B.18})$$

B.1.2 Réseau d'antennes patches

Le facteur de forme d'une distribution de sources radiatives est la figure d'interférence en champ lointain de l'ensemble de ces sources. Pour une distribution homogène $N \times N$ de patches (distance inter-patch $d_x = d_y = p$) :

$$AF^{\text{PatchArray}} = \frac{\sin\left(\frac{N}{2}Y\right) \sin\left(\frac{N}{2}Z\right)}{\sin\left(\frac{Y}{2}\right) \sin\left(\frac{Z}{2}\right)} \quad (\text{B.19})$$

$$\text{avec } Z = k_0 p \cos(\theta) \quad (\text{B.20})$$

$$Y = k_0 p \sin(\theta) \sin(\phi) \quad (\text{B.21})$$

On peut écrire la puissance rayonnée $P_r^{\text{PatchArray}}$ à partir de ce facteur de forme de réseau et le champ rayonné par une unique antenne patch :

$$P_r^{\text{PatchArray}} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\eta_0} |AF^{\text{PatchArray}} AF^{2\text{Slits}} E_\phi^{1\text{Slit}}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \quad (\text{B.22})$$

On calcule numériquement cette intégrale, et on la compare à l'expression analytique de [101] (Eq. (2.57)) en couplage critique :

$$\gamma_r^{\text{Palaferrri}} = \frac{8c_0 L}{n_{\text{eff}}^2 p^2} \quad (\text{B.23})$$

$$P_r^{\text{Palaferrri}} = \frac{8s^2 L^2 N^2}{\eta_0 p^2} |E_0|^2 \quad (\text{B.24})$$

Les résultats numériques (équation (B.22)) et analytiques (équation (B.24)) sont comparés dans la figure B.2

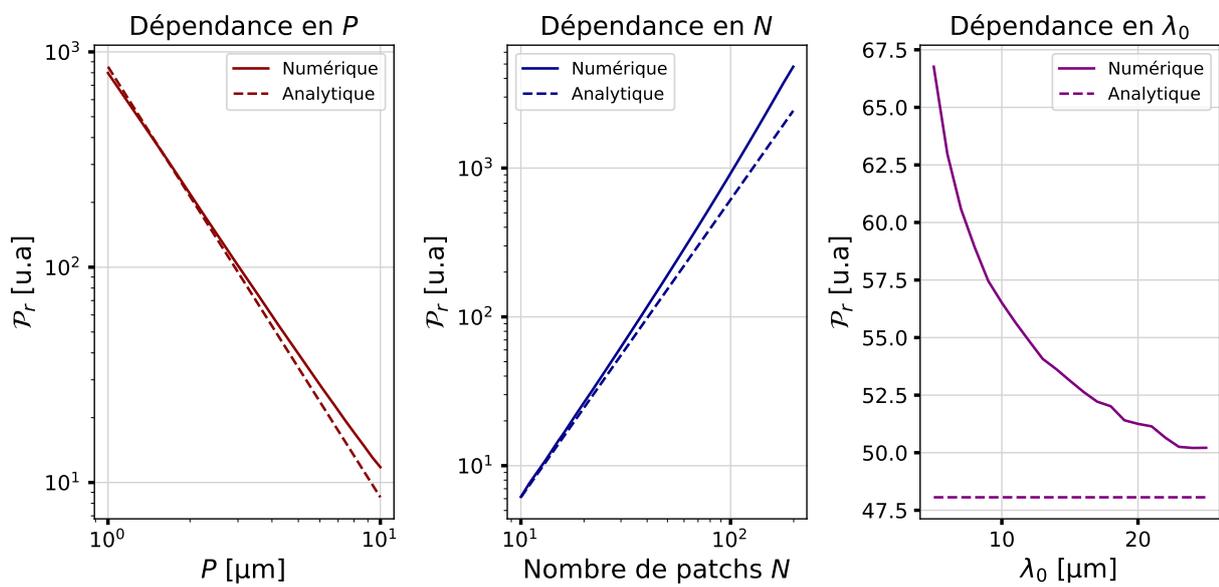


FIGURE B.2 – Comparaison entre les résultats numériques (équation (B.22)) et analytiques (équation (B.24)) de la puissance rayonnée par un réseau d’antennes patches en fonction de la distance inter-patch P , du nombre de patch N et de la longueur d’onde λ_0 .

Annexe C

Modèle apériodique du transport : application sur un QCD une période

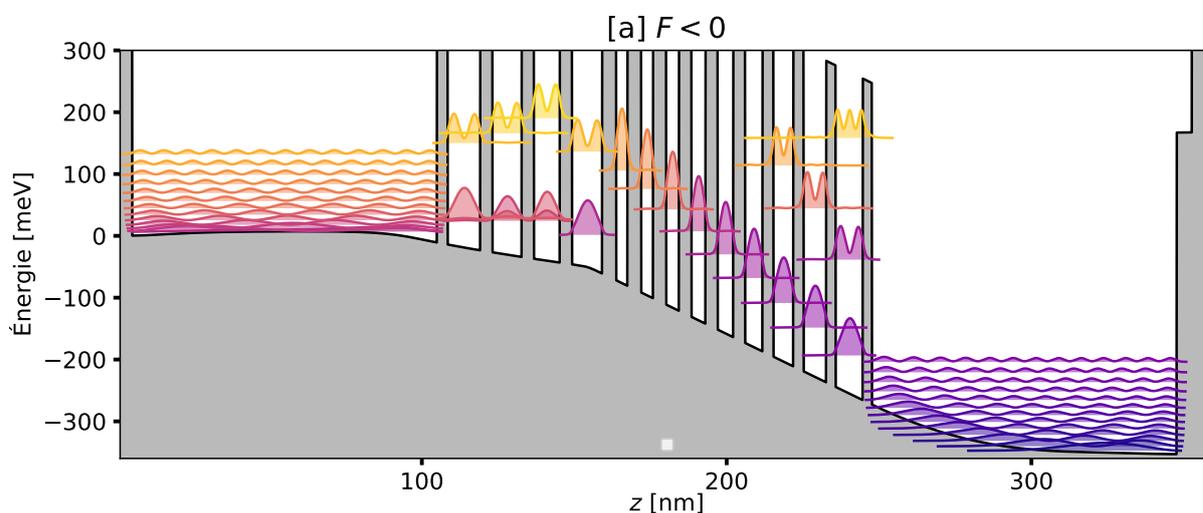


FIGURE C.1 – Structure de bande d’un QCD une période conçu dans le cadre du projet ANR Metanizo, pour trois champs électriques F . Le calcul est réalisé à l’aide d’un modèle apériodique du transport, détaillé dans la section 2.5.5. Cette structure intervient également dans l’étude des mesures de réflectivité en régime de couplage fort présentées en figure 4.3. Pour cette figure, on applique un champ électrique négatif $F < 0$.

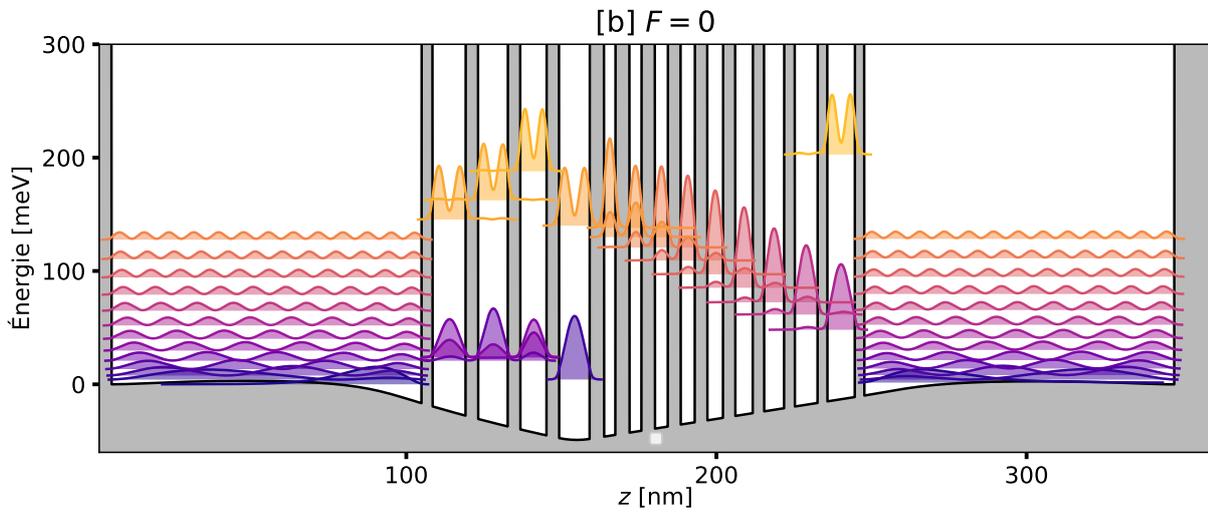


FIGURE C.2 – Pour cette figure, le champ électrique appliqué est nul $F = 0$.

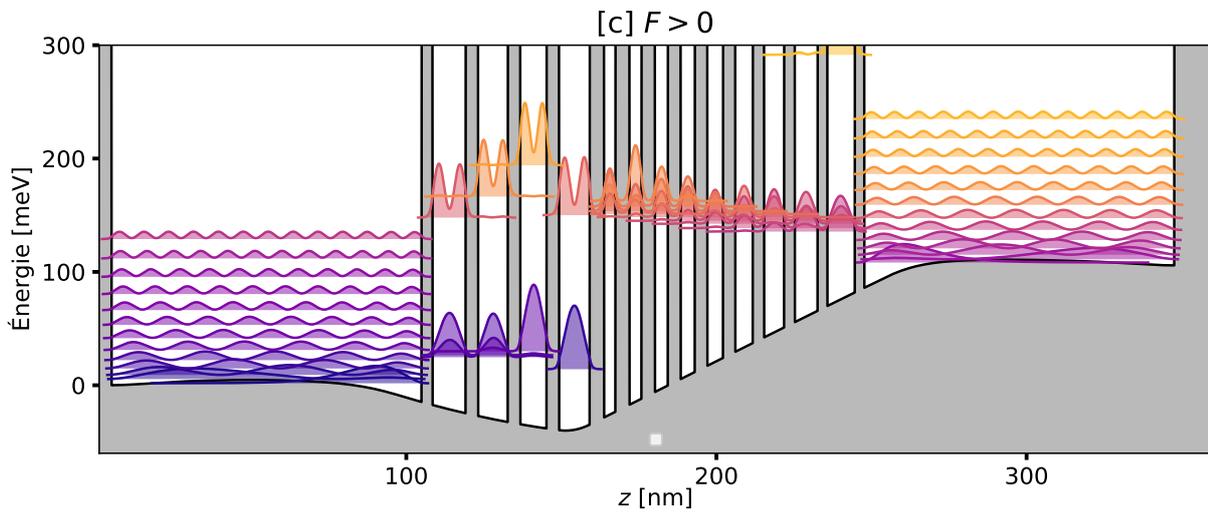


FIGURE C.3 – Pour cette figure, on applique un champ électrique positif $F > 0$.

Annexe D

Mesures supplémentaires de réflectivité pour des cavités non-dopées

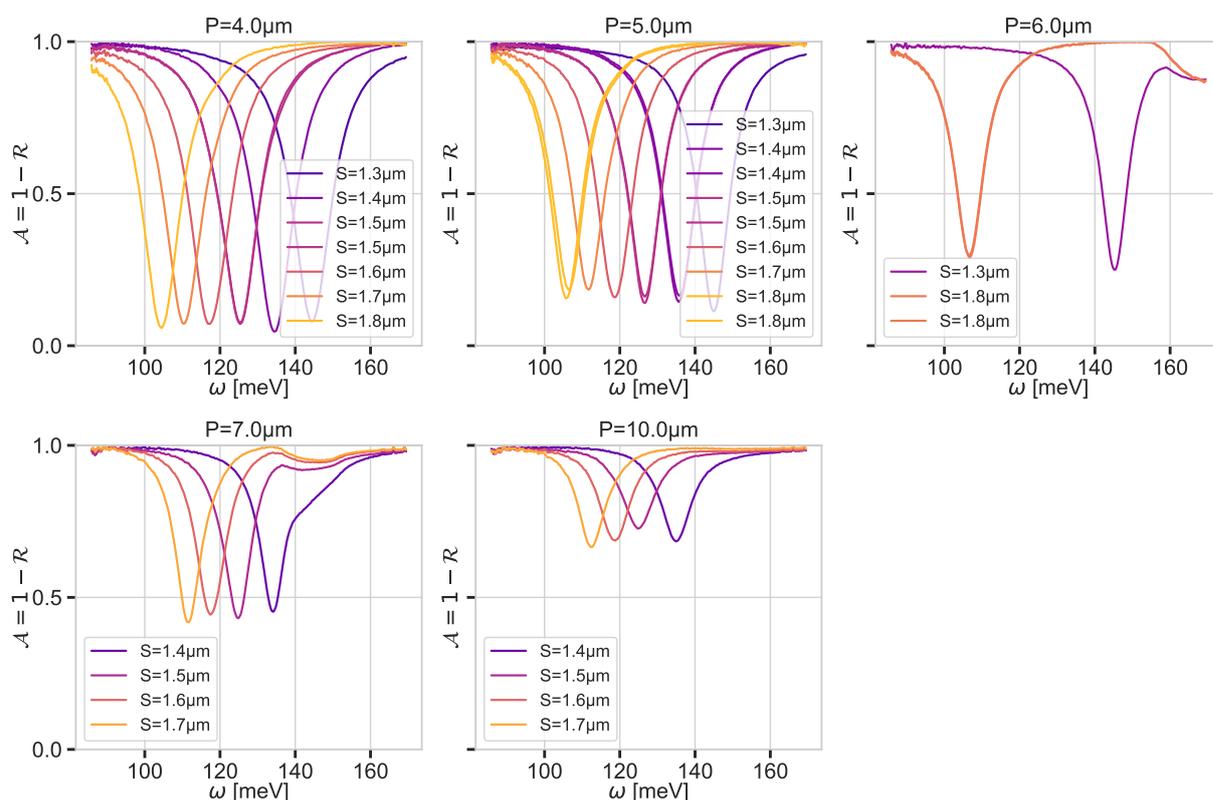


FIGURE D.1 – Spectres d'absorption mesurés pour un réseau de cavité antennes patches *non-dopés*. Les mesures sont réalisées par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR, Bruker Vertex 70) à l'aide d'une paire de miroirs paraboliques ($F = 180$ mm) et elliptiques ($F = 282/42$ mm) et d'un photo-détecteur MIR de type DTGS. Le spectre d'un miroir d'or est utilisé comme référence pour la normalisation des spectres.

Annexe E

Dispersion polaritonique

E.1 Diagonalisation de l'Hamiltonien et matrices de passage

Soit \mathcal{H} l'Hamiltonien d'évolution du système :

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \omega_c & \Omega \\ \Omega & \tilde{\omega}_{\text{ISB}} \end{bmatrix} \quad (\text{E.1})$$

On accède à la dispersion polaritonique en diagonalisant notre Hamiltonien. Soit P la matrice de passage telle que :

$$\mathcal{H}_{\pm} = \begin{bmatrix} \omega_+ & 0 \\ 0 & \omega_- \end{bmatrix} = P^{-1}\mathcal{H}P \quad (\text{E.2})$$

Pour simplifier, on posera dans la suite :

$$\Delta = \tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_c \quad (\text{E.3})$$

La recherche des vecteurs propres normalisés nous conduit à l'expression de P suivante :

$$P = \begin{bmatrix} -\frac{(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} & -\frac{(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \\ \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} & \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \end{bmatrix} \quad (\text{E.4})$$

On cherche alors à simplifier l'expression de P_{01} et P_{11} pour les rapporter aux expressions de la littérature :

$$\begin{aligned} P_{01} &= -\frac{(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \\ &= -\frac{(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{\sqrt{(4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2)(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \\ &= \frac{4\Omega^2}{\sqrt{4\Omega^2(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2 + (4\Omega^2)^2}} \\ &= \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

$$\begin{aligned}
P_{11} &= \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \\
&= \frac{2\Omega (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{\sqrt{(4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2) (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \\
&= \frac{(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}}
\end{aligned} \tag{E.6}$$

Ce qui mène aux expressions :

$$\begin{aligned}
P &= \frac{1}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \begin{bmatrix} -(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}) & 2\Omega \\ 2\Omega & (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}) \end{bmatrix} \\
P^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} \begin{bmatrix} (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}) & 2\Omega \\ 2\Omega & -(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}) \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

On introduit les coefficients d'Hoppfield α_1 et α_2 :

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \frac{\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} = \frac{X}{\sqrt{X^2 + Y^2}} \\
\alpha_2 &= \frac{2\Omega}{\sqrt{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}} = \frac{Y}{\sqrt{X^2 + Y^2}}
\end{aligned}$$

On a bien évidemment la relation $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = 1$. \mathcal{H}_\pm représente l'Hamiltonien du système dans la base polaritonique. Ses valeurs propres ω_\pm sont les énergies polaritoniques, qui s'expriment analytiquement :

$$\boxed{\omega_\pm = \frac{\tilde{\omega}_{\text{ISB}} + \omega_c}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}} \tag{E.7}$$

E.2 Dissipation dans la base polaritonique

Soit γ et Γ les deux matrices décrivant les processus dissipatifs respectivement non-radiatifs et radiatifs :

$$\gamma = \begin{bmatrix} \gamma_c & 0 \\ 0 & \gamma_{\text{ISB}} \end{bmatrix} \quad \Gamma = \begin{bmatrix} \Gamma_c & \sqrt{\Gamma_{\text{ISB}}\Gamma_c} \\ \sqrt{\Gamma_{\text{ISB}}\Gamma_c} & \Gamma_{\text{ISB}} \end{bmatrix} \tag{E.8}$$

Pour complètement transposer le problème dans la base polaritonique, il nous reste à appliquer la matrice de passage P à ces matrices. On obtient deux nouvelles matrices γ_\pm et Γ_\pm

telles que :

$$\gamma_{\pm} = P^{-1}\gamma P = \begin{bmatrix} \alpha_1^2\gamma_c + \alpha_2^2\gamma_{\text{ISB}} & \alpha_1\alpha_2(\gamma_c - \gamma_{\text{ISB}}) \\ \alpha_1\alpha_2(\gamma_c - \gamma_{\text{ISB}}) & \alpha_2^2\gamma_c + \alpha_1^2\gamma_{\text{ISB}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_+ & \gamma_{\text{cross}} \\ \gamma_{\text{cross}} & \gamma_- \end{bmatrix} \quad (\text{E.9})$$

$$\Gamma_{\pm} = P^{-1}\Gamma P = \begin{bmatrix} \Gamma_+ & \Gamma_{\text{cross}} \\ \Gamma_{\text{cross}} & \Gamma_- \end{bmatrix} \quad (\text{E.10})$$

Il est intéressant d'obtenir les expressions simplifiées de ces différents termes en fonction des paramètres de la base naturelle :

$$\begin{aligned} \gamma_+ &= \frac{4\Omega^2\gamma_1}{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2} + \frac{\gamma_2 (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2} \\ &= \left[\frac{4\Omega^2\gamma_1}{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2} + \frac{\gamma_2 (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2} \right] \frac{4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2}{4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2} \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

En utilisant :

$$\left[4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2 \right] \left[4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2 \right] = 16\Omega^2(\Delta^2 + 4\Omega^2) \quad (\text{E.12})$$

$$\left[\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2} \right] \left[4\Omega^2 + (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2 \right] = 8\Omega^2\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2} \quad (\text{E.13})$$

On trouve :

$$\boxed{\gamma_{\pm} = \frac{\gamma_{\text{ISB}} + \gamma_c}{2} \pm \frac{(\gamma_{\text{ISB}} - \gamma_c)\Delta}{2\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}}} \quad (\text{E.14})$$

On note l'apparition de termes croisés γ_{cross} dans la matrice γ_{\pm} , absents de la matrice γ dans la base naturelle :

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{cross}} &= \alpha_1\alpha_2(\gamma_c - \gamma_{\text{ISB}}) \\ &= \frac{2\Omega(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})}{4\Omega^2 + (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2})^2} (\gamma_c - \gamma_{\text{ISB}}) \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

On obtient :

$$\boxed{\gamma_{\text{cross}} = \frac{\Omega(\gamma_c - \gamma_{\text{ISB}})}{\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}}} \quad (\text{E.16})$$

Pour écrire les termes associés à la matrice Γ_{\pm} , on simplifie le problème en supposant $\Gamma_{\text{ISB}} = 0$ (ce qui correspond à notre situation).

$$\begin{aligned} \Gamma_{\pm} &= \frac{\Gamma_c}{2} \pm \frac{\Gamma_c(\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_c)}{2\sqrt{4\Omega^2 + (\tilde{\omega}_{\text{ISB}} - \omega_c)^2}} \\ \Gamma_{\text{cross}} &= \frac{\Omega\Gamma_c}{\sqrt{\Delta^2 + 4\Omega^2}} \end{aligned}$$

Annexe F

Calcul de la propagation sur les spectres des erreurs des paramètres de fit

Dans cette annexe, on explique comment propager les erreurs des paramètres retournés par la procédure de fit appliquée à nos données expérimentales, sur les calculs des spectres (de réflectivité \mathcal{R} et de photo-courant \mathcal{J}_E).

La procédure de fit retourne une matrice de covariance M_P associée aux paramètres de fit. Le vecteur d'écart type σ_P , qui quantifie les estimations des erreurs du fit, est donné par :

$$\sigma_P = \sqrt{\text{diag}(M_P)} \quad (\text{F.1})$$

Soit F la fonction utilisée par le fit et J le jacobien de cette fonction. Pour propager les erreurs faites sur les paramètres de fit sur la fonction F , on doit d'abord calculer la matrice de covariance portant sur F , M_F :

$$M_F = JM_PJ^T \quad (\text{F.2})$$

Les erreurs propagées sur F sont ensuite simplement données par le vecteur d'écart type σ_F calculé via :

$$\sigma_F = \sqrt{\text{diag}(M_F)} \quad (\text{F.3})$$

Les zones grisées sur les spectres sont donc simplement délimitées par $F + \sigma_F$ et $F - \sigma_F$.

Annexe G

Résultats supplémentaires de la procédure de fit sur les mesures de réflectivité de QCDs en couplage fort

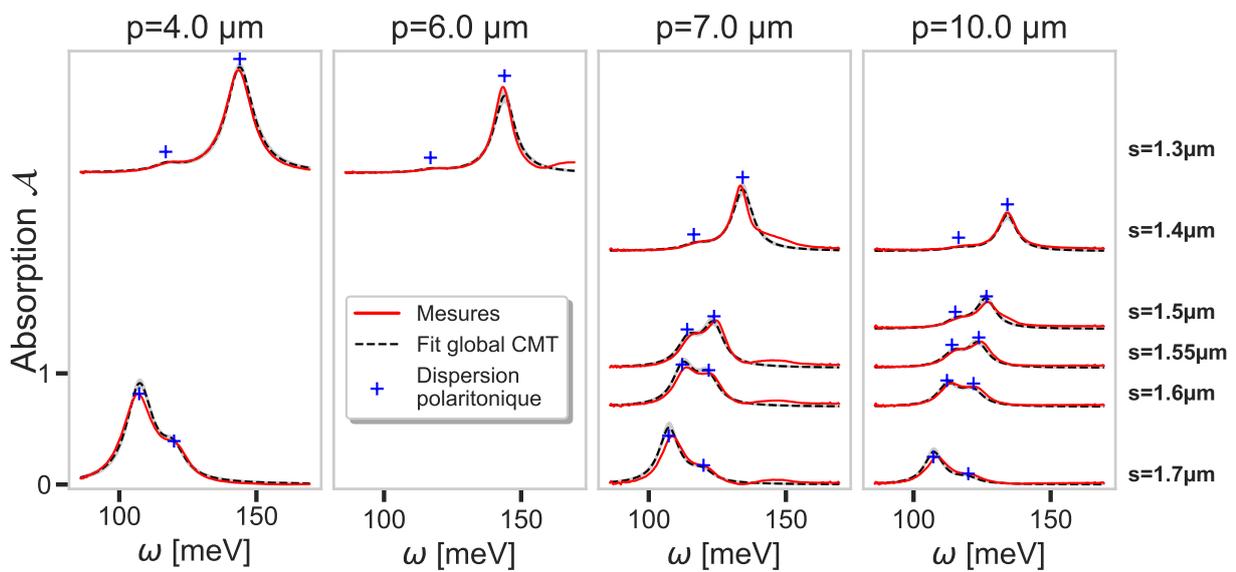


FIGURE G.1 – Résultats supplémentaires de la procédure de fit sur les mesures de réflectivité de QCDs en couplage fort pour un dopage $n_{2D} = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$

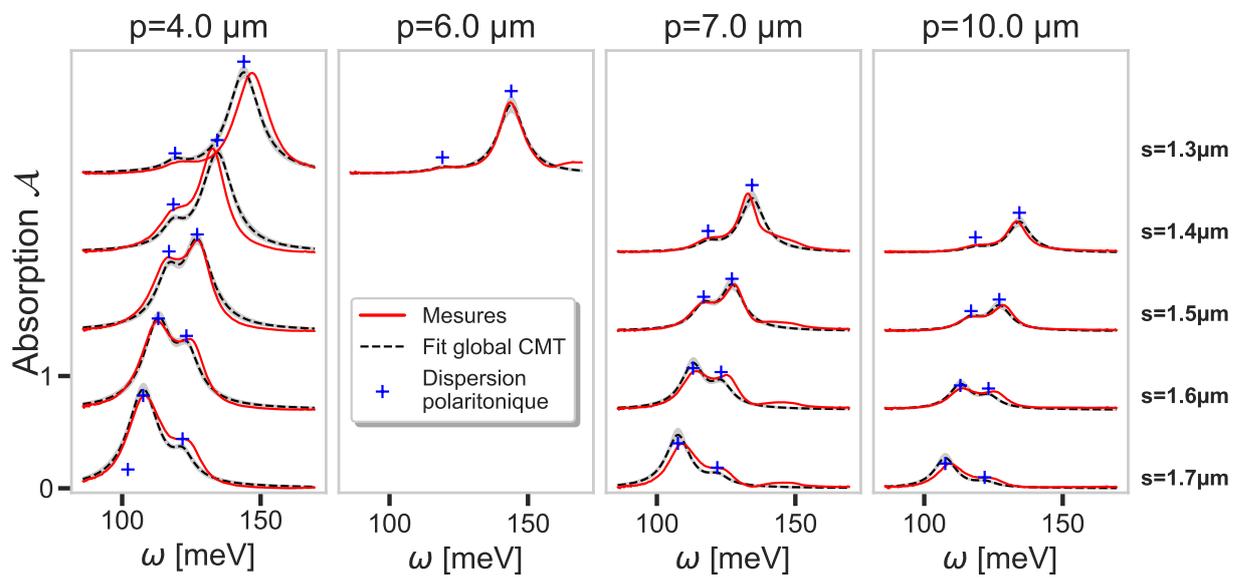


FIGURE G.2 – Résultats supplémentaires de la procédure de fit sur les mesures de réflectivité de QCDs en couplage fort pour un dopage $n_{2D} = 8 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$

Annexe H

Résultats de fits en théorie des modes couplés sur les mesures de photo-courant sous champ électrique

Dans cette annexe, on présente brièvement une procédure de fit utilisant la théorie des modes couplés et portant sur les données expérimentales de photo-courant présentées dans le chapitre 6, figure 5.1. L'objectif ici est de démontrer que la CMT à trois résonateurs (cavité, ISB et extracteur) n'est pas capable de fournir une description suffisante de ces données, par son incapacité à distinguer élargissements et amplitudes.

On réalise donc une procédure de fit utilisant la résolution de l'équation (4.70) et le calcul du photo-courant \mathcal{J}_E équation (4.82). Les paramètres laissés libre pour la procédure de fit sont :

$$\begin{array}{llll} \text{Cavité :} & n_{\text{eff}} & \gamma_c & \alpha_c \\ \text{Plasmon ISB :} & \omega_{\text{ISB}} & \gamma_{\text{ISB}} & \\ \text{Extracteur :} & \omega_E(F_i) & \gamma_E(F_i) & \Omega_T \\ \text{Couplage :} & \omega_P & & \end{array}$$

L'évolution de l'alignement de l'extracteur avec le champ électrique F appliqué sur la structure est déterminé par une relation linéaire :

$$\omega_E(F) = \alpha_F F + \omega_E^0 \quad (\text{H.1})$$

où le coefficient α_F et ω_E^0 seront des paramètres libres du fit. Le taux de dissipation de l'extracteur γ_E est lui contraint à une relation quadratique :

$$\gamma_E(F) = \beta_2 F^2 + \beta_1 F + \gamma_E^0 \quad (\text{H.2})$$

où les coefficients β_2 , β_1 et γ_E^0 seront des paramètres libres du fit. Les résultats sont présentés dans la figure H.1 qui suit. Les résultats ne sont pas satisfaisants. Pour bien interpréter ces résultats, on calcule la fonction de transfert TF, calculée à partir des paramètres retournées par la procédure de fit. Les résultats sont présentés dans la figure H.2.

Cette figure illustre bien les limites de la théorie des modes couplés, à savoir cette incapacité à dissocier élargissements et amplitudes : pour les champs fortement négatifs (courbes

rouges), le modèle souhaite un taux d'extraction γ_E élevé, pour obtenir une amplitude globale élevée sur les spectres de photo-courant. Mécaniquement, les fonctions de transfert sont donc très larges pour les champs négatifs. À l'inverse, aux champs positifs (courbes bleues), le modèle souhaite une faible valeur de taux d'extraction, pour reproduire les faibles amplitudes des spectres de photo-courant. Mécaniquement, les fonctions de transfert sont fines et piquées.

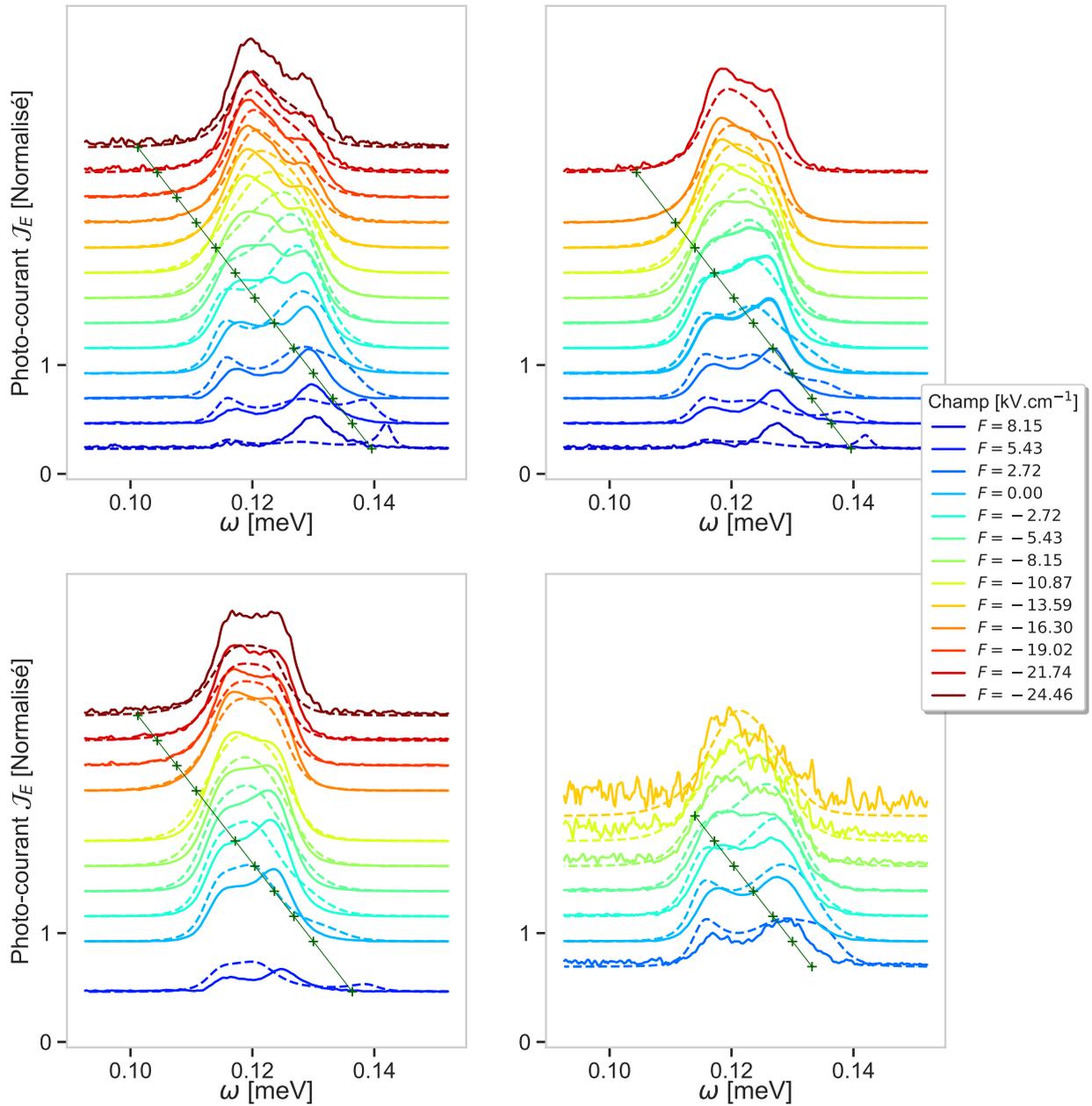


FIGURE H.1 – Résultat de la procédure de fit en théorie des modes couplés à trois résonateurs (cavité, ISB, et extracteur) sur les mesures de photo-courant sous champ électrique F , pour plusieurs couples p, s de géométrie de réseau d'antennes patches.

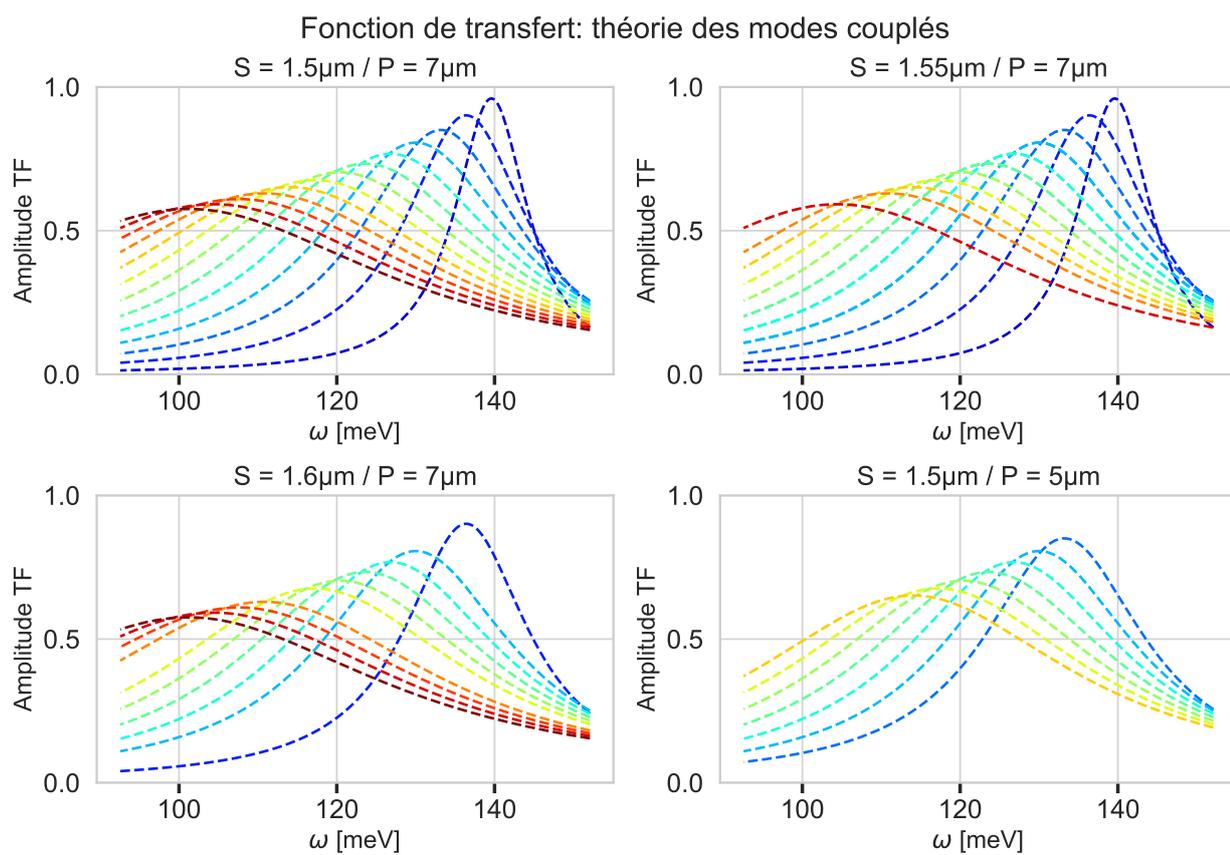


FIGURE H.2 – Fonction de transfert calculées par les résultats de fit de la figure H.2.

Annexe I

Résultat de fit pour des valeurs de taux d'extraction γ_E contraintes aux calculs sur la structure de bande

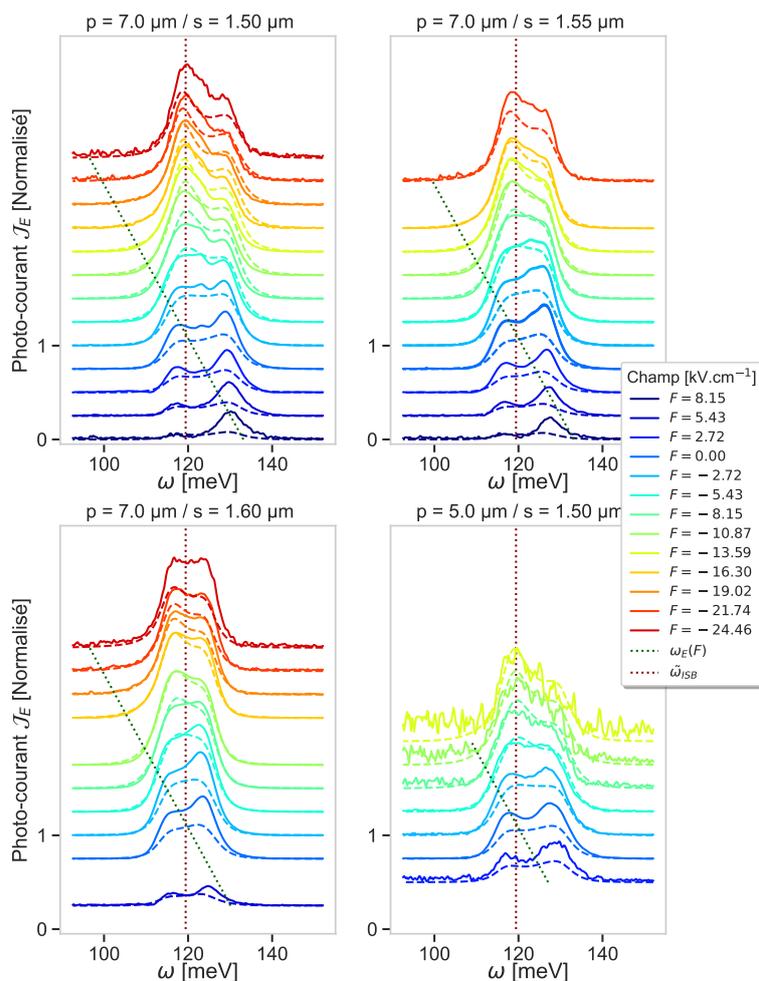


FIGURE I.1 – Résultats pour la procédure de fit basée sur la matrice densité et des taux d'extraction $\gamma_E(F)$ contraints aux valeurs calculées sur la structure de bande par METIS.

Bibliographie

- [1] RJ Thompson, Gerhard Rempe, and HJ Kimble. Observation of normal-mode splitting for an atom in an optical cavity. *Physical review letters*, 68(8) :1132, 1992.
- [2] Nicolaas Bloembergen, Edward Mills Purcell, and Robert V Pound. Relaxation effects in nuclear magnetic resonance absorption. *Physical review*, 73(7) :679, 1948.
- [3] Y Kaluzny, P Goy, M Gross, JM Raimond, and S Haroche. Observation of self-induced rabi oscillations in two-level atoms excited inside a resonant cavity : The ringing regime of superradiance. *Physical review letters*, 51(13) :1175, 1983.
- [4] Claude Weisbuch, Mr Nishioka, A Ishikawa, and Y Arakawa. Observation of the coupled exciton-photon mode splitting in a semiconductor quantum microcavity. *Physical Review Letters*, 69(23) :3314, 1992.
- [5] JJ Hopfield. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals. *Physical Review*, 112(5) :1555, 1958.
- [6] Anton Frisk Kockum, Adam Miranowicz, Simone De Liberato, Salvatore Savasta, and Franco Nori. Ultrastrong coupling between light and matter. *Nature Reviews Physics*, 1(1) :19–40, 2019.
- [7] Jacek Kasprzak, Murielle Richard, S Kundermann, A Baas, P Jeambrun, Jonathan Mark James Keeling, FM Marchetti, MH Szymańska, R André, JL Staehli, et al. Bose–einstein condensation of exciton polaritons. *Nature*, 443(7110) :409–414, 2006.
- [8] MS Skolnick, TA Fisher, and DM Whittaker. Strong coupling phenomena in quantum microcavity structures. *Semiconductor Science and Technology*, 13(7) :645, 1998.
- [9] David Hagenmüller, Simone De Liberato, and Cristiano Ciuti. Ultrastrong coupling between a cavity resonator and the cyclotron transition of a two-dimensional electron gas in the case of an integer filling factor. *Physical Review B*, 81(23) :235303, 2010.
- [10] Andreas Bayer, Marcel Pozimski, Simon Schambeck, Dieter Schuh, Rupert Huber, Dominique Bougeard, and Christoph Lange. Terahertz light–matter interaction beyond unity coupling strength. *Nano letters*, 17(10) :6340–6344, 2017.
- [11] Thomas Niemczyk, F Deppe, H Huebl, EP Menzel, F Hocke, MJ Schwarz, JJ Garcia-Ripoll, D Zueco, T Hümmer, E Solano, et al. Circuit quantum electrodynamics in the ultrastrong-coupling regime. *Nature Physics*, 6(10) :772–776, 2010.
- [12] Salvatore Gambino, Marco Mazzeo, Armando Genco, Omar Di Stefano, Salvatore Savasta, Salvatore Patane, Dario Ballarini, Federica Mangione, Giovanni Lerario, Daniele Sanvitto, et al. Exploring light–matter interaction phenomena under ultrastrong coupling regime. *ACS Photonics*, 1(10) :1042–1048, 2014.

- [13] Felix Benz, Mikolaj K Schmidt, Alexander Dreismann, Rohit Chikkaraddy, Yao Zhang, Angela Demetriadou, Cloudy Carnegie, Hamid Ohadi, Bart De Nijs, Ruben Esteban, et al. Single-molecule optomechanics in “picocavities”. *Science*, 354(6313) :726–729, 2016.
- [14] Niclas S Mueller, Yu Okamura, Bruno GM Vieira, Sabrina Juergensen, Holger Lange, Eduardo B Barros, Florian Schulz, and Stephanie Reich. Deep strong light–matter coupling in plasmonic nanoparticle crystals. *Nature*, 583(7818) :780–784, 2020.
- [15] Thomas Walther and Andrey B Krysa. Transmission electron microscopy of AlGaAs/-GaAs quantum cascade laser structures. *Journal of Microscopy*, 268(3) :298–304, 2017.
- [16] Leo Esaki and Ray Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, 14(1) :61–65, 1970.
- [17] R Tsu and Leo Esaki. Tunneling in a finite superlattice. *Applied Physics Letters*, 22(11) :562–564, 1973.
- [18] Dimitri Dini, Rüdiger Köhler, Alessandro Tredicucci, Giorgio Biasiol, and Lucia Sorba. Microcavity polariton splitting of intersubband transitions. *Physical review letters*, 90(11) :116401, 2003.
- [19] Y Todorov, AM Andrews, I Sagnes, R Colombelli, P Klang, G Strasser, and C Sirtori. Strong light-matter coupling in subwavelength metal-dielectric microcavities at terahertz frequencies. *Physical review letters*, 102(18) :186402, 2009.
- [20] Pierre Jouy, Angela Vasanelli, Yanko Todorov, Luca Sapienza, Raffaele Colombelli, Ulf Gennser, and Carlo Sirtori. Intersubband electroluminescent devices operating in the strong-coupling regime. *Physical Review B*, 82(4) :045322, 2010.
- [21] J-M Manceau, Simone Zanotto, Tommaso Ongarello, Lucia Sorba, Alessandro Tredicucci, Giorgio Biasiol, and Raffaele Colombelli. Mid-infrared intersubband polaritons in dispersive metal-insulator-metal resonators. *Applied Physics Letters*, 105(8) :081105, 2014.
- [22] Cristiano Ciuti, Gérald Bastard, and Iacopo Carusotto. Quantum vacuum properties of the intersubband cavity polariton field. *Physical Review B*, 72(11) :115303, 2005.
- [23] Aji A Anappara, Simone De Liberato, Alessandro Tredicucci, Cristiano Ciuti, Giorgio Biasiol, Lucia Sorba, and Fabio Beltram. Signatures of the ultrastrong light-matter coupling regime. *Physical Review B*, 79(20) :201303, 2009.
- [24] Pierre Jouy, Angela Vasanelli, Yanko Todorov, Aymeric Delteil, Giorgio Biasiol, Lucia Sorba, and Carlo Sirtori. Transition from strong to ultrastrong coupling regime in mid-infrared metal-dielectric-metal cavities. *Applied Physics Letters*, 98(23) :231114, 2011.
- [25] Markus Geiser, Fabrizio Castellano, Giacomo Scalari, Mattias Beck, Laurent Nevou, and Jérôme Faist. Ultrastrong coupling regime and plasmon polaritons in parabolic semiconductor quantum wells. *Physical Review Letters*, 108(10) :106402, 2012.
- [26] Mathieu Jeannin, Giacomo Mariotti Nesurini, Stéphan Suffit, Djamel Gacemi, Angela Vasanelli, Lianhe Li, Alexander Giles Davies, Edmund Linfield, Carlo Sirtori, and Yanko Todorov. Ultrastrong light–matter coupling in deeply subwavelength thz lc resonators. *ACS photonics*, 6(5) :1207–1215, 2019.

- [27] Simone Zanotto, Francesco P Mezzapesa, Federica Bianco, Giorgio Biasiol, Lorenzo Baldacci, Miriam Serena Vitiello, Lucia Sorba, Raffaele Colombelli, and Alessandro Tredicucci. Perfect energy-feeding into strongly coupled systems and interferometric control of polariton absorption. *Nature Physics*, 10(11) :830–834, 2014.
- [28] Benjamin Askenazi, Angela Vasanelli, Yanko Todorov, Emilie Sakat, Jean-Jacques Greffet, Grégoire Beaudoin, Isabelle Sagnes, and Carlo Sirtori. Midinfrared ultrastrong light–matter coupling for thz thermal emission. *ACS photonics*, 4(10) :2550–2555, 2017.
- [29] R Colombelli, C Ciuti, Y Chassagneux, and C Sirtori. Quantum cascade intersubband polariton light emitters. *Semiconductor science and technology*, 20(10) :985, 2005.
- [30] Simone De Liberato and Cristiano Ciuti. Quantum model of microcavity intersubband electroluminescent devices. *Physical Review B*, 77(15) :155321, 2008.
- [31] Simone De Liberato and Cristiano Ciuti. Stimulated scattering and lasing of intersubband cavity polaritons. *Physical Review Letters*, 102(13) :136403, 2009.
- [32] Luca Sapienza, Angela Vasanelli, Raffaele Colombelli, Cristiano Ciuti, Yannick Chassagneux, Christophe Manquest, Ulf Gennser, and Carlo Sirtori. Electrically injected cavity polaritons. *Physical review letters*, 100(13) :136806, 2008.
- [33] Simone De Liberato and Cristiano Ciuti. Quantum theory of electron tunneling into intersubband cavity polariton states. *Physical Review B*, 79(7) :075317, 2009.
- [34] Aymeric Delteil. *Exaltation multicorps du couplage lumière-matière*. PhD thesis, Université Paris-Diderot-Paris VII, 2012.
- [35] O Neshet and PC Klipstein. High-performance ir detectors at scd present and future. *Opto-Electronics Review*, 14(1) :59–68, 2006.
- [36] Anne Rouvié, Jean-Luc Reverchon, Odile Huet, Anis Djedidi, Jean-Alexandre Robo, Jean-Patrick Truffer, Toufiq Bria, Mauricio Pires, Jean Decobert, and Eric Costard. InGaAs focal plane array developments at iii-v lab. In *Infrared Technology and Applications XXXVIII*, volume 8353, pages 96–107. SPIE, 2012.
- [37] Paul Norton. HgCdTe infrared detectors. In *Proceedings of the Sixth International Symposium on Long Wavelength Infrared Detectors and Arrays : Physics and Applications*, volume 98, page 49. The Electrochemical Society, 1999.
- [38] DL Smith and C Mailhot. Proposal for strained type ii superlattice infrared detectors. *Journal of Applied Physics*, 62(6) :2545–2548, 1987.
- [39] A Rogalski. Next decade in infrared detectors. In *Electro-Optical and Infrared Systems : Technology and Applications XIV*, volume 10433, page 104330L. International Society for Optics and Photonics, 2017.
- [40] Alexandre Delga. Quantum cascade detectors : a review. *Mid-infrared Optoelectronics*, pages 337–377, 2020.
- [41] Emmanuel Rosencher and Borge Vinter. *Optoelectronics*. Cambridge University Press, 2002.
- [42] Harald Schneider and Hui Chun Liu. Quantum well infrared photodetectors. 2007.
- [43] BF Levine. Quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*, 74(8) :R1–R81, 1993.

- [44] Virginie Trinité, Ezzeddine Ouerghemmi, Vincent Guériaux, Mathieu Carras, Alexandru Nedelcu, Eric Costard, and Julien Nagle. Modelling of electronic transport in quantum well infrared photodetectors. *Infrared Physics & Technology*, 54(3) :204–208, 2011.
- [45] Jerome Faist, Federico Capasso, Deborah L Sivco, Carlo Sirtori, Albert L Hutchinson, and Alfred Y Cho. Quantum cascade laser. *Science*, 264(5158) :553–556, 1994.
- [46] Daniel Hofstetter, Mattias Beck, and Jérôme Faist. Quantum-cascade-laser structures as photodetectors. *Applied Physics Letters*, 81(15) :2683–2685, 2002.
- [47] Laure Gendron, M Carras, Agnes Huynh, V Ortiz, C Koeniguer, and V Berger. Quantum cascade photodetector. *Applied physics letters*, 85(14) :2824–2826, 2004.
- [48] A Vardi, G Bahir, F Guillot, C Bougerol, E Monroy, SE Schacham, M Tchernycheva, and FH Julien. Near infrared quantum cascade detector in GaN/AlGaN/AlN heterostructures. *Applied Physics Letters*, 92(1) :011112, 2008.
- [49] A Harrer, B Schwarz, S Schuler, P Reininger, A Wirthmüller, H Detz, D MacFarland, T Zederbauer, AM Andrews, M Rothermund, et al. 4.3 μm quantum cascade detector in pixel configuration. *Optics express*, 24(15) :17041–17049, 2016.
- [50] HC Liu, CY Song, AJ SpringThorpe, and JC Cao. Terahertz quantum-well photodetector. *Applied physics letters*, 84(20) :4068–4070, 2004.
- [51] Emmanuel Lhuillier, Isabelle Ribet-Mohamed, Emmanuel Rosencher, Gilles Patriarche, Amandine Buffaz, Vincent Berger, and Mathieu Carras. Interface roughness transport in terahertz quantum cascade detectors. *Applied Physics Letters*, 96(6) :061111, 2010.
- [52] Michael Hakl, Quyang Lin, Sylvie Lepillet, Maximilien Billet, Jean-Francois Lampin, Stefano Pirotta, Raffaele Colombelli, Wenjian Wan, JC Cao, Hua Li, et al. Ultrafast quantum-well photodetectors operating at 10 μm with a flat frequency response up to 70 ghz at room temperature. *ACS photonics*, 8(2) :464–471, 2021.
- [53] Daniel Hofstetter, Marcel Graf, Thierry Aellen, Jérôme Faist, Lubos Hvozda, and Stéphane Blaser. 23 ghz operation of a room temperature photovoltaic quantum cascade detector at 5.35 μm . *Applied physics letters*, 89(6) :061119, 2006.
- [54] G Quinchard, C Mismar, M Hakl, J Pereira, Q Lin, S Lepillet, V Trinité, A Evirgen, Emilien Peytavit, JL Reverchon, et al. High speed, antenna-enhanced 10.3 μm quantum cascade detector. *Applied Physics Letters*, 120(9) :091108, 2022.
- [55] Daniele Palaferri, Yanko Todorov, Azzurra Bigioli, Alireza Mottaghizadeh, Djamel Gacemi, Allegra Calabrese, Angela Vasanelli, Lianhe Li, A Giles Davies, Edmund H Linfield, et al. Room-temperature nine- μm -wavelength photodetectors and ghz-frequency heterodyne receivers. *Nature*, 556(7699) :85–88, 2018.
- [56] Benedikt Schwarz, Peter Reininger, Hermann Detz, Tobias Zederbauer, Aaron Maxwell Andrews, Stefan Kalchmair, Werner Schrenk, Oskar Baumgartner, Hans Kosina, and Gottfried Strasser. A bi-functional quantum cascade device for same-frequency lasing and detection. *Applied Physics Letters*, 101(19) :191109, 2012.
- [57] Benedikt Schwarz, Christine A Wang, Leo Missaggia, Tobias S Mansuripur, Paul Chevalier, Michael K Connors, Daniel McNulty, Jeffrey Cederberg, Gottfried Strasser, and Federico Capasso. Watt-level continuous-wave emission from a bifunctional quantum cascade laser/detector. *ACS photonics*, 4(5) :1225–1231, 2017.

- [58] Benedikt Schwarz, Peter Reininger, Andreas Harrer, Donald MacFarland, Hermann Detz, Aaron M Andrews, Werner Schrenk, and Gottfried Strasser. The limit of quantum cascade detectors : A single period device. *Applied Physics Letters*, 111(6) :061107, 2017.
- [59] Shen-Qiang Zhai, Jun-Qi Liu, Feng-Qi Liu, and Zhan-Guo Wang. A normal incident quantum cascade detector enhanced by surface plasmons. *Applied Physics Letters*, 100(18) :181104, 2012.
- [60] Mathieu Jeannin, Thomas Bonazzi, Djamel Gacemi, Angela Vasanelli, Stéphan Suffit, Lianhe Li, Alexander Giles Davies, Edmund Linfield, Carlo Sirtori, and Yanko Todorov. High temperature metamaterial terahertz quantum detector. *Applied Physics Letters*, 117(25) :251102, 2020.
- [61] Yuk Nga Chen, Yanko Todorov, Benjamin Askenazi, Angela Vasanelli, Giorgio Biasiol, Raffaele Colombelli, and Carlo Sirtori. Antenna-coupled microcavities for enhanced infrared photo-detection. *Applied Physics Letters*, 104(3) :031113, 2014.
- [62] Azzurra Bigioli, Giovanni Armaroli, Angela Vasanelli, Djamel Gacemi, Yanko Todorov, Daniele Palaferri, Lianhe Li, A Giles Davies, Edmund H Linfield, and Carlo Sirtori. Long-wavelength infrared photovoltaic heterodyne receivers using patch-antenna quantum cascade detectors. *Applied Physics Letters*, 116(16) :161101, 2020.
- [63] Pierre-Baptiste Vigneron, Stefano Pirotta, Iacopo Carusotto, Ngoc-Linh Tran, Giorgio Biasiol, Jean-Michel Manceau, Adel Bousseksou, and Raffaele Colombelli. Quantum well infrared photo-detectors operating in the strong light-matter coupling regime. *Applied Physics Letters*, 114(13) :131104, 2019.
- [64] Felix Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für physik*, 52(7) :555–600, 1929.
- [65] Emmanuel Rosencher and Borge Vinter. *Optoélectronique : cours et exercices corrigés*. Dunod, 1998.
- [66] J Robert Johansson, Paul D Nation, and Franco Nori. Qutip : An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, 183(8) :1760–1772, 2012.
- [67] Andreas Wacker and Antti-Pekka Jauho. Quantum transport : The link between standard approaches in superlattices. *Physical review letters*, 80(2) :369, 1998.
- [68] K Donovan, P Harrison, and RW Kelsall. Self-consistent solutions to the intersubband rate equations in quantum cascade lasers : Analysis of a GaAs/AlGaAs device. *Journal of Applied Physics*, 89(6) :3084–3090, 2001.
- [69] Olivier Bonno, Jean-Luc Thobel, and François Dessenne. Modeling of electron–electron scattering in monte carlo simulation of quantum cascade lasers. *Journal of applied physics*, 97(4) :043702, 2005.
- [70] Romain Léon Terazzi. *Transport in quantum cascade lasers*. PhD thesis, ETH Zurich, 2012.
- [71] Sumit Saha and Jitendra Kumar. Rate equation modelling and investigation of quantum cascade detector characteristics. *Superlattices and Microstructures*, 98 :70–77, 2016.

- [72] Tillmann Kubis, Catherine Yeh, and Peter Vogl. Non-equilibrium quantum transport theory : current and gain in quantum cascade lasers. *Journal of Computational Electronics*, 7(3) :432–435, 2008.
- [73] T Kubis, C Yeh, P Vogl, A Benz, G Fasching, and C Deutsch. Theory of nonequilibrium quantum transport and energy dissipation in terahertz quantum cascade lasers. *Physical Review B*, 79(19) :195323, 2009.
- [74] P Harrison. The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers. *Applied physics letters*, 75(18) :2800–2802, 1999.
- [75] C Koeniguer, G Dubois, A Gomez, and V Berger. Electronic transport in quantum cascade structures at equilibrium. *Physical Review B*, 74(23) :235325, 2006.
- [76] A Buffaz, A Gomez, M Carras, L Doyennette, and V Berger. Role of subband occupancy on electronic transport in quantum cascade detectors. *Physical Review B*, 81(7) :075304, 2010.
- [77] Christopher S. Baird. Quantum cascade laser theory phonon scattering. http://wtamu.edu/~cbaird/qcl/Phonon_Scattering.pdf.
- [78] R. Ferreira and Gerald Bastard. Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single-and multiple-quantum-well structures. *Physical Review B*, 40(2) :1074, 1989.
- [79] Angela Vasanelli, A Leuliet, C Sirtori, A Wade, G Fedorov, D Smirnov, G Bastard, B Vinter, M Giovannini, and Jérôme Faist. Role of elastic scattering mechanisms in gain in AlGaIn quantum cascade lasers. *Applied physics letters*, 89(17) :172120, 2006.
- [80] Nicolas Péré-Laperne, Louis-Anne De Vaultier, Yves Guldner, Gérald Bastard, Giacomo Scalari, Marcella Giovannini, Jérôme Faist, Angela Vasanelli, Sukhdeep Dhillon, and Carlo Sirtori. Inter-landau level scattering and lo-phonon emission in terahertz quantum cascade laser. *Applied Physics Letters*, 91(6) :062102, 2007.
- [81] Zahia Bougrioua, J-L Farvacque, Ingrid Moerman, and Francesca Carosella. 2deg mobility in AlGaIn structures grown by MOVPE. *physica status solidi (b)*, 228(2) :625–628, 2001.
- [82] Takeya Unuma, Masahiro Yoshita, Takeshi Noda, Hiroyuki Sakaki, and Hidefumi Akiyama. Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities. *Journal of applied physics*, 93(3) :1586–1597, 2003.
- [83] RF Kazarinov and RA Suris. Electric and electromagnetic properties of semiconductors with a superlattice. *Sov. Phys. Semicond*, 6(1) :120–131, 1972.
- [84] Harald Willenberg, GH Döhler, and Jerome Faist. Intersubband gain in a Bloch oscillator and quantum cascade laser. *Physical Review B*, 67(8) :085315, 2003.
- [85] Andreas Wacker. Transport in nanostructures : A comparison between nonequilibrium Green functions and density matrices. In *Advances in Solid State Physics*, pages 199–210. Springer, 2001.
- [86] William Shockley. Currents to conductors induced by a moving point charge. *Journal of applied physics*, 9(10) :635–636, 1938.

- [87] Alexandre Delga. *Du phénomène quantique au dispositif macroscopique, transport électronique dans les détecteurs inter-sousbandes*. PhD thesis, Université Paris-Diderot-Paris VII, 2012.
- [88] A Harrer, B Schwarz, S Schuler, P Reininger, A Wirthmüller, H Detz, D MacFarland, T Zederbauer, AM Andrews, M Rothermund, et al. 4.3 μm quantum cascade detector in pixel configuration. *Optics express*, 24(15) :17041–17049, 2016.
- [89] A Delga, M Carras, V Trinité, V Guériaux, L Doyennette, A Nedelcu, H Schneider, and V Berger. Master equation approach of classical noise in intersubband detectors. *Physical Review B*, 85(24) :245414, 2012.
- [90] Esperanza Luna, Álvaro Guzmán, Achim Trampert, and Gabriel Álvarez. Critical role of two-dimensional island-mediated growth on the formation of semiconductor heterointerfaces. *Physical review letters*, 109(12) :126101, 2012.
- [91] L Wendler and E Kändler. Intra-and intersubband plasmon-polaritons in semiconductor quantum wells. *physica status solidi (b)*, 177(1) :9–67, 1993.
- [92] TD Visser, H Blok, Bart Demeulenaere, and D Lenstra. Confinement factors and gain in optical amplifiers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 33(10) :1763–1766, 1997.
- [93] SJ Allen Jr, DC Tsui, and B Vinter. On the absorption of infrared radiation by electrons in semiconductor inversion layers. *Solid State Communications*, 20(4) :425–428, 1976.
- [94] M ZALUŻNY and C Nalewajko. On the absorption of infrared radiation by electrons in step quantum wells. 1995.
- [95] Benedikt Schwarz, Peter Reininger, Andreas Harrer, Donald MacFarland, Hermann Detz, Aaron M Andrews, Werner Schrenk, and Gottfried Strasser. The limit of quantum cascade detectors : A single period device. *Applied Physics Letters*, 111(6) :061107, 2017.
- [96] G Quinchard, C Mismar, M Hakl, J Pereira, Q Lin, S Lepillet, V Trinité, A Evirgen, Emilien Peytavit, JL Reverchon, et al. High speed, antenna-enhanced 10.3 μm quantum cascade detector. *Applied Physics Letters*, 120(9) :091108, 2022.
- [97] Alexandre Delga. Quantum cascade detectors : a review. *Mid-infrared Optoelectronics*, pages 337–377, 2020.
- [98] Benedikt Schwarz, Peter Reininger, Daniela Ristanić, Hermann Detz, Aaron Maxwell Andrews, Werner Schrenk, and Gottfried Strasser. Monolithically integrated mid-infrared lab-on-a-chip using plasmonics and quantum cascade structures. *Nature communications*, 5(1) :1–7, 2014.
- [99] Daniele Palaferri, Yanko Todorov, Azzurra Bigioli, Alireza Mottaghizadeh, Djamal Gacemi, Allegra Calabrese, Angela Vasanelli, Lianhe Li, A Giles Davies, Edmund H Linfield, et al. Room-temperature nine- μm -wavelength photodetectors and ghz-frequency heterodyne receivers. *Nature*, 556(7699) :85–88, 2018.
- [100] Matthieu Duperron. *Conception et caractérisation de nanoantennes plasmoniques pour la photodétection infrarouge refroidie*. PhD thesis, Troyes, 2013.
- [101] Daniele Palaferri. *Antenna resonators for quantum infrared detectors and fast heterodyne receivers*. PhD thesis, Sorbonne Paris Cité, 2018.

- [102] Yanko Todorov, Lorenzo Tosetto, Jean Teissier, Aaron Maxwell Andrews, Pavel Klang, Raffaele Colombelli, Isabelle Sagnes, Gottfried Strasser, and Carlo Sirtori. Optical properties of metal-dielectric-metal microcavities in the thz frequency range. *Optics express*, 18(13) :13886–13907, 2010.
- [103] Constantine A Balanis. *Antenna theory : analysis and design*. John wiley & sons, 2015.
- [104] Grégory Quinchard. *Détecteur infrarouge hétérodyne à cascade quantique*. PhD thesis, Lille, 2021.
- [105] Simon Vassant, Alexandre Archambault, François Marquier, Fabrice Pardo, Ulf Gennser, Antonella Cavanna, Jean-Luc Pelouard, and Jean-Jacques Greffet. Epsilon-near-zero mode for active optoelectronic devices. *Physical review letters*, 109(23) :237401, 2012.
- [106] Hermann Haus. Waves and fields in optoelectronics. *PRENTICE-HALL, INC., ENGLEWOOD CLIFFS, NJ 07632, USA, 1984, 402*, page 210, 1984.
- [107] Wonjoo Suh, Zheng Wang, and Shanhui Fan. Temporal coupled-mode theory and the presence of non-orthogonal modes in lossless multimode cavities. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 40(10) :1511–1518, 2004.
- [108] Mathieu Jeannin, Thomas Bonazzi, Djamel Gacemi, Angela Vasanelli, Lianhe Li, Alexander Giles Davies, Edmund Linfield, Carlo Sirtori, and Yanko Todorov. Absorption engineering in an ultrasubwavelength quantum system. *Nano letters*, 20(6) :4430–4436, 2020.
- [109] A Delga, L Doyennette, M Carras, V Trinité, and P Bois. Johnson and shot noises in intersubband detectors. *Applied Physics Letters*, 102(16) :163507, 2013.
- [110] Abraham Lee. pyswarm. <https://github.com/tisimst/pyswarm>, September 2015.
- [111] Emmanuel Dupont, HC Liu, AJ SpringThorpe, W Lai, and M Extavour. Vacuum-field rabi splitting in quantum-well infrared photodetectors. *Physical Review B*, 68(24) :245320, 2003.
- [112] Alexander Benz, Salvatore Campione, Michael W Moseley, Jonathan J Wierer Jr, Andrew A Allerman, Joel R Wendt, and Igal Brener. Optical strong coupling between near-infrared metamaterials and intersubband transitions in iii-nitride heterostructures. *ACS Photonics*, 1(10) :906–911, 2014.
- [113] JM Manceau, G Biasiol, NL Tran, I Carusotto, and R Colombelli. Immunity of intersubband polaritons to inhomogeneous broadening. *Physical Review B*, 96(23) :235301, 2017.
- [114] Yanko Todorov, Lorenzo Tosetto, Aymeric Delteil, Angela Vasanelli, C Sirtori, AM Andrews, and G Strasser. Polaritonic spectroscopy of intersubband transitions. *Physical Review B*, 86(12) :125314, 2012.
- [115] Aymeric Delteil, Angela Vasanelli, Yanko Todorov, Bruno Paulillo, Giorgio Biasiol, Lucia Sorba, and Carlo Sirtori. Gate controlled coupling of intersubband plasmons. *Applied Physics Letters*, 102(3) :031102, 2013.
- [116] Luca Sapienza, Angela Vasanelli, Cristiano Ciuti, Christophe Manquest, Carlo Sirtori, Raffaele Colombelli, and Ulf Gennser. Photovoltaic probe of cavity polaritons in a quantum cascade structure. *Applied physics letters*, 90(20) :201101, 2007.

- [117] Yanko Todorov and Carlo Sirtori. Intersubband polaritons in the electrical dipole gauge. *Physical Review B*, 85(4) :045304, 2012.
- [118] Michel Gross and Serge Haroche. Superradiance : An essay on the theory of collective spontaneous emission. *Physics reports*, 93(5) :301–396, 1982.
- [119] Mathieu Jeannin, Jean-Michel Manceau, and Raffaele Colombelli. Unified description of saturation and bistability of intersubband transitions in the weak and strong light-matter coupling regimes. *Physical review letters*, 127(18) :187401, 2021.
- [120] Fam Le Kien and Arno Rauschenbeutel. Nanofiber-mediated chiral radiative coupling between two atoms. *Physical Review A*, 95(2) :023838, 2017.
- [121] Michael Hakl, Quyang Lin, Sylvie Lepillet, Maximilien Billet, Jean-Francois Lampin, Stefano Pirotta, Raffaele Colombelli, Wenjian Wan, JC Cao, Hua Li, et al. Ultrafast quantum-well photodetectors operating at 10 μm with a flat frequency response up to 70 GHz at room temperature. *ACS photonics*, 8(2) :464–471, 2021.
- [122] Maximilian A Schlosshauer. *Decoherence : and the quantum-to-classical transition*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [123] L Esaki and LL Chang. New transport phenomenon in a semiconductor” superlattice”. *Physical Review Letters*, 33(8) :495, 1974.
- [124] Emmanuel Lhuillier, Vincent Guériaux, Virginie Trinité, and Mathieu Carras. Influence of sawtooth patterns on the detection properties of quantum well infrared photodetectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 48(5) :665–668, 2012.
- [125] Cristiano Ciuti and Iacopo Carusotto. Input-output theory of cavities in the ultrastrong coupling regime : The case of time-independent cavity parameters. *Physical Review A*, 74(3) :033811, 2006.
- [126] Heinz-Peter Breuer, Francesco Petruccione, et al. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [127] Goran Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48(2) :119–130, 1976.
- [128] Daniel F Walls and Gerard J Milburn. *Quantum optics*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [129] Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, and Gilbert Grynberg. *Processus d’interaction entre photons et atomes*. Edp Sciences, 2012.
- [130] I Waldmüller, J Förstner, S-C Lee, A Knorr, M Woerner, K Reimann, RA Kaindl, T Elsaesser, R Hey, and KH Ploog. Optical dephasing of coherent intersubband transitions in a quasi-two-dimensional electron gas. *Physical Review B*, 69(20) :205307, 2004.
- [131] Romain Terazzi and Jérôme Faist. A density matrix model of transport and radiation in quantum cascade lasers. *New journal of Physics*, 12(3) :033045, 2010.
- [132] E Dupont, S Fatholouloumi, and HC Liu. Simplified density-matrix model applied to three-well terahertz quantum cascade lasers. *Physical Review B*, 81(20) :205311, 2010.
- [133] Hans Callebaut and Qing Hu. Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 98(10) :104505, 2005.