

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

Bonno Olivier

Encadré par : M. Jean-Luc Thobel

Institut d'Électronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie
Université des Sciences et Technologies de Lille

13 Décembre 2004

1 Introduction

2 Description du modèle

- Transport dans les LCQ
- Détermination des états électroniques
- Inclusion de l'interaction électron-électron

3 Résultats

- LCQ à superréseau à pas variable
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
- Émission à 1,4 THz
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz

4 Conclusion & perspectives

1 Introduction

2 Description du modèle

- Transport dans les LCQ
- Détermination des états électroniques
- Inclusion de l'interaction électron-électron

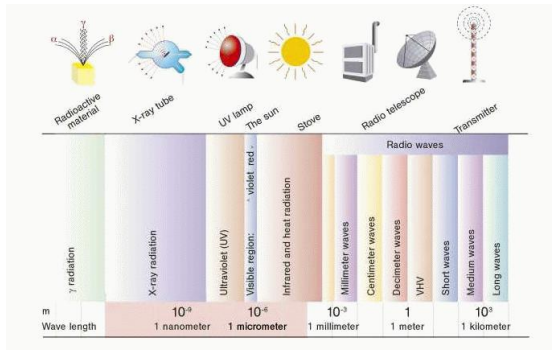
3 Résultats

- LCQ à superréseau à pas variable
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
- Émission à 1,4 THz
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz

4 Conclusion & perspectives

Motivations de l'étude de l'infrarouge

Infrarouge : 300 GHz jusqu'à
30 THz

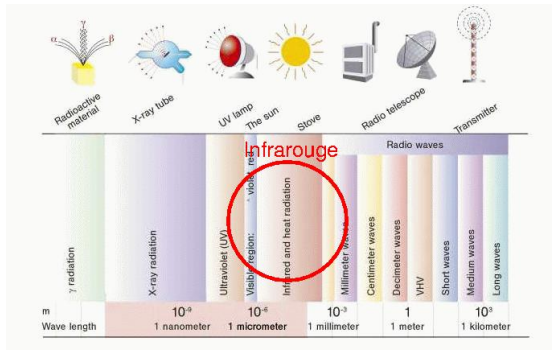


Nombreuses applications possibles :

- Spectroscopie ;
- Télécommunications à très hauts débits ;
- Biologie et imagerie médicale ;
- et beaucoup d'autres . . .

Motivations de l'étude de l'infrarouge

Infrarouge : 300 GHz jusqu'à
30 THz



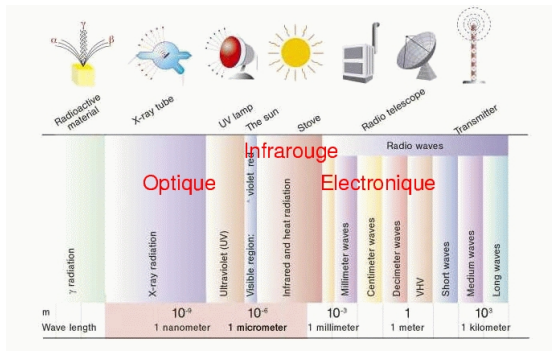
Nombreuses applications possibles :

- Spectroscopie ;
- Télécommunications à très hauts débits ;
- Biologie et imagerie médicale ;
- et beaucoup d'autres . . .

Motivations de l'étude de l'infrarouge

Infrarouge : 300 GHz jusqu'à 30 THz

⇒ entre l'électronique et l'opto-électronique



Nombreuses applications possibles :

- Spectroscopie ;
- Télécommunications à très hauts débits ;
- Biologie et imagerie médicale ;
- et beaucoup d'autres ...

Motivations de l'étude de l'infrarouge

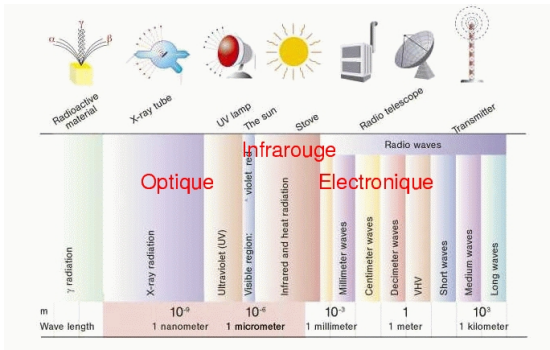
Infrarouge : 300 GHz jusqu'à 30 THz

⇒ entre l'électronique et l'opto-électronique

IR **lointain** entre 500 GHz et 10 THz

Nombreuses applications possibles :

- Spectroscopie ;
- Télécommunications à très hauts débits ;
- Biologie et imagerie médicale ;
- et beaucoup d'autres ...



Motivations de l'étude de l'infrarouge

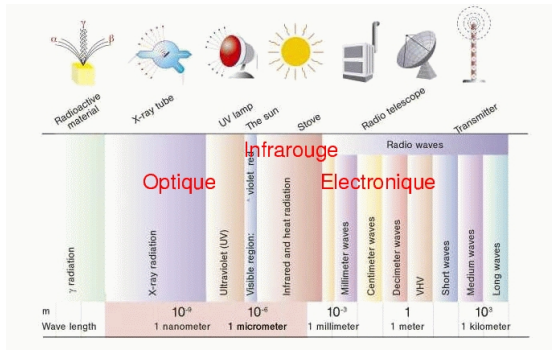
Infrarouge : 300 GHz jusqu'à 30 THz

⇒ entre l'électronique et l'opto-électronique

IR **lointain** entre 500 GHz et 10 THz

Nombreuses applications possibles :

- Spectroscopie ;
- Télécommunications à très hauts débits ;
- Biologie et imagerie médicale ;
- et beaucoup d'autres . . .



Bilan des technologies existantes :

- Inadaptation des composants opto-électroniques (lasers inter-bandes)
- Performances des composants électroniques microondes ↘ au-dessus de ~ 500 GHz

Bilan des technologies existantes :

- Inadaptation des composants opto-électroniques (lasers inter-bandes)
- Performances des composants électroniques microondes ↘ au-dessus de ~ 500 GHz

Bilan des technologies existantes :

- Inadaptation des composants opto-électroniques (lasers inter-bandes)
- Performances des composants électroniques microondes ↘ au-dessus de ~ 500 GHz

Infrarouge lointain \iff Gap térahertz

Bilan des technologies existantes :

- Inadaptation des composants opto-électroniques (lasers inter-bandes)
- Performances des composants électroniques microondes ↘ au-dessus de ~ 500 GHz

Infrarouge lointain \iff Gap térahertz

Quelques ordres de grandeur :

- 1 THz \sim 4 meV
- à température ambiante, $k_B\theta \approx 26$ meV \iff 6,5 THz
- longueurs d'onde de l'ordre de la centaine de μm

Pistes envisagées :

- Génération directe (diode)
- Génération d'harmoniques supérieures (Up conversion)
- Battement de fréquences (Down conversion)
- Les lasers à cascade quantique (LCQ)

Pistes envisagées :

- Génération directe (diode)
- Génération d'harmoniques supérieures (Up conversion)
- Battement de fréquences (Down conversion)
- Les lasers à cascade quantique (LCQ)

LCQ \Rightarrow puissance optique élevée, lumière cohérente, lasers à SC

Pistes envisagées :

- Génération directe (diode)
- Génération d'harmoniques supérieures (Up conversion)
- Battement de fréquences (Down conversion)
- Les lasers à cascade quantique (LCQ)

LCQ \Rightarrow puissance optique élevée, lumière cohérente, lasers à SC

Historique :

1970 : premiers travaux théoriques par Kazarinov et Suris

1994 : première réalisation par Faist *et al.*, Bell Labs

2002 : LCQ en IR lointain par Köhler *et al.*

Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

Ils sont constitués d'une succession d'**étages** :

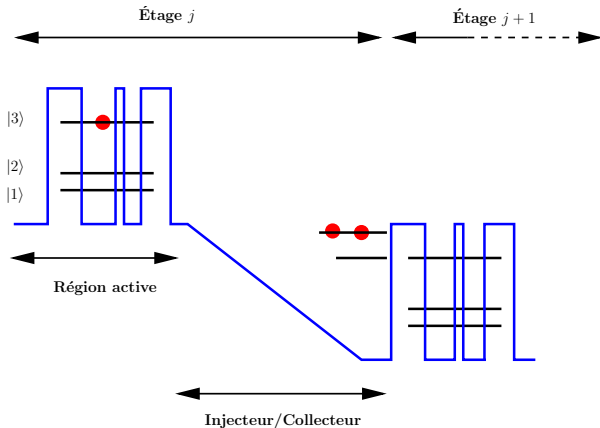
Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

Ils sont constitués d'une succession d'étages :



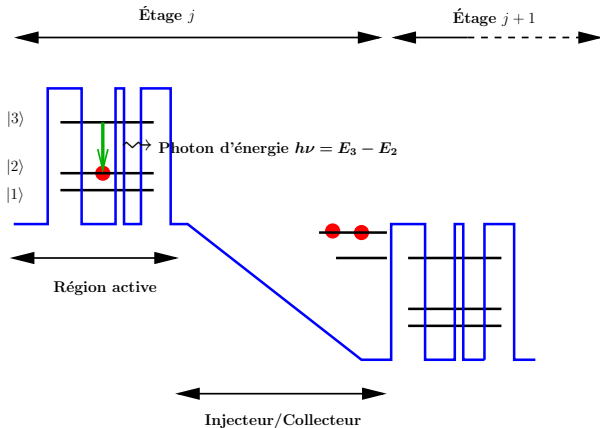
Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

Ils sont constitués d'une succession d'**étages** :



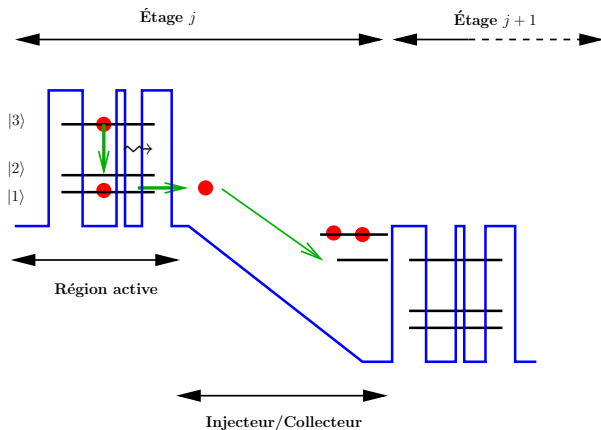
Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

Ils sont constitués d'une succession d'**étages** :



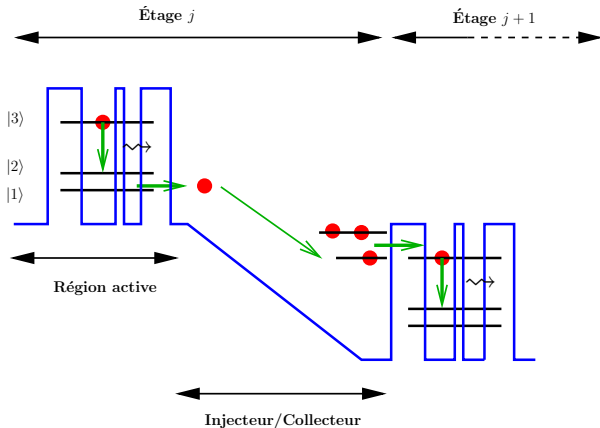
Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

Ils sont constitués d'une succession d'**étages** :



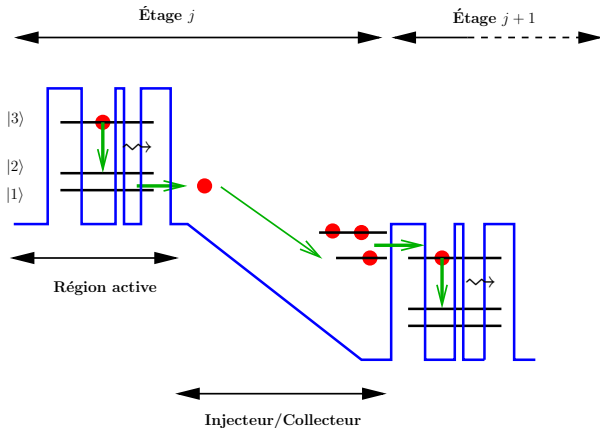
Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

Ils sont constitués d'une succession d'**étages** :



► Amplification grâce à une inversion de population

$$\Delta n = n_3 - n_2$$

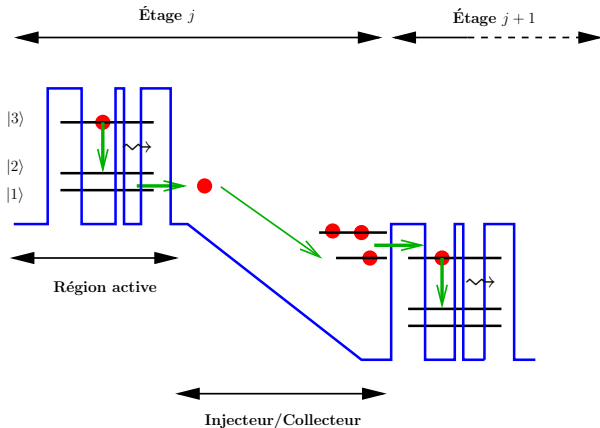
Les lasers à cascade quantique

Principe de fonctionnement

Les LCQ sont des lasers unipolaires à semi-conducteurs

Inversion provient d'un pompage électrique

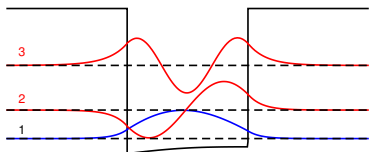
Ils sont constitués d'une succession d'**étages** :



- Amplification grâce à une inversion de population
 $\Delta n = n_3 - n_2$
- courant \perp perpendiculaire

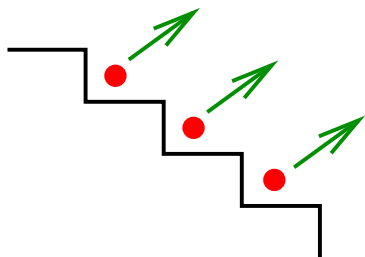
↓
transport quantique

Avantages des LCQ



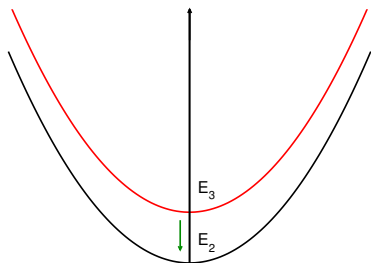
- régler λ dans une large gamme
(3 μm –140 μm)
- 1 électron = (nbr étages \times photons)
 \Rightarrow puissance optique élevée
- laser unipolaire : transition inter-sous-bande
 \Rightarrow raie d'émission étroite

Avantages des LCQ



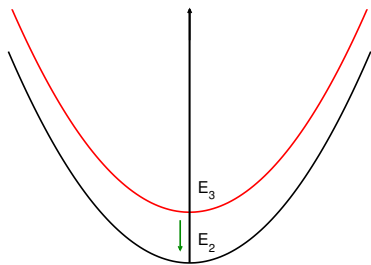
- régler λ dans une large gamme
(3 μm –140 μm)
- 1 électron = (nbr étages \times photons)
 \Rightarrow puissance optique élevée
- laser unipolaire : transition inter-sous-bande
 \Rightarrow raie d'émission étroite

Avantages des LCQ



- régler λ dans une large gamme
(3 μm –140 μm)
- 1 électron = (nbr étages \times photons)
 \Rightarrow puissance optique élevée
- laser unipolaire : transition inter-sous-bande
 \Rightarrow raie d'émission étroite

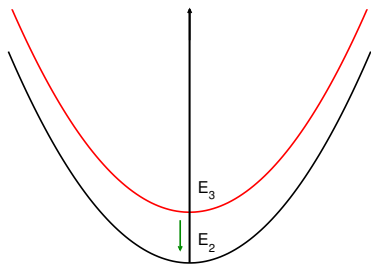
Avantages des LCQ



- régler λ dans une large gamme (3 μm –140 μm)
- 1 électron = (nbr étages \times photons)
 \Rightarrow puissance optique élevée
- laser unipolaire : transition inter-sous-bande
 \Rightarrow raie d'émission étroite



Besoin d'outils de modélisation



- régler λ dans une large gamme (3 μm –140 μm)
- 1 électron = (nbr étages \times photons)
 \Rightarrow puissance optique élevée
- laser unipolaire : transition inter-sous-bande
 \Rightarrow raie d'émission étroite

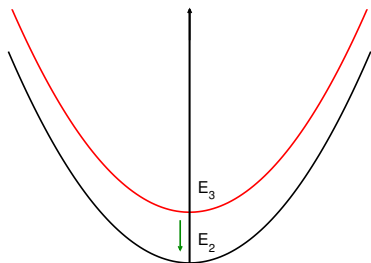


Besoin d'outils de modélisation



Concevoir précisément les structures épitaxiales pour régler ν et Δn

Avantages des LCQ



- régler λ dans une large gamme (3 μm –140 μm)
- 1 électron = (nbr étages \times photons)
 \Rightarrow puissance optique élevée
- laser unipolaire : transition inter-sous-bande
 \Rightarrow raie d'émission étroite



Besoin d'outils de modélisation

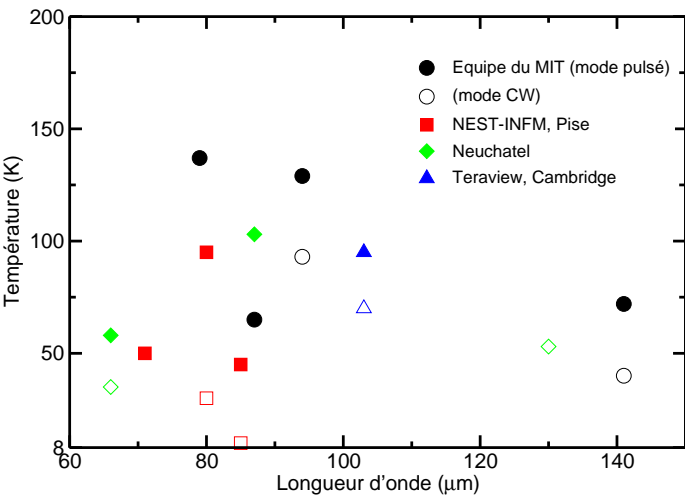


Concevoir précisément les structures épitaxiales pour régler ν et Δn

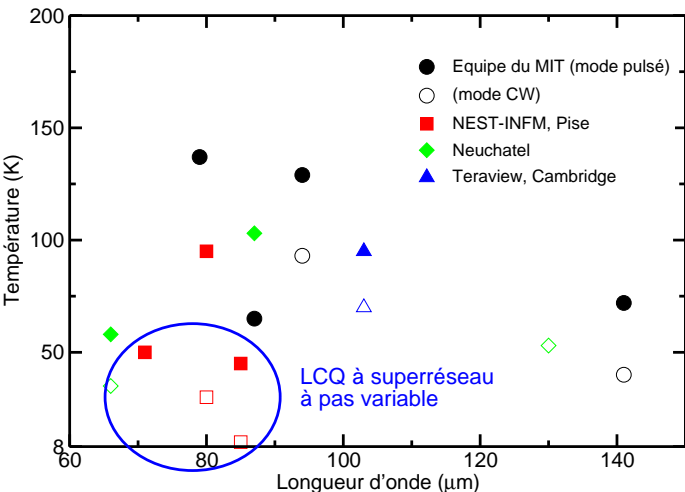


Phénomènes complexes, surtout au THz, avec les inter-sous-bandes
électron-électron

État de l'art des LCQ térahertz

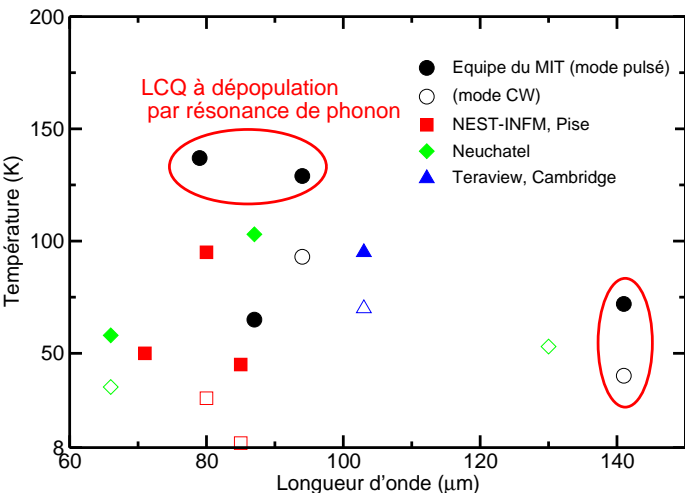


État de l'art des LCQ térahertz



LCQ à SAPV
Premiers LCQ en 2002

État de l'art des LCQ térahertz



LCQ à SAPV
Premiers LCQ en 2002

LCQ à DPRP (MIT)
Fréquence la + basse :
 $\nu = 2,1$ THz
Températures en CW et pulsé les plus élevées

1 Introduction

2 Description du modèle

- Transport dans les LCQ
- Détermination des états électroniques
- Inclusion de l'interaction électron-électron

3 Résultats

- LCQ à superréseau à pas variable
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
- Émission à 1,4 THz
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz

4 Conclusion & perspectives

Équation de **Liouville–Von Neumann** pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho}_{\alpha\beta} = 0, \text{ si } \alpha \neq \beta \text{ (Iotti et al.)} + \text{périodicité des LCQ}$$



Équation de **Liouville–Von Neumann** pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho}_{\alpha\beta} = 0, \text{ si } \alpha \neq \beta \text{ (lotti et al.)} + \text{périodicité des LCQ}$$

⇓

Équation Maître

$$\frac{d\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{dt} = - \sum_{\mu} \lambda_{\mu\nu} \hat{\rho}_{\nu\nu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\mu\mu}(t)] - \lambda_{\nu\mu} \hat{\rho}_{\mu\mu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\nu\nu}(t)]$$

Équation de **Liouville–Von Neumann** pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho}_{\alpha\beta} = 0, \text{ si } \alpha \neq \beta \text{ (lotti et al.)} + \text{périodicité des LCQ}$$

↓

Équation Maître

$$\frac{d\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{dt} = - \sum_{\mu} \lambda_{\mu\nu} \hat{\rho}_{\nu\nu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\mu\mu}(t)] - \lambda_{\nu\mu} \hat{\rho}_{\mu\mu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\nu\nu}(t)]$$

⇒ Résolution par la méthode de **Monte Carlo**

Équation de **Liouville–Von Neumann** pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho}_{\alpha\beta} = 0, \text{ si } \alpha \neq \beta \text{ (Iotti et al.)} + \text{périodicité des LCQ}$$

⇓

Équation Maître

$$\frac{d\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{dt} = - \sum_{\mu} \lambda_{\mu\nu} \hat{\rho}_{\nu\nu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\mu\mu}(t)] - \lambda_{\nu\mu} \hat{\rho}_{\mu\mu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\nu\nu}(t)]$$

⇒ Résolution par la méthode de **Monte Carlo**

Autres équipes modélisant les LCQ :

- Simulations Monte Carlo (Iotti *et al.* Pise et Compagnone *et al.* Rome)
- Modèle quantique basé sur les fonctions de Green (Wacker *et al.* Berlin)
- Équations de bilan (Harrison *et al.* Leeds)

Équation de **Liouville–Von Neumann** pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho}_{\alpha\beta} = 0, \text{ si } \alpha \neq \beta \text{ (Iotti et al.)} + \text{périodicité des LCQ}$$

⇓

Équation Maître

$$\frac{d\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{dt} = - \sum_{\mu} \lambda_{\mu\nu} \hat{\rho}_{\nu\nu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\mu\mu}(t)] - \lambda_{\nu\mu} \hat{\rho}_{\mu\mu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\nu\nu}(t)]$$

⇒ Résolution par la méthode de **Monte Carlo**

Autres équipes modélisant les LCQ :

- Simulations Monte Carlo (Iotti *et al.* Pise et Compagnone *et al.* Rome)
- Modèle quantique basé sur les fonctions de Green (Wacker *et al.* Berlin)
- Équations de bilan (Harrison *et al.* Leeds)

Équation de **Liouville–Von Neumann** pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho}_{\alpha\beta} = 0, \text{ si } \alpha \neq \beta \text{ (Iotti et al.)} + \text{périodicité des LCQ}$$

⇓

Équation Maître

$$\frac{d\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{dt} = - \sum_{\mu} \lambda_{\mu\nu} \hat{\rho}_{\nu\nu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\mu\mu}(t)] - \lambda_{\nu\mu} \hat{\rho}_{\mu\mu}(t) [1 - \hat{\rho}_{\nu\nu}(t)]$$

⇒ Résolution par la méthode de **Monte Carlo**

Autres équipes modélisant les LCQ :

- Simulations Monte Carlo (Iotti et al. Pise et Compagnone et al. Rome)
- Modèle quantique basé sur les fonctions de Green (Wacker et al. Berlin)
- Équations de bilan (Harrison et al. Leeds)

Équation de BenDaniel–Duke (BDD)

$$\hat{\mathcal{H}}(E_\nu)\varphi_\nu(z) = E_\nu\varphi_\nu(z)$$

Équation de BenDaniel–Duke (BDD)

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{E}_\nu)\varphi_\nu(z) = \mathbf{E}_\nu\varphi_\nu(z)$$

Équation de BenDaniel–Duke (BDD)

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{E}_\nu)\varphi_\nu(z) = \mathbf{E}_\nu\varphi_\nu(z)$$

⇒ Utilisation d'une méthode aux valeurs propres itérées

Équation de BenDaniel–Duke (BDD)

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{E}_\nu)\varphi_\nu(z) = \mathbf{E}_\nu\varphi_\nu(z)$$

⇒ Utilisation d'une méthode aux valeurs propres itérées
Couplage avec l'équation de Poisson

Détermination des états électroniques

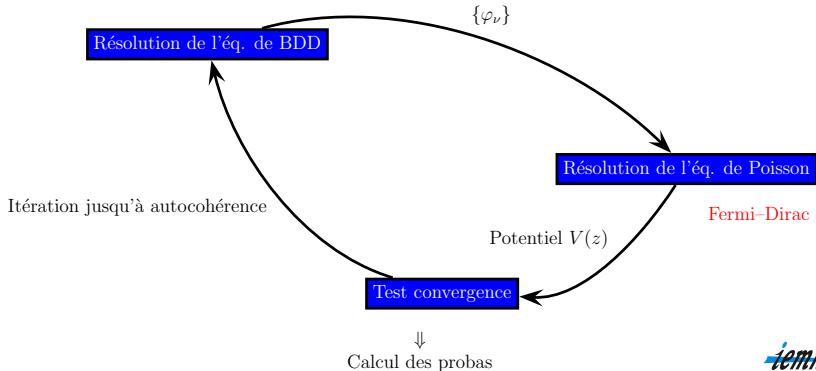
Résolution des équations couplées de Schrödinger et Poisson

Équation de BenDaniel–Duke (BDD)

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{E}_\nu)\varphi_\nu(z) = \mathbf{E}_\nu\varphi_\nu(z)$$

⇒ Utilisation d'une méthode aux valeurs propres itérées
Couplage avec l'équation de Poisson

⇒ Méthode de résolution auto-cohérente



Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Hypothèses :

- LCQ : structure **infiniment périodique**
- On peut définir un niveau de Fermi local propre à chaque période

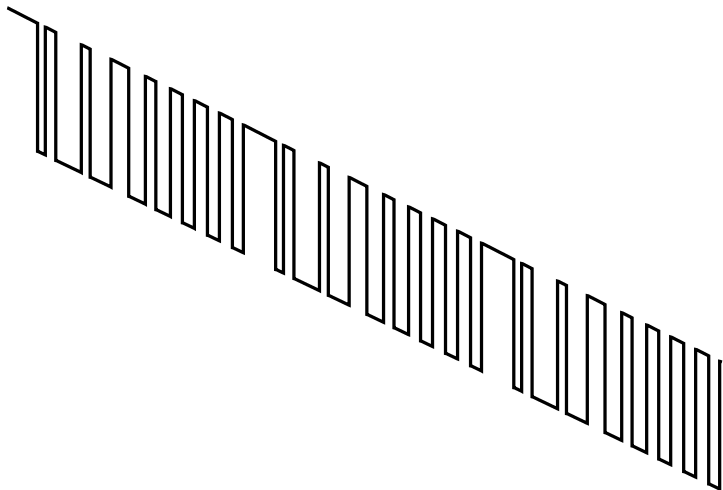
Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

① Schrödinger sur $2p + 1$ étages

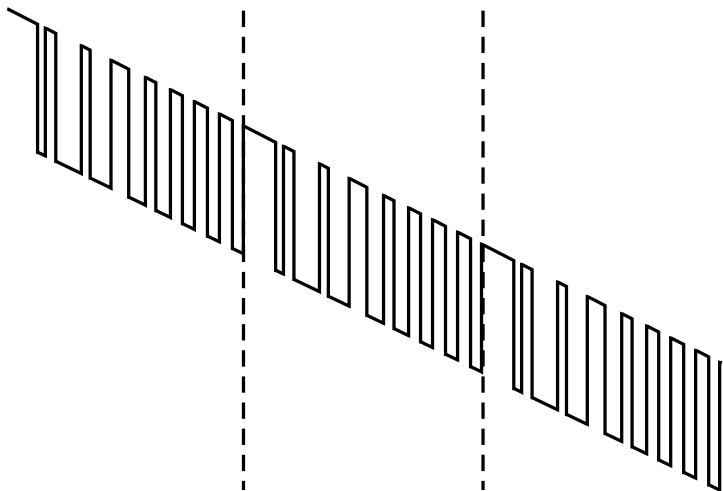


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

① Schrödinger sur $2p + 1$ étages

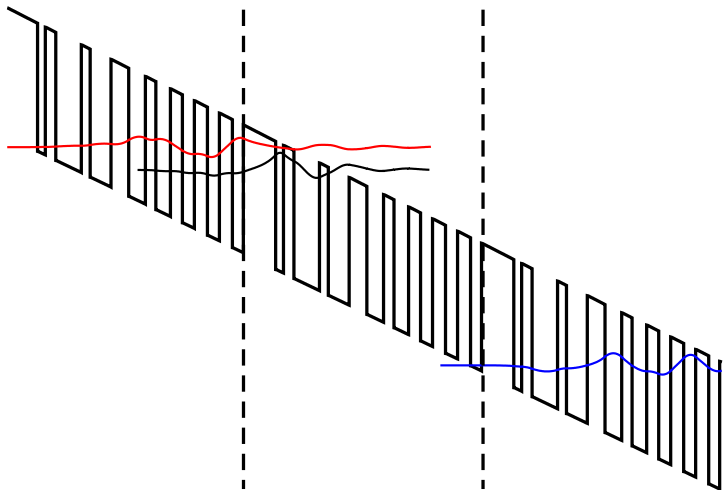


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

② Localisation des fonctions d'ondes aux différents étages

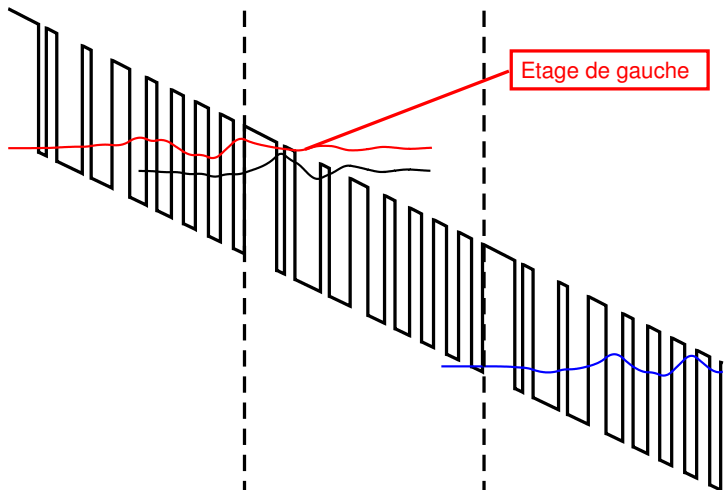


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

② Localisation des fonctions d'ondes aux différents étages

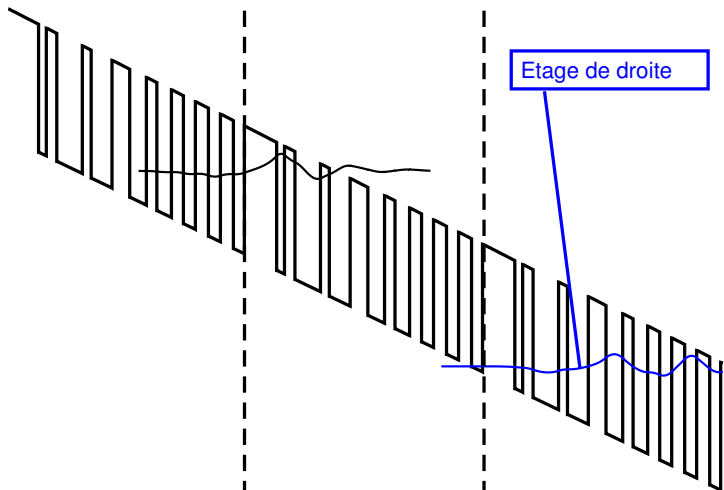


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

② Localisation des fonctions d'ondes aux différents étages

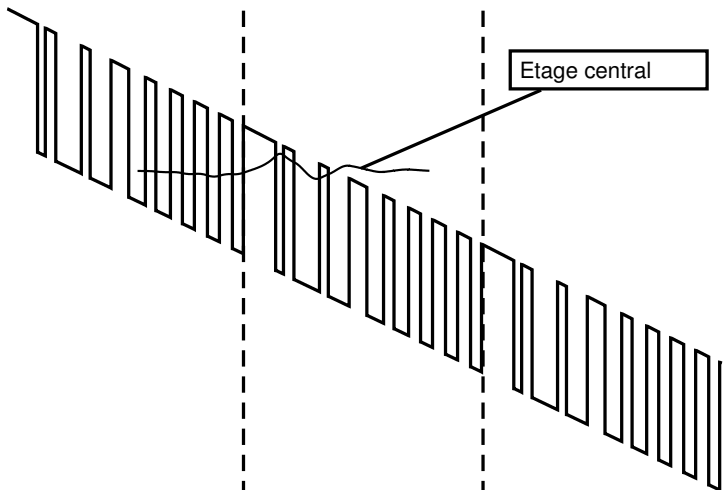


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

② Localisation des fonctions d'ondes aux différents étages

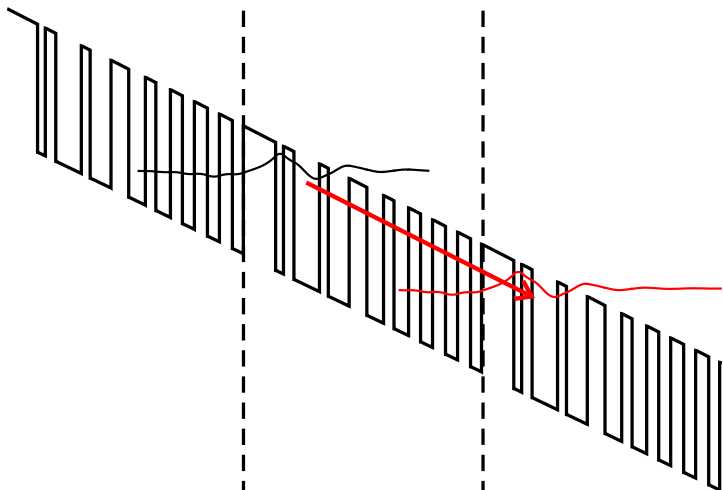


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

③ **Réplication des fonctions d'ondes de l'étage central**

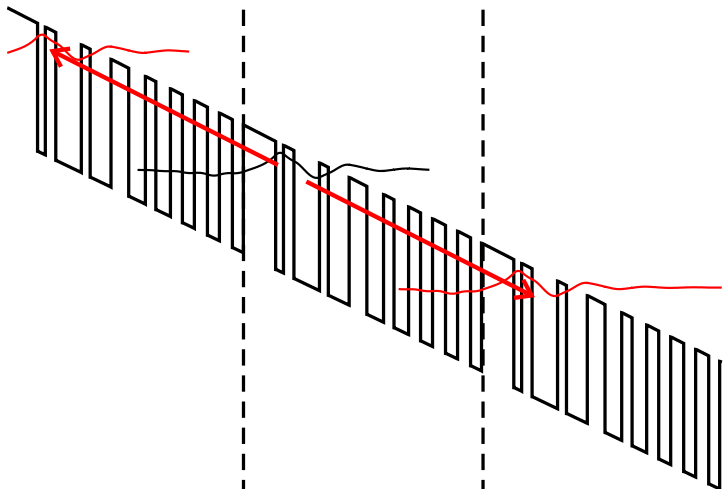


Détermination des états électroniques

Périodisation des états électroniques dans les LCQ

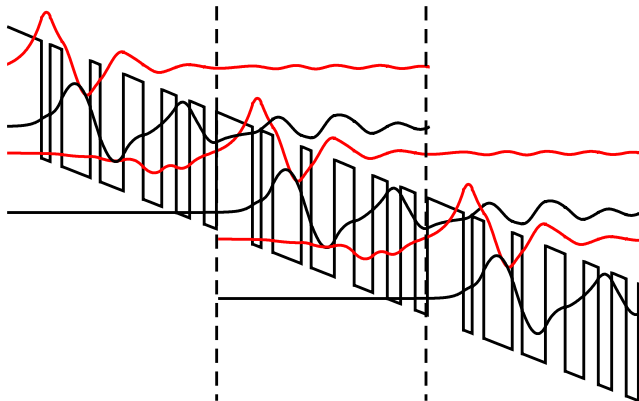
Obtention des états électroniques par **périodisation** sur $2p + 1$ étages

③ **Réplication des fonctions d'ondes de l'étage central**



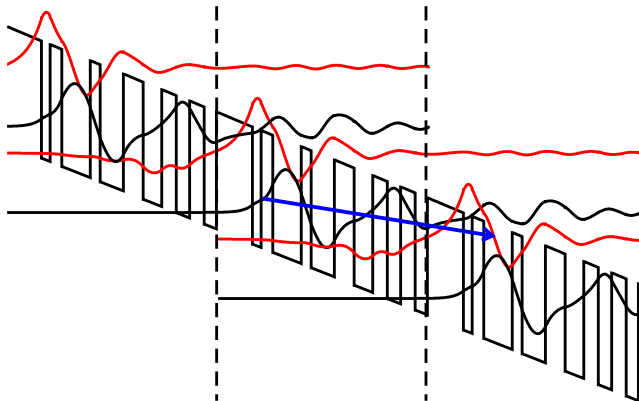
Conditions aux limites

d'après Iotti et al., *Appl. Phys. Lett.*, 78, p. 2902 (2001)



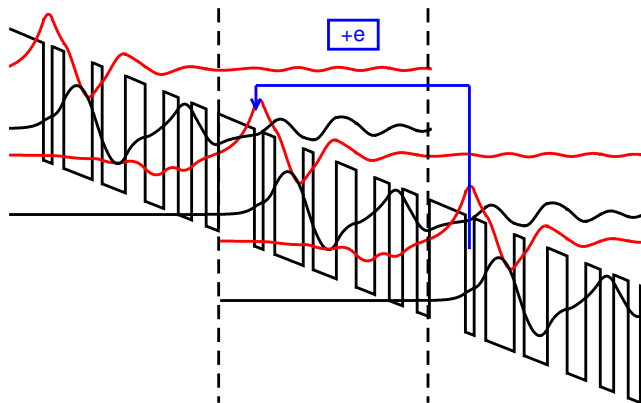
Conditions aux limites

d'après Iotti et al., *Appl. Phys. Lett.*, **78**, p. 2902 (2001)



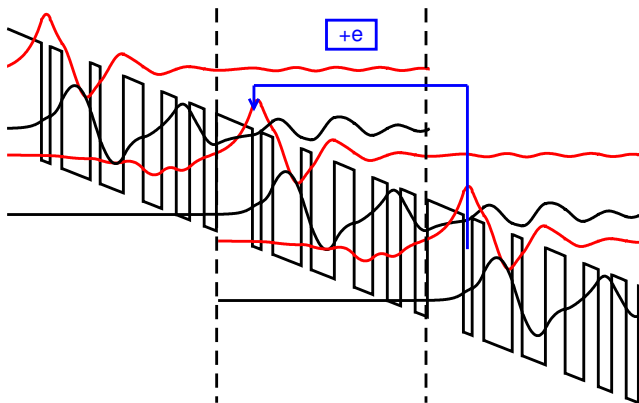
Conditions aux limites

d'après Iotti *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **78**, p. 2902 (2001)



Conditions aux limites

d'après Iotti *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **78**, p. 2902 (2001)



Transitions inter-étages \Rightarrow calcul du courant

Mécanismes d'interaction pris en compte :

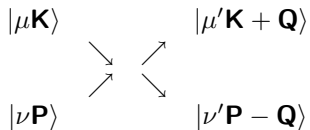
- Phonon optique polaire
- Phonon acoustique
- Interaction sur rugosité d'alliage
- Interaction sur impuretés ionisées
- Interaction électron–électron

Principales caractéristiques :

- Calcul des probabilités intra– et inter–étages
- Facteurs de Bloch
- Principe de Pauli

Interaction électron–électron

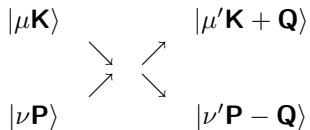
Expression de l'interaction pour un gaz 2D



$$\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} f_{\nu}(\mathbf{P}) \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Interaction électron–électron

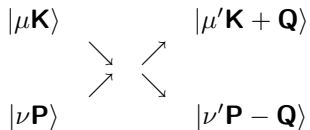
Expression de l'interaction pour un gaz 2D



$$\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} f_{\nu}(\mathbf{P}) \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Interaction électron–électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D



$$\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Interaction électron–électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D

$$\begin{array}{ccc} |\mu\mathbf{K}\rangle & & |\mu'\mathbf{K} + \mathbf{Q}\rangle \\ & \searrow \quad \nearrow & \\ & & \\ & \nearrow \quad \searrow & \\ |\nu\mathbf{P}\rangle & & |\nu'\mathbf{P} - \mathbf{Q}\rangle \end{array} \quad \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Solution : Majoration par $\Lambda_{\mu\mu'}$ en utilisant le **maximum** de l'élément de matrice

Interaction électron–électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D

$$\begin{array}{ccc} |\mu\mathbf{K}\rangle & & |\mu'\mathbf{K} + \mathbf{Q}\rangle \\ & \searrow \quad \nearrow & \\ & & \\ & \nearrow \quad \searrow & \\ |\nu\mathbf{P}\rangle & & |\nu'\mathbf{P} - \mathbf{Q}\rangle \end{array} \quad \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Solution : Majoration par $\Lambda_{\mu\mu'}$ en utilisant le **maximum** de l'élément de matrice

$$|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 \leq \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2$$

Interaction électron–électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D

$$\begin{array}{ccc} |\mu\mathbf{K}\rangle & & |\mu'\mathbf{K} + \mathbf{Q}\rangle \\ \swarrow & \searrow & \nearrow \\ & & |\nu'\mathbf{P} - \mathbf{Q}\rangle \\ \nwarrow & \nearrow & \\ |\nu\mathbf{P}\rangle & & \end{array} \quad \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Solution : Majoration par $\Lambda_{\mu\mu'}$ en utilisant le **maximum** de l'élément de matrice

$$|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 \leq \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2$$

$$\implies \text{On } \mathbf{majore} \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \text{ par } \Lambda_{\mu\mu'} \propto \sum_{\nu\nu'} \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2 n_{\nu}$$

Interaction électron–électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D

$$\begin{array}{ccc} |\mu\mathbf{K}\rangle & & |\mu'\mathbf{K} + \mathbf{Q}\rangle \\ \swarrow & \searrow & \swarrow \\ & & |\nu'\mathbf{P} - \mathbf{Q}\rangle \\ \nwarrow & \nearrow & \\ |\nu\mathbf{P}\rangle & & \end{array} \quad \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Solution : Majoration par $\Lambda_{\mu\mu'}$ en utilisant le **maximum** de l'élément de matrice

$$|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 \leq \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2$$

\implies On **majore** $\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K})$ par $\Lambda_{\mu\mu'} \propto \sum_{\nu\nu'} \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2 n_{\nu}$ puis **réjection**...

Interaction électron-électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D

$$\begin{array}{ccc} |\mu\mathbf{K}\rangle & & |\mu'\mathbf{K} + \mathbf{Q}\rangle \\ \swarrow \quad \searrow & & \swarrow \quad \searrow \\ |\nu\mathbf{P}\rangle & & |\nu'\mathbf{P} - \mathbf{Q}\rangle \end{array} \quad \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Solution : Majoration par $\Lambda_{\mu\mu'}$ en utilisant le **maximum** de l'élément de matrice

$$|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 \leq \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2$$

\Rightarrow On **major**e $\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K})$ par $\Lambda_{\mu\mu'} \propto \sum_{\nu\nu'} \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2 n_{\nu}$ puis **réjection**...



majoration large $\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \ll \Lambda_{\mu\mu'}$

Interaction électron–électron

Expression de l'interaction pour un gaz 2D

$$\begin{array}{ccc} |\mu\mathbf{K}\rangle & & |\mu'\mathbf{K} + \mathbf{Q}\rangle \\ \swarrow & \searrow & \\ & & \\ \searrow & \swarrow & \\ |\nu\mathbf{P}\rangle & & |\nu'\mathbf{P} - \mathbf{Q}\rangle \end{array} \quad \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \propto \sum_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{P}} \underbrace{f_{\nu}(\mathbf{P})}_{\text{inconnue!}} \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 d\psi$$

Solution : Majoration par $\Lambda_{\mu\mu'}$ en utilisant le **maximum** de l'élément de matrice

$$|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q})|^2 \leq \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2$$

\Rightarrow On **majore** $\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K})$ par $\Lambda_{\mu\mu'} \propto \sum_{\nu\nu'} \mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}^2 n_{\nu}$ puis **réjection**...



majoration large $\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) \ll \Lambda_{\mu\mu'}$

Technique **très coûteuse** en temps calcul

Interaction électron–électron

Principe de l'algorithme

- 1 Tirage de l'électron partenaire au hasard
- 2 Vérification de la conservation de l'énergie
- 3 Réjection sur l'élément de matrice $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2$
- 4 Détermination des états finaux selon une relation de dispersion de bandes paraboliques
- 5 Principe de Pauli sur les états finaux des deux électrons

Interaction électron–électron

Principe de l'algorithme

- 1 Tirage de l'électron partenaire **au hasard**
- 2 **Vérification de la conservation de l'énergie**
- 3 Réjection sur l'élément de matrice $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2$
- 4 Détermination des états finaux selon une relation de dispersion de bandes paraboliques
- 5 Principe de Pauli sur les états finaux des **deux électrons**

Interaction électron–électron

Principe de l'algorithme

- 1 Tirage de l'électron partenaire **au hasard**
- 2 Vérification de la conservation de l'énergie
- 3 **Réjection sur l'élément de matrice $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2$**
- 4 Détermination des états finaux selon une relation de dispersion de bandes paraboliques
- 5 Principe de Pauli sur les états finaux des **deux électrons**

Interaction électron–électron

Principe de l'algorithme

- 1 Tirage de l'électron partenaire **au hasard**
- 2 Vérification de la conservation de l'énergie
- 3 Réjection sur l'élément de matrice $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2$
- 4 **Détermination des états finaux selon une relation de dispersion de bandes paraboliques**
- 5 Principe de Pauli sur les états finaux des **deux électrons**

Interaction électron–électron

Principe de l'algorithme

- 1 Tirage de l'électron partenaire **au hasard**
- 2 Vérification de la conservation de l'énergie
- 3 Réjection sur l'élément de matrice $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2$
- 4 Détermination des états finaux selon une relation de dispersion de bandes paraboliques
- 5 **Principe de Pauli sur les états finaux des deux électrons**

Comment obtenir le maximum du potentiel coulombien ?

Les éléments de matrice $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$ sont solutions de :

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\mu'\xi'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

LCQ \Rightarrow problèmes liés au grand nombre d'états

1 Calcul des éléments non écrantés $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q)$

- Transport très loin de l'équilibre dans les LCQ \Rightarrow Polarisabilité à réactualiser
- Résolution simplifiée de l'équation tensorielle de l'écrantage car système matriciel de dimension $N^4 \times N^4$

Comment obtenir le maximum du potentiel coulombien ?

Les éléments de matrice $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$ sont solutions de :

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\mu'\xi'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

LCQ \Rightarrow problèmes liés au grand nombre d'états

1 Calcul des éléments non écrantés $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q)$

Problème : nombre d'éléments évolue en puissance quatrième du nombre de sous-bandes N

- Transport très loin de l'équilibre dans les LCQ \Rightarrow Polarisabilité à réactualiser
- Résolution simplifiée de l'équation tensorielle de l'écrantage car système matriciel de dimension $N^4 \times N^4$

Comment obtenir le maximum du potentiel coulombien ?

Les éléments de matrice $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$ sont solutions de :

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

LCQ \Rightarrow problèmes liés au grand nombre d'états

1 Calcul des éléments non écrantés $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q)$

Problème : nombre d'éléments évolue en puissance quatrième du nombre de sous-bandes N

Solution : accélération par un facteur 10^4 grâce à des séries de Fourier

- Transport très loin de l'équilibre dans les LCQ \Rightarrow Polarisabilité à réactualiser
- Résolution simplifiée de l'équation tensorielle de l'écrantage car système matriciel de dimension $N^4 \times N^4$

Comment obtenir le maximum du potentiel coulombien ?

Les éléments de matrice $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$ sont solutions de :

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

LCQ \Rightarrow problèmes liés au grand nombre d'états

1 Calcul des éléments non écrantés $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q)$

Problème : nombre d'éléments évolue en puissance quatrième du nombre de sous-bandes N

Solution : accélération par un facteur 10^4 grâce à des séries de Fourier

2 Transport très loin de l'équilibre dans les LCQ \Rightarrow Polarisabilité à réactualiser

■ Résolution simplifiée de l'équation tensorielle de l'écrantage car système matriciel de dimension $N^4 \times N^4$

Comment obtenir le maximum du potentiel coulombien ?

Les éléments de matrice $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$ sont solutions de :

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

LCQ \Rightarrow problèmes liés au grand nombre d'états

- 1 Calcul des éléments non écrantés $V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q)$
Problème : nombre d'éléments évolue en puissance quatrième du nombre de sous-bandes N
Solution : accélération par un facteur 10^4 grâce à des séries de Fourier
- 2 Transport très loin de l'équilibre dans les LCQ \Rightarrow Polarisabilité à réactualiser
- 3 Résolution simplifiée de l'équation tensorielle de l'écrantage car système matriciel de dimension $N^4 \times N^4$

Calcul auto-cohérent de la polarisabilité

$\Pi_{\xi\xi'}$ dépend de $f_{\xi}(\mathbf{K})$, $f_{\xi'}(\mathbf{K})$ **inconnues** de la simulation

Calcul auto-cohérent de la polarisabilité

$\Pi_{\xi\xi'}$ dépend de $f_{\xi}(\mathbf{K})$, $f_{\xi'}(\mathbf{K})$ **inconnues** de la simulation

$\Pi(Q)$ **hors équilibre** \Rightarrow Majorants e/e à recalculer de manière **auto-cohérente**

Calcul auto-cohérent de la polarisabilité

$\Pi_{\xi\xi'}$ dépend de $f_{\xi}(\mathbf{K})$, $f_{\xi'}(\mathbf{K})$ **inconnues** de la simulation

$\Pi(Q)$ **hors équilibre** \Rightarrow Majorants e/e à recalculer de manière **auto-cohérente**

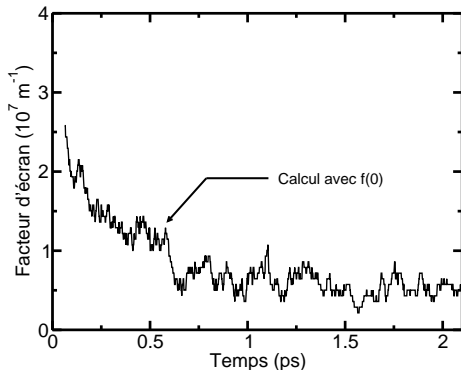
Dans la littérature, on utilise $\Pi_{\xi\xi}(Q \rightarrow 0) \propto f_{\xi}(\mathbf{K} = \vec{0})$

Calcul auto-cohérent de la polarisabilité

$\Pi_{\xi\xi'}$ dépend de $f_{\xi}(\mathbf{K})$, $f_{\xi'}(\mathbf{K})$ **inconnues** de la simulation

$\Pi(Q)$ **hors équilibre** \Rightarrow Majorants e/e à recalculer de manière **auto-cohérente**

Dans la littérature, on utilise $\Pi_{\xi\xi}(Q \rightarrow 0) \propto f_{\xi}(\mathbf{K} = \vec{0})$



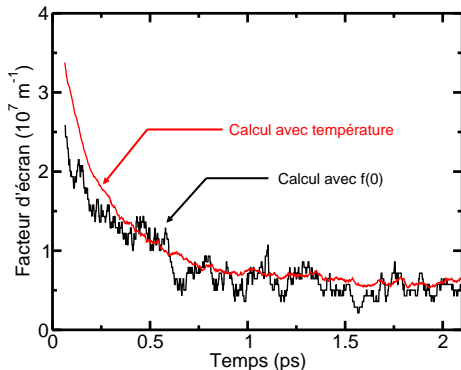
$f_{\xi}(\mathbf{K}, t)$ = grandeur **bruitée**

Calcul auto-cohérent de la polarisabilité

$\Pi_{\xi\xi'}$ dépend de $f_{\xi}(\mathbf{K})$, $f_{\xi'}(\mathbf{K})$ **inconnues** de la simulation

$\Pi(Q)$ **hors équilibre** \Rightarrow Majorants e/e à recalculer de manière **auto-cohérente**

Dans la littérature, on utilise $\Pi_{\xi\xi}(Q \rightarrow 0) \propto f_{\xi}(\mathbf{K} = \vec{0})$



$f_{\xi}(\mathbf{K}, t)$ = grandeur **bruitée**

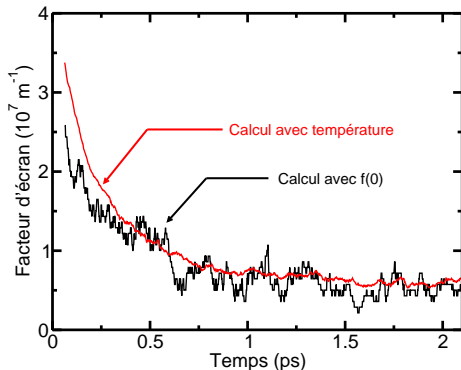
Solution : on utilise un paramètre qui fluctue **moins** en calculant $\langle f_{\xi}(\mathbf{K})[1 - f_{\xi}(\mathbf{K})] \rangle$

Calcul auto-cohérent de la polarisabilité

$\Pi_{\xi\xi'}$ dépend de $f_{\xi}(\mathbf{K})$, $f_{\xi'}(\mathbf{K})$ **inconnues** de la simulation

$\Pi(Q)$ **hors équilibre** \Rightarrow Majorants e/e à recalculer de manière **auto-cohérente**

Dans la littérature, on utilise $\Pi_{\xi\xi}(Q \rightarrow 0) \propto f_{\xi}(\mathbf{K} = \vec{0})$



$f_{\xi}(\mathbf{K}, t) =$ grandeur **bruitée**

Solution : on utilise un paramètre qui fluctue **moins** en calculant $\langle f_{\xi}(\mathbf{K})[1 - f_{\xi}(\mathbf{K})] \rangle$



Température électronique de sous-bande

Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

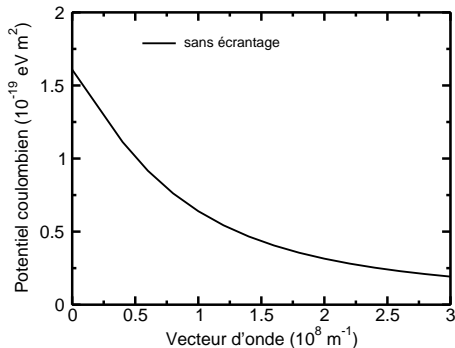
$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\mu'\xi'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale

Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\mu'\xi'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

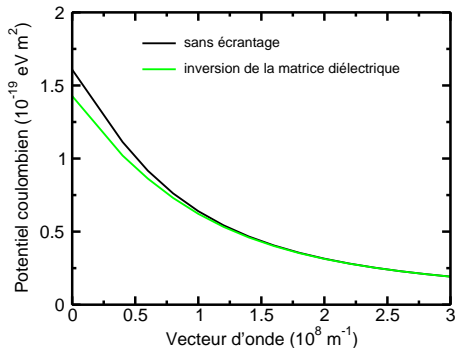
Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale



Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\mu'\xi'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

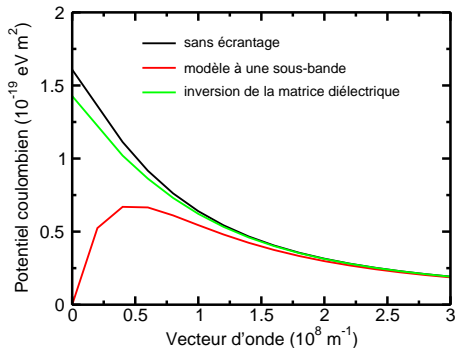
Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale



Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale

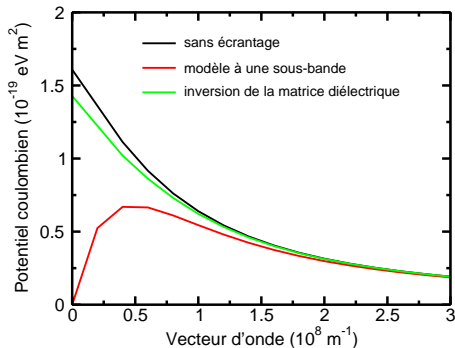


Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale

⇒ Erroné pour les transitions inter-sous-bandes



Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

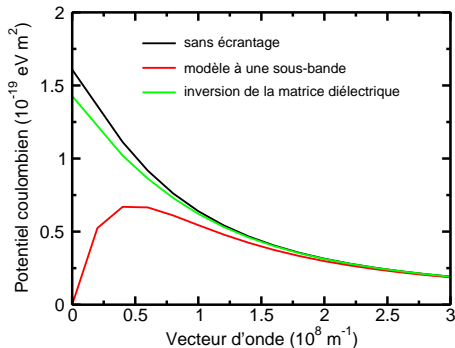
Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale

⇒ Erroné pour les transitions inter-sous-bandes

Solution proposée :

Retenir quelques termes

dans $\sum_{\xi\xi'}$



Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

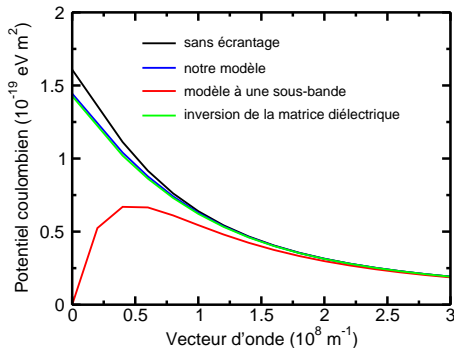
Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale

⇒ Erroné pour les transitions inter-sous-bandes

Solution proposée :

Retenir quelques termes

dans $\sum_{\xi\xi'}$



Résolution de l'équation tensorielle de l'écrantage

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{ecr}}(Q) = V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\text{nu}}(Q) + \sum_{\xi\xi'} V_{\mu\xi\xi'\nu'}^{\text{nu}}(Q) \Pi_{\xi\xi'}(Q) V_{\xi\nu\xi'\nu'}^{\text{ecr}}(Q)$$

Dans la littérature, on suppose que tous les éléments de matrice sont écrantés par la sous-bande fondamentale

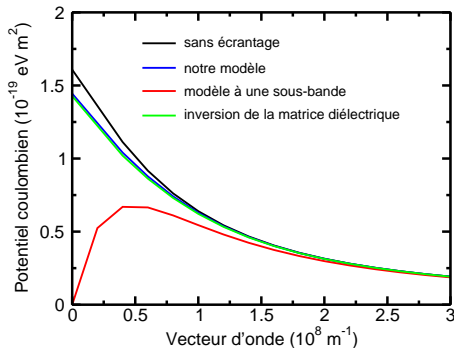
⇒ Erroné pour les transitions inter-sous-bandes

Solution proposée :

Retenir quelques termes

dans $\sum_{\xi\xi'}$

⇒ Comportement rectifié en $Q \rightarrow 0$



1 Introduction

2 Description du modèle

- Transport dans les LCQ
- Détermination des états électroniques
- Inclusion de l'interaction électron-électron

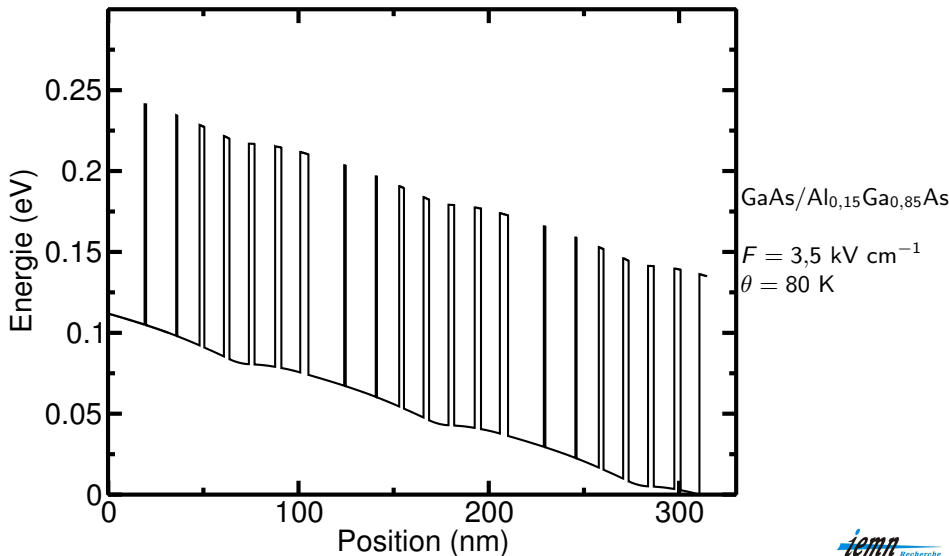
3 Résultats

- LCQ à superréseau à pas variable
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
- Émission à 1,4 THz
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz

4 Conclusion & perspectives

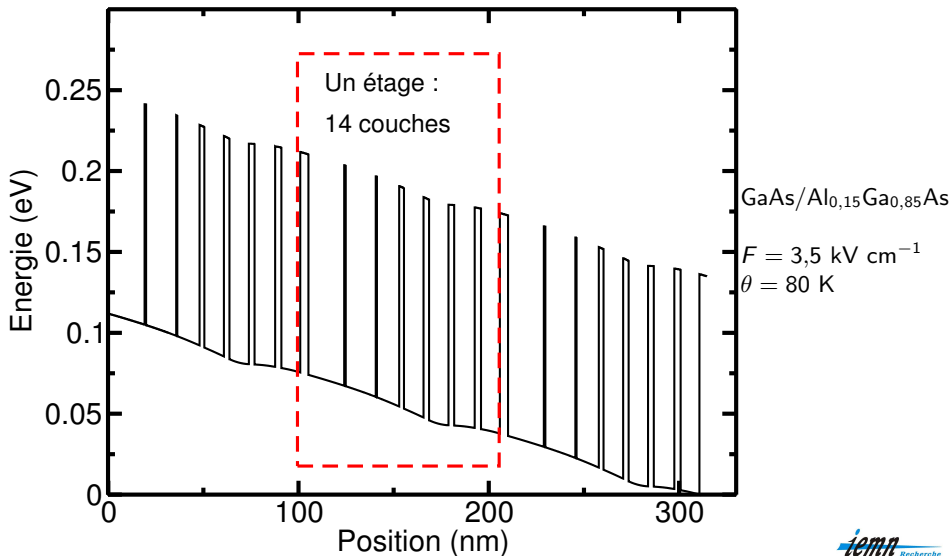
LCQ à superréseau à pas variable

conçu par Köhler *et al.*, *Nature*, 417, p. 156 (2002)



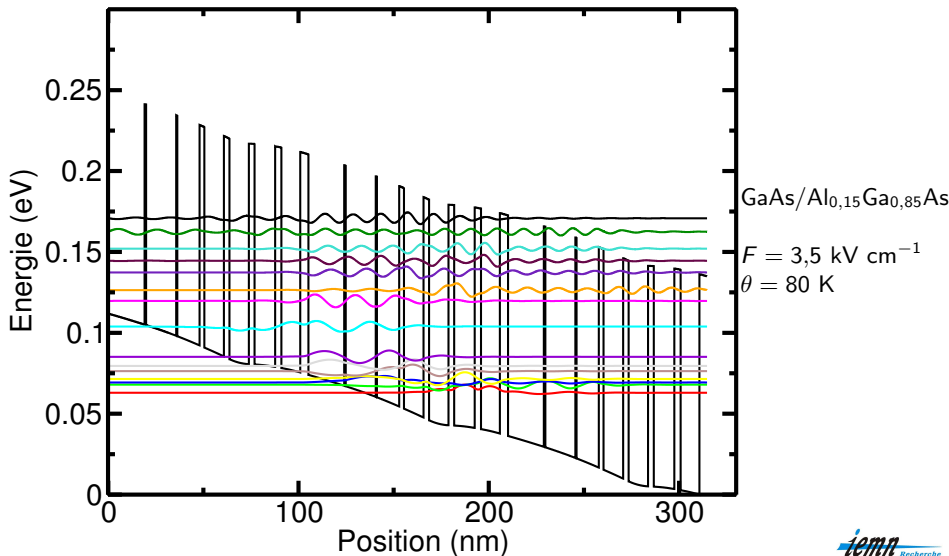
LCQ à superréseau à pas variable

conçu par Köhler *et al.*, *Nature*, 417, p. 156 (2002)



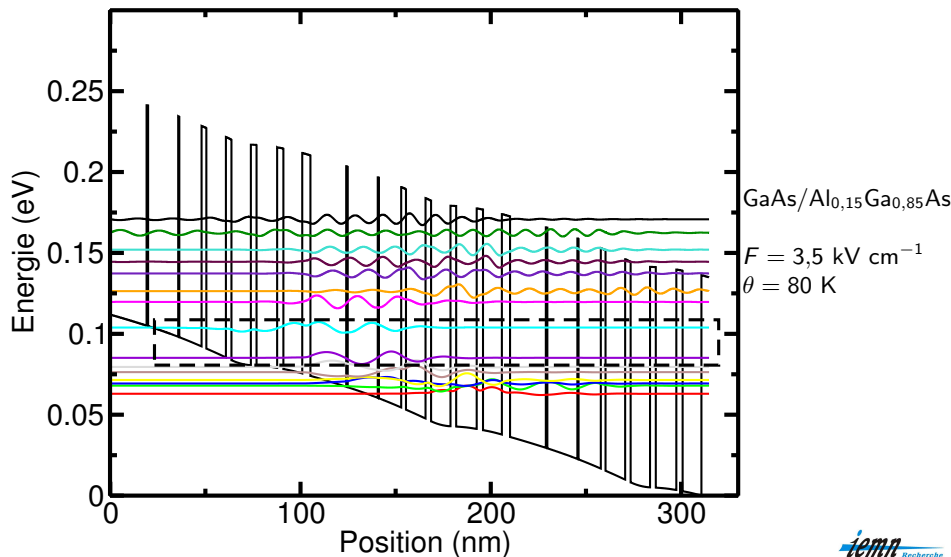
LCQ à superréseau à pas variable

conçu par Köhler *et al.*, *Nature*, 417, p. 156 (2002)



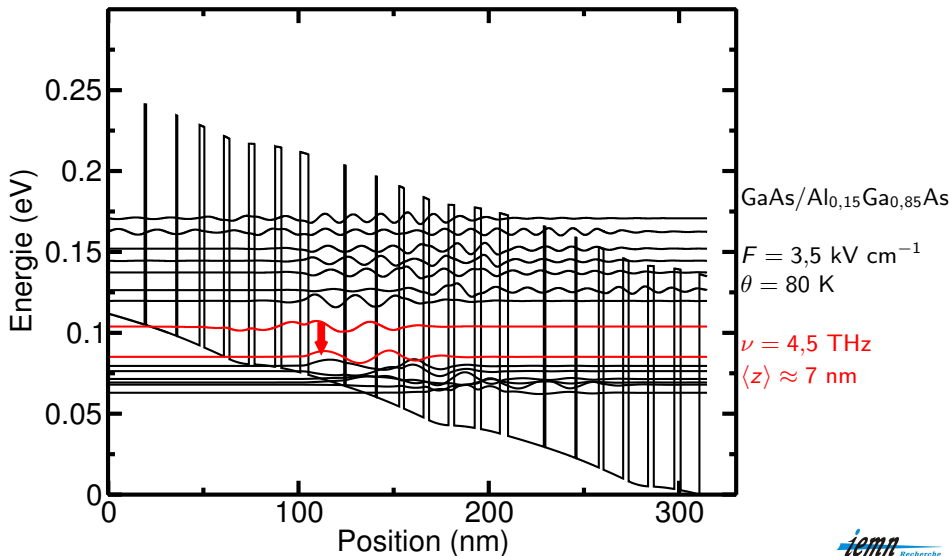
LCQ à superréseau à pas variable

conçu par Köhler *et al.*, *Nature*, 417, p. 156 (2002)



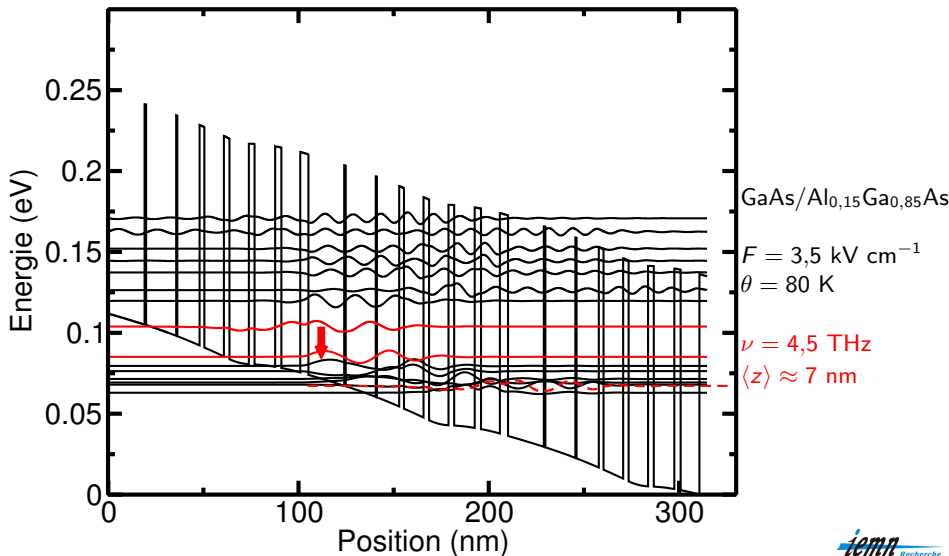
LCQ à superréseau à pas variable

conçu par Köhler *et al.*, *Nature*, 417, p. 156 (2002)

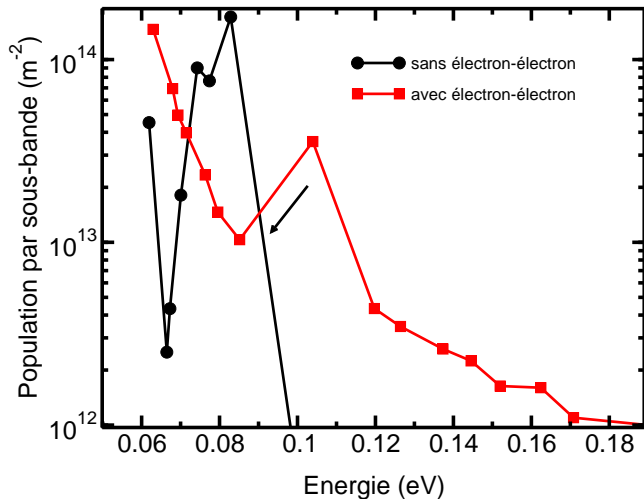


LCQ à superréseau à pas variable

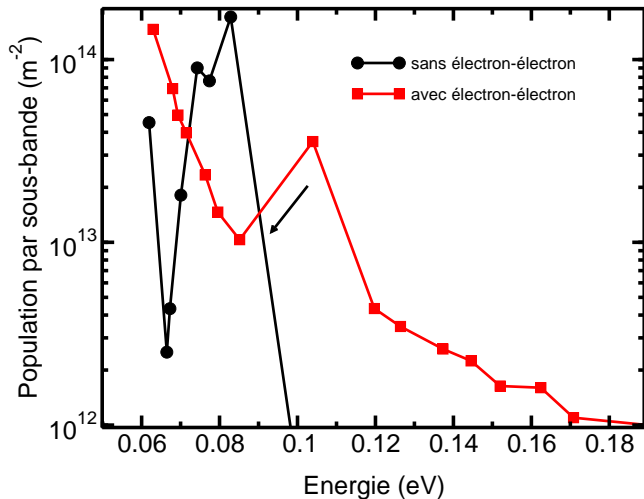
conçu par Köhler *et al.*, *Nature*, 417, p. 156 (2002)



Influence de l'interaction électron-électron

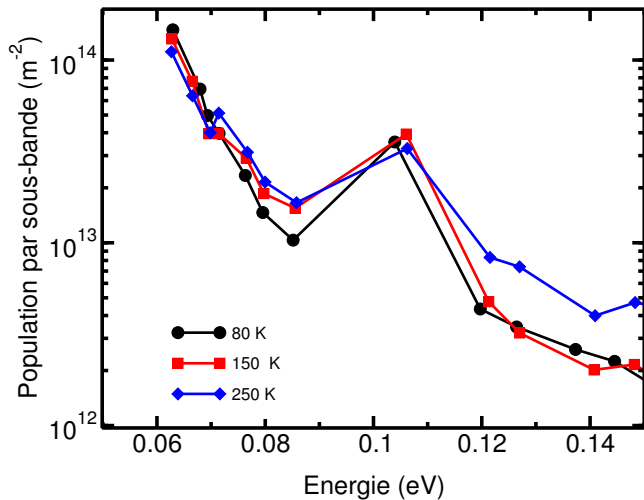


Influence de l'interaction électron-électron

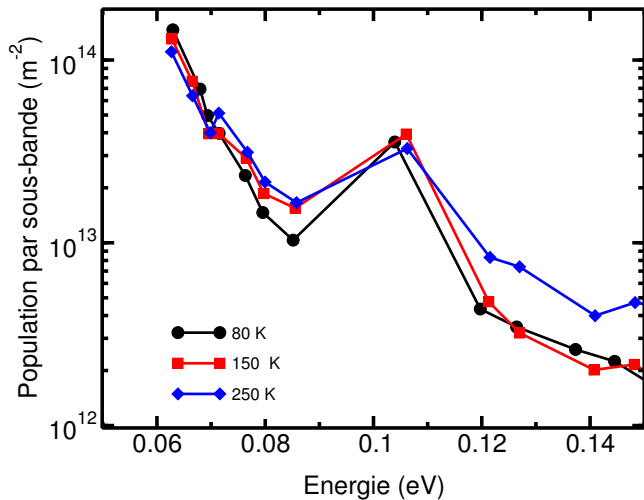


Inversion :
 $\Delta n = 2,5 \times 10^{13} m^{-2}$

Comportement de l'inversion avec la température

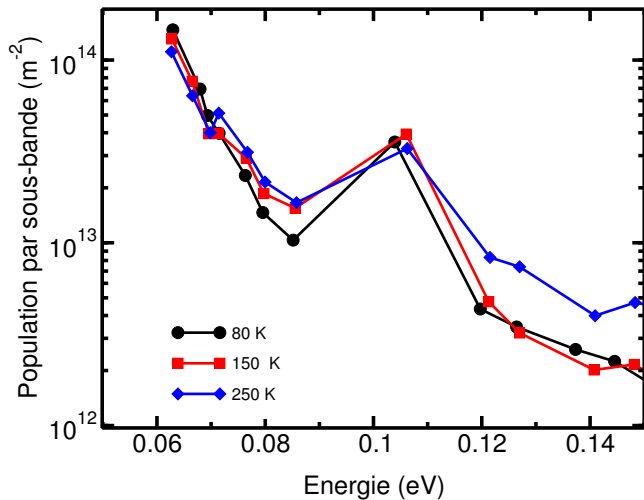


Comportement de l'inversion avec la température



Inversion :
 $\Delta n_{80 K} = 2,5 \times 10^{13} m^{-2}$

Comportement de l'inversion avec la température



Inversion :

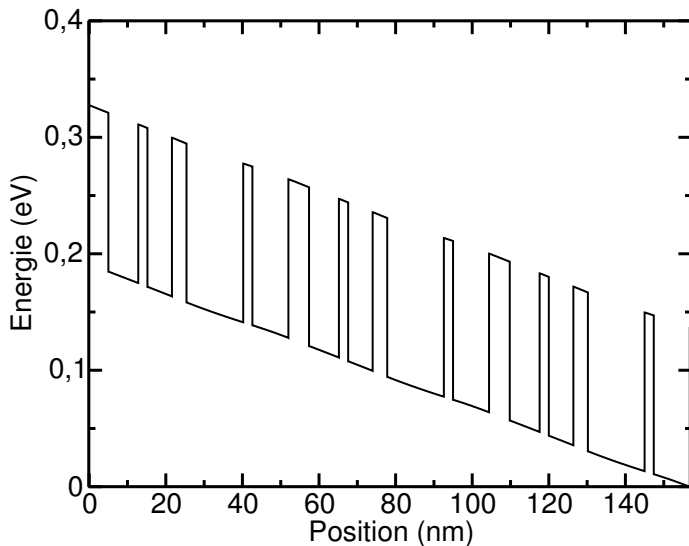
$$\Delta n_{80 \text{ K}} = 2,5 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{250 \text{ K}} = 1,6 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

- 1 Introduction
- 2 Description du modèle
 - Transport dans les LCQ
 - Détermination des états électroniques
 - Inclusion de l'interaction électron-électron
- 3 Résultats
 - LCQ à superréseau à pas variable
 - **LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz**
 - Émission à 1,4 THz
 - LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz
- 4 Conclusion & perspectives

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



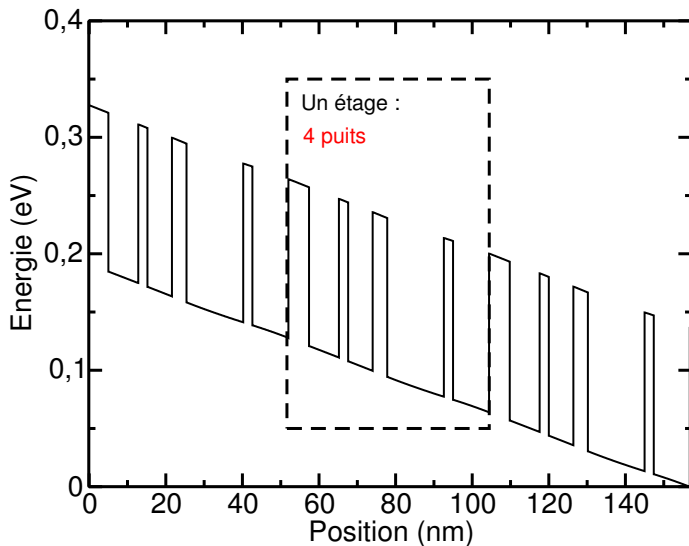
GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As

$F = 12,2$ kV/cm

$\theta = 44$ K

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



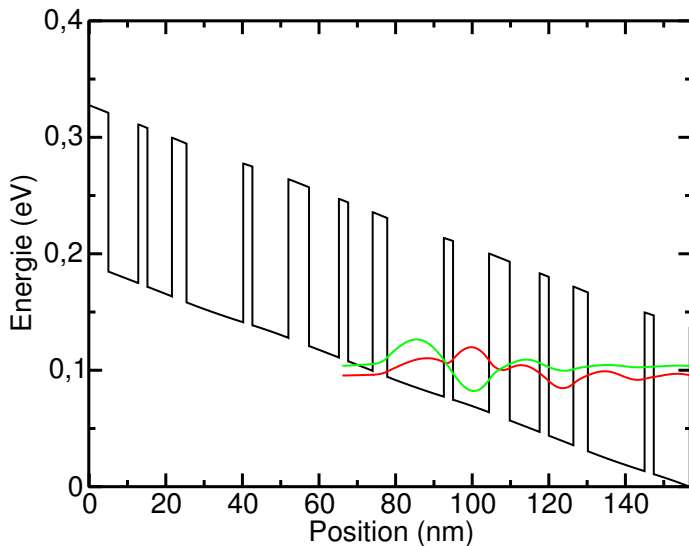
GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$

$\theta = 44 \text{ K}$

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



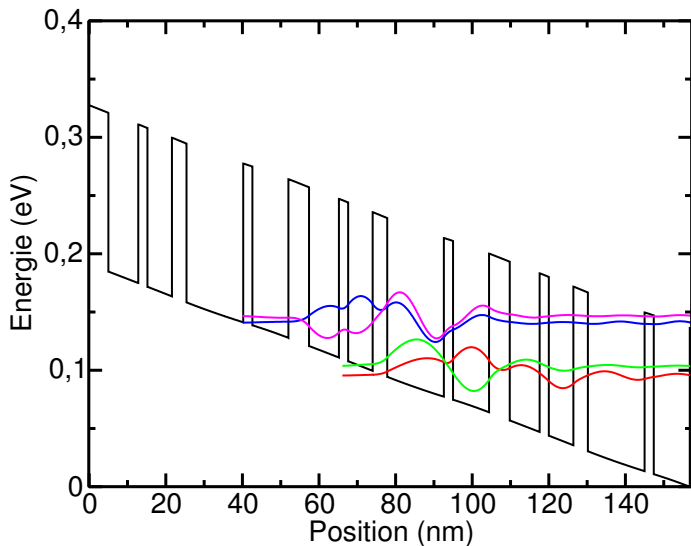
GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As

$F = 12,2$ kV/cm

$\theta = 44$ K

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



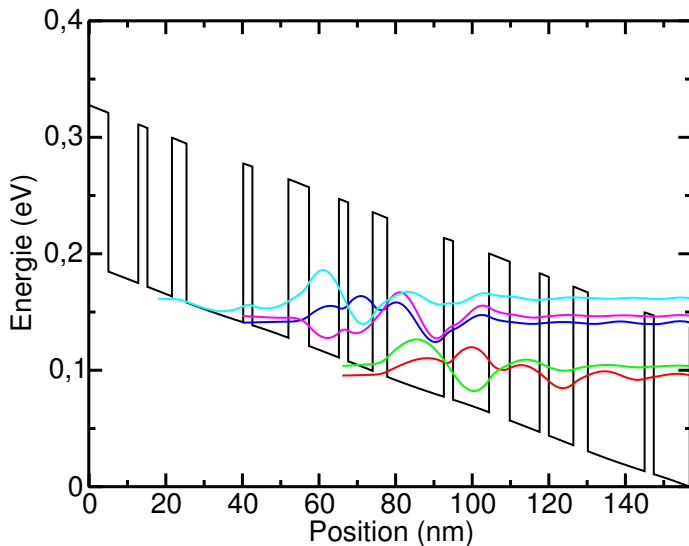
GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As

$F = 12,2$ kV/cm

$\theta = 44$ K

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



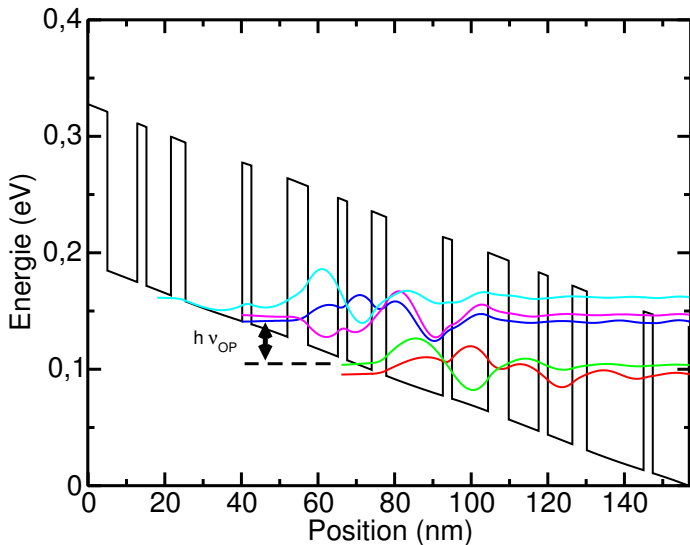
GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$

$\theta = 44 \text{ K}$

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As

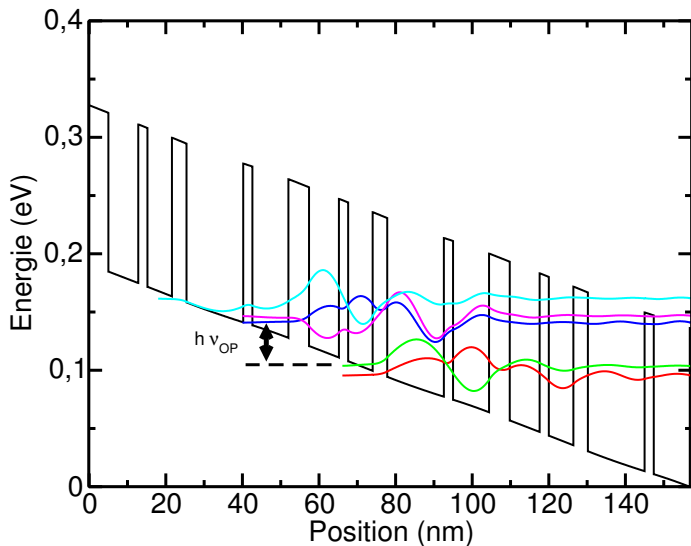
$F = 12,2$ kV/cm

$\theta = 44$ K

$\Delta E = 37$ meV

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



GaAs/Al_{0,15}Ga_{0,85}As

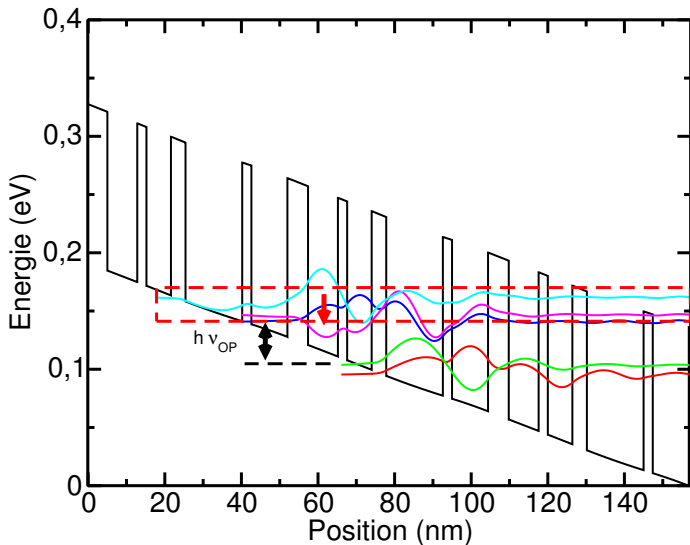
$F = 12,2$ kV/cm

$\theta = 44$ K

$$\Delta E \approx \hbar \omega_{op}$$

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



GaAs/Al_{0,15}Ga_{0,85}As

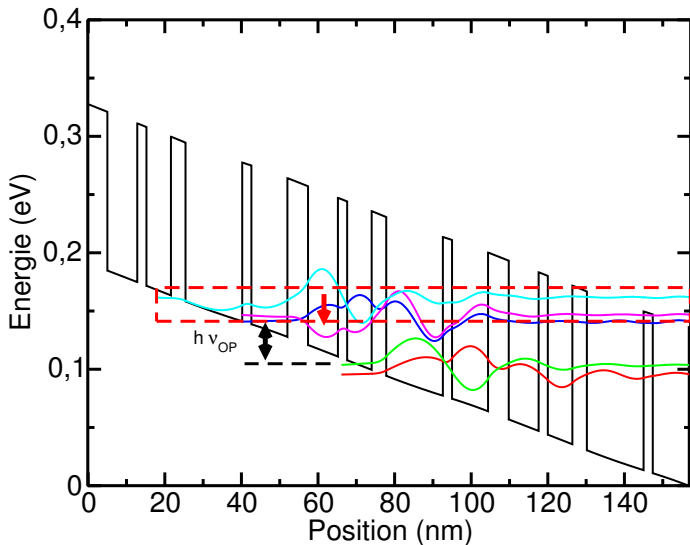
$F = 12,2$ kV/cm

$\theta = 44$ K

$$\Delta E \approx \hbar \omega_{op}$$

Présentation du LCQ à résonance de phonon

d'après Williams *et al.*, MIT (2003)



GaAs/Al_{0,15}Ga_{0,85}As

$F = 12,2$ kV/cm

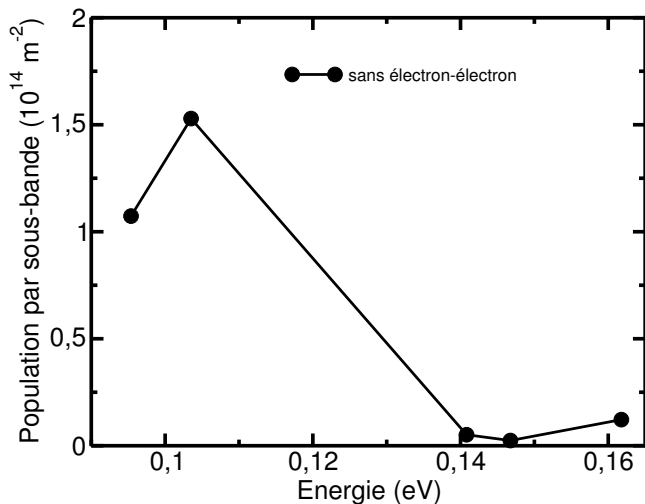
$\theta = 44$ K

$\Delta E \approx \hbar \omega_{op}$

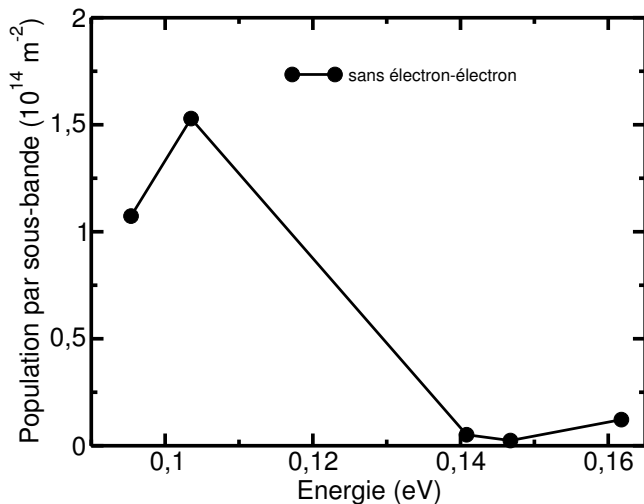
$\nu = 3,4$ THz

$\langle z \rangle \approx 5,4$ nm

Influence de l'interaction électron-électron

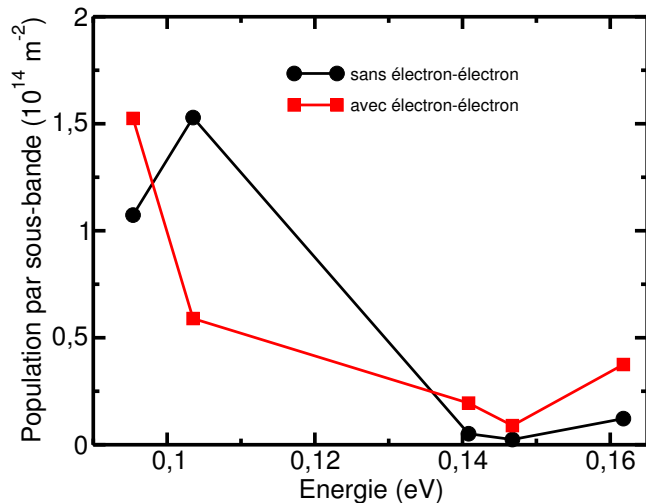


Influence de l'interaction électron-électron



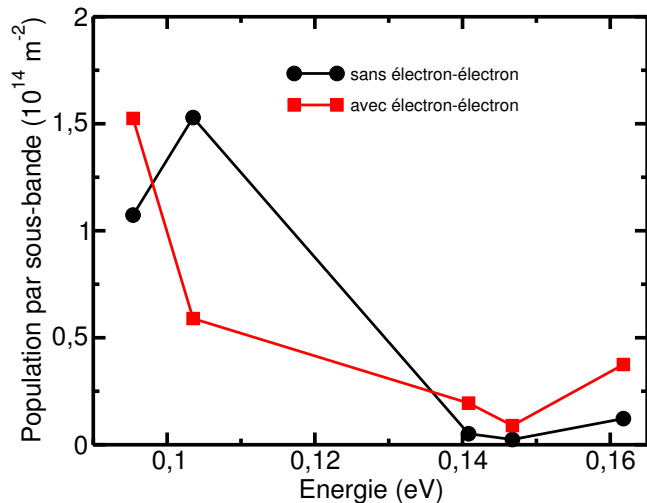
Inversion :
 $\Delta n_{ss} e/e = 10^{13} \text{ m}^{-2}$

Influence de l'interaction électron-électron



Inversion :
 $\Delta n_{ss} e/e = 10^{13} \text{ m}^{-2}$

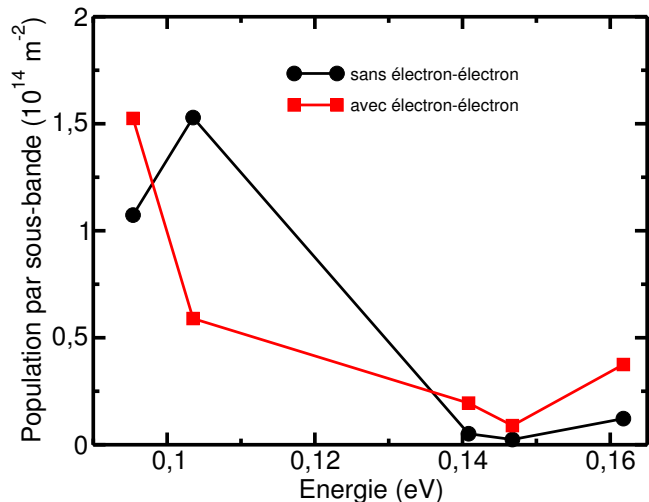
Influence de l'interaction électron-électron



Inversion :
 $\Delta n_{ss \text{ e/e}} = 10^{13} \text{ m}^{-2}$

$\Delta n_{av \text{ e/e}} = 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$

Influence de l'interaction électron-électron



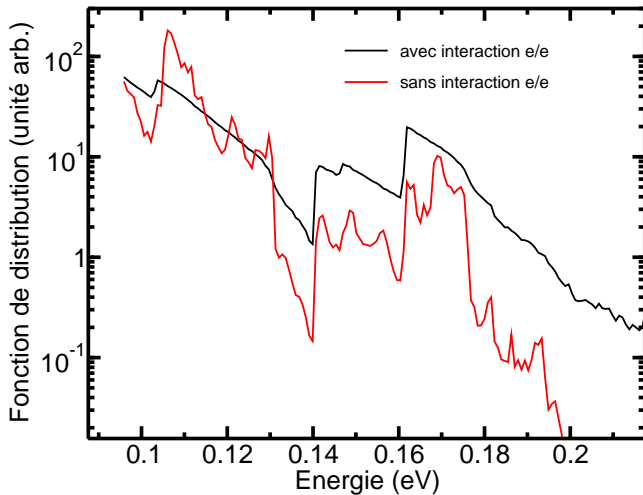
Inversion :
 $\Delta n_{ss \text{ e/e}} = 10^{13} \text{ m}^{-2}$

$\Delta n_{av \text{ e/e}} = 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$

⇒ Interaction e/e permet le passage des électrons entre les sous-bandes des doublets (1,2) et (3,4) ainsi que $1 \rightarrow 5'$

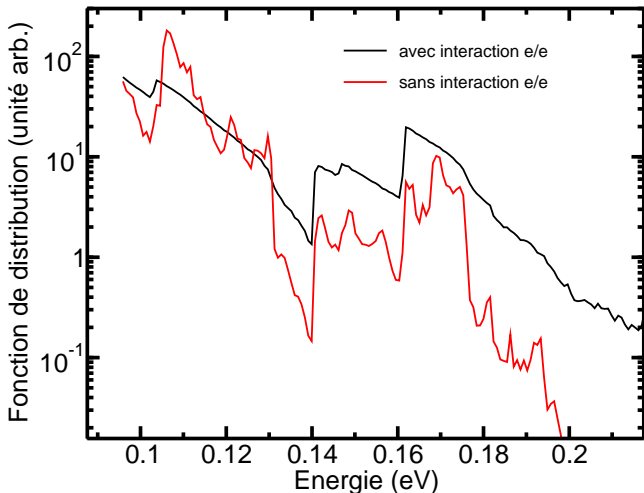
Distribution électronique par sous-bande

Influence de l'interaction électron-électron



Distribution électronique par sous-bande

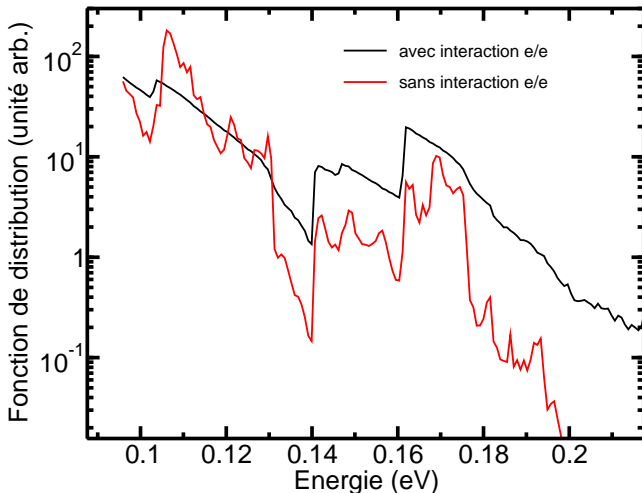
Influence de l'interaction électron-électron



Allure Maxwellienne

Distribution électronique par sous-bande

Influence de l'interaction électron-électron

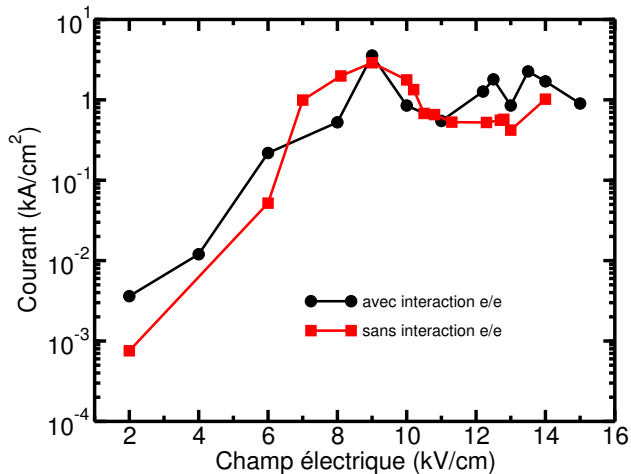


Allure Maxwellienne

⇒ Interaction e/e thermalise la distribution électronique

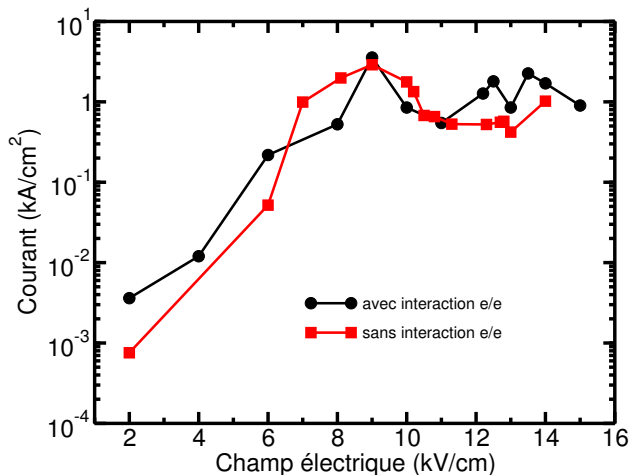
Caractéristique courant/tension

$\theta = 44 \text{ K}$



Caractéristique courant/tension

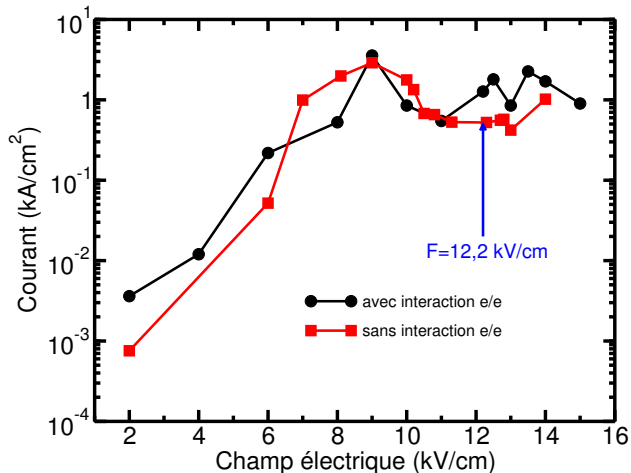
$\theta = 44 \text{ K}$



Effet de NDR

Caractéristique courant/tension

$\theta = 44 \text{ K}$



Effet de NDR

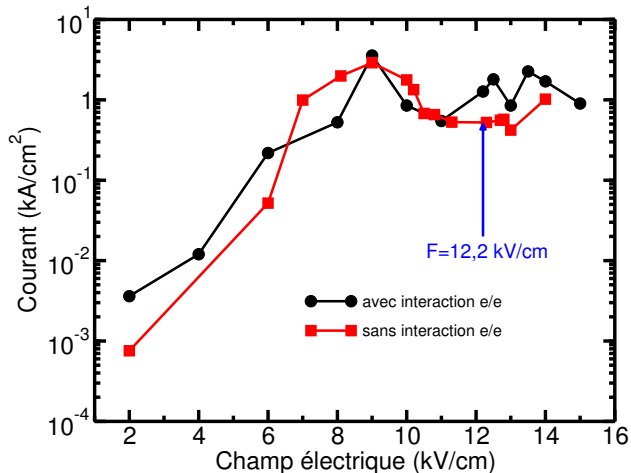
Pour $F = 12,2 \text{ kV/cm}$

$J_{\text{mes}} = 1,2 \text{ kA/cm}^2$

$J_{\text{ss e/e}} = 0,2 \text{ kA/cm}^2$

Caractéristique courant/tension

$\theta = 44 \text{ K}$



Effet de NDR

Pour $F = 12,2 \text{ kV/cm}$

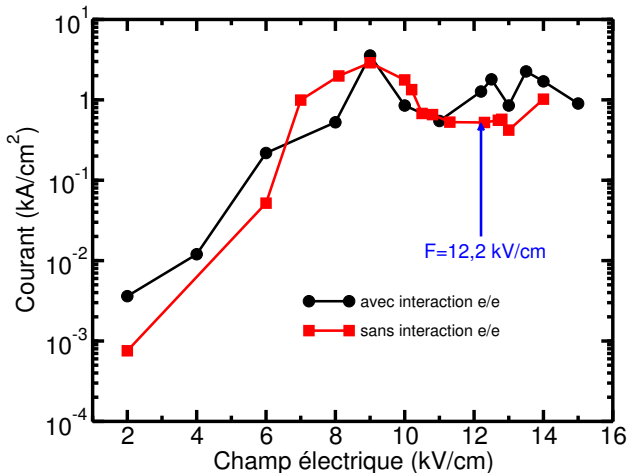
$J_{\text{mes}} = 1,2 \text{ kA/cm}^2$

$J_{\text{ss e/e}} = 0,2 \text{ kA/cm}^2$

$J_{\text{av e/e}} = 1,3 \text{ kA/cm}^2$

Caractéristique courant/tension

$\theta = 44 \text{ K}$



Effet de NDR

Pour $F = 12,2 \text{ kV/cm}$

$J_{\text{mes}} = 1,2 \text{ kA/cm}^2$

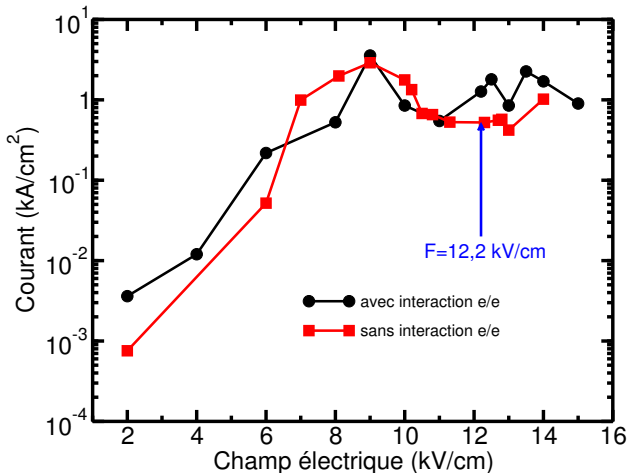
$J_{\text{ss e/e}} = 0,2 \text{ kA/cm}^2$

$J_{\text{av e/e}} = 1,3 \text{ kA/cm}^2$

⇒ Modèle est en très bon accord avec la littérature pour certains champs

Caractéristique courant/tension

$\theta = 44 \text{ K}$



Effet de NDR

Pour $F = 12,2 \text{ kV/cm}$

$J_{\text{mes}} = 1,2 \text{ kA/cm}^2$

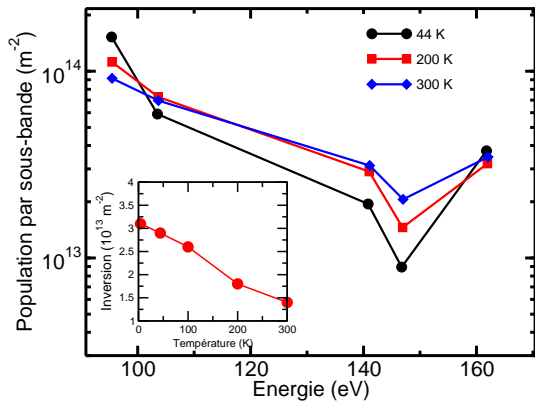
$J_{\text{ss e/e}} = 0,2 \text{ kA/cm}^2$

$J_{\text{av e/e}} = 1,3 \text{ kA/cm}^2$

⇒ Modèle est en très bon accord avec la littérature pour certains champs
En général, valeurs trop élevées ⇒ courant parasite entre états délocalisés sur plusieurs étages (Callebaut, MIT)

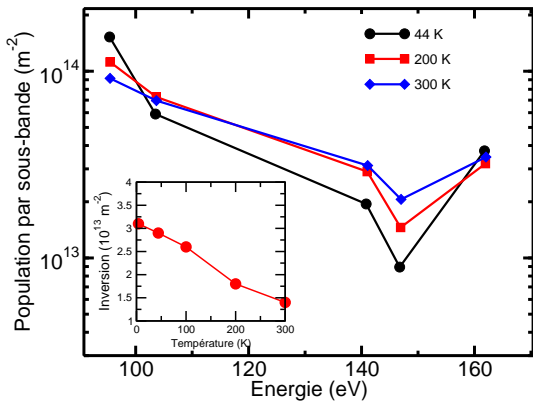
Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$



Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$

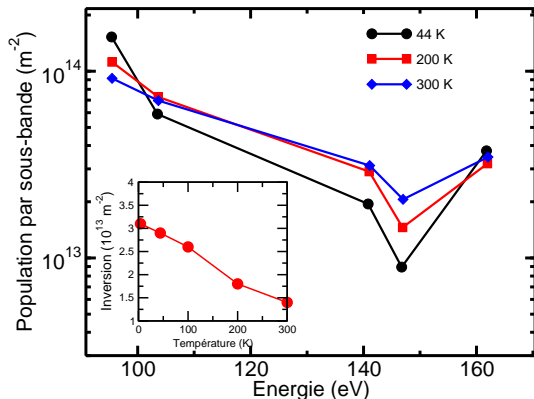


Inversion :

$$\Delta n_{44 \text{ K}} \approx 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$



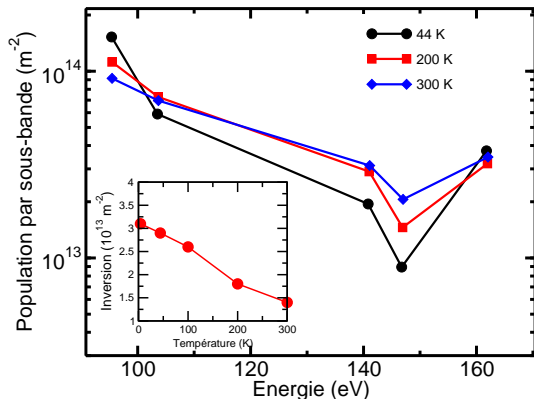
Inversion :

$$\Delta n_{44 \text{ K}} \approx 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{200 \text{ K}} \approx 1,8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$



Inversion :

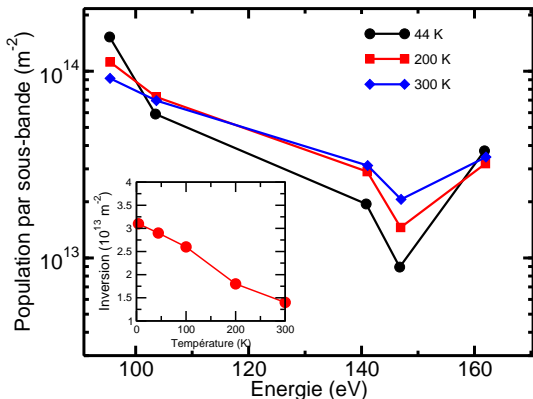
$$\Delta n_{44 \text{ K}} \approx 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{200 \text{ K}} \approx 1,8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{300 \text{ K}} \approx 1,4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$



Inversion :

$$\Delta n_{44 \text{ K}} \approx 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

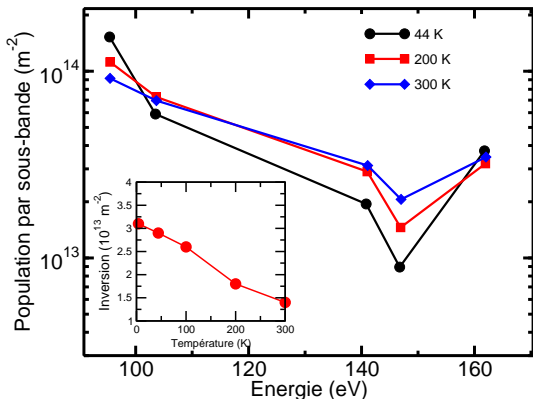
$$\Delta n_{200 \text{ K}} \approx 1,8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{300 \text{ K}} \approx 1,4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Facteur 2 entre 44 K et 300 K
sur Δn

Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$



Inversion :

$$\Delta n_{44 \text{ K}} \approx 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{200 \text{ K}} \approx 1,8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

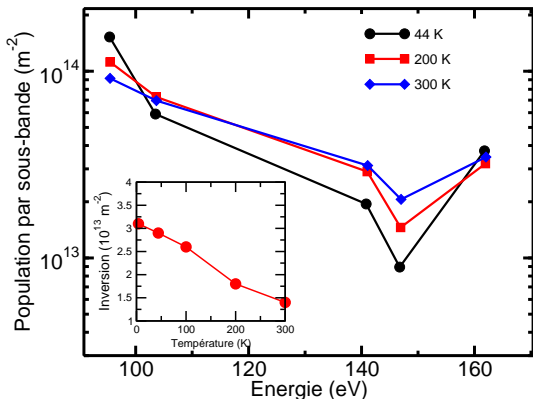
$$\Delta n_{300 \text{ K}} \approx 1,4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Facteur 2 entre 44 K et 300 K
sur Δn

$$\text{Gain } G \propto \Delta n / \gamma$$

Influence de la température

$F = 12,2 \text{ kV/cm}$



Inversion :

$$\Delta n_{44 \text{ K}} \approx 3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{200 \text{ K}} \approx 1,8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{300 \text{ K}} \approx 1,4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Facteur 2 entre 44 K et 300 K
sur Δn

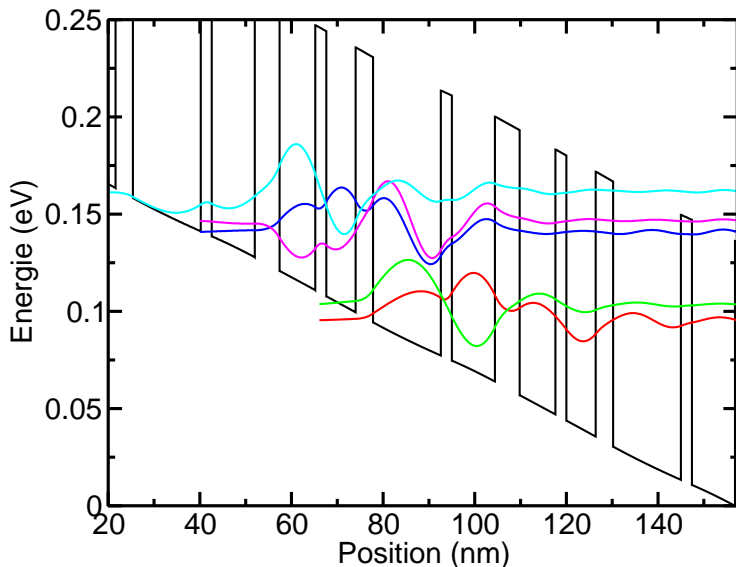
Gain $G \propto \Delta n / \gamma$

À 300K, Δn semble favorable même avec e/e , mais la largeur de raie γ \nearrow également

- 1 Introduction
- 2 Description du modèle
 - Transport dans les LCQ
 - Détermination des états électroniques
 - Inclusion de l'interaction électron-électron
- 3 Résultats
 - LCQ à superréseau à pas variable
 - LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
 - **Émission à 1,4 THz**
 - LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz
- 4 Conclusion & perspectives

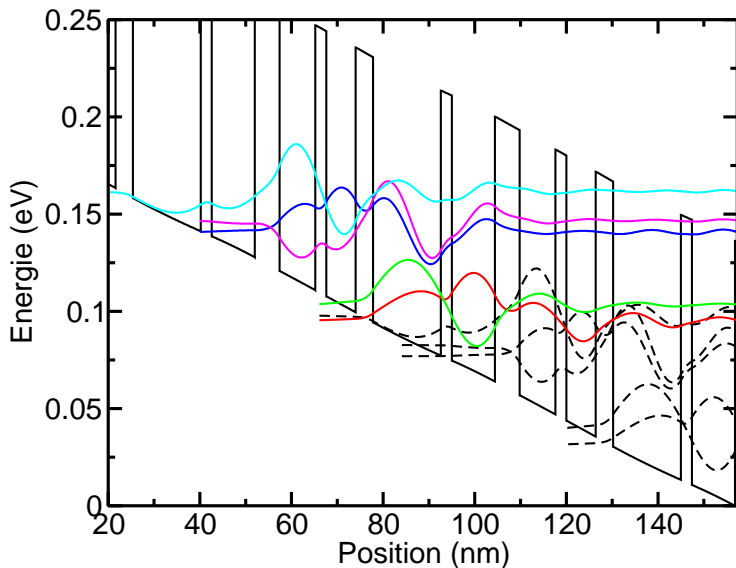
Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)



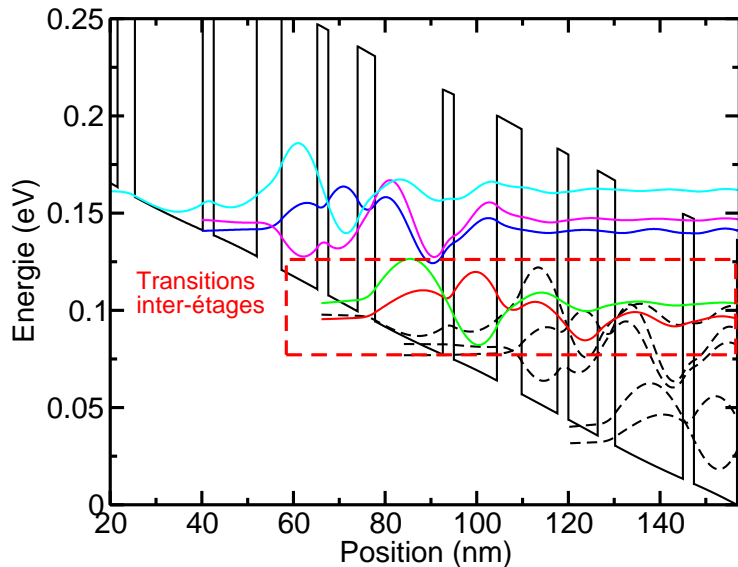
Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)



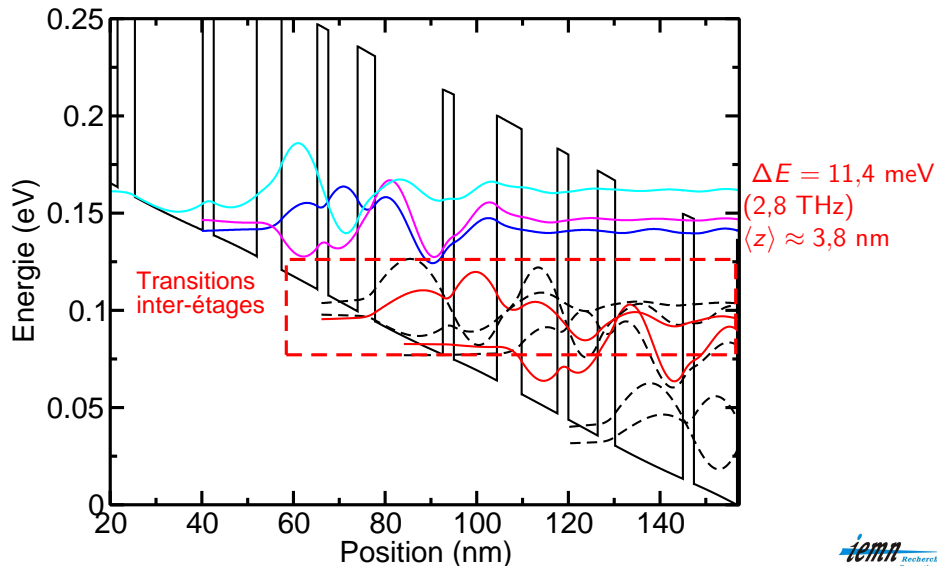
Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)



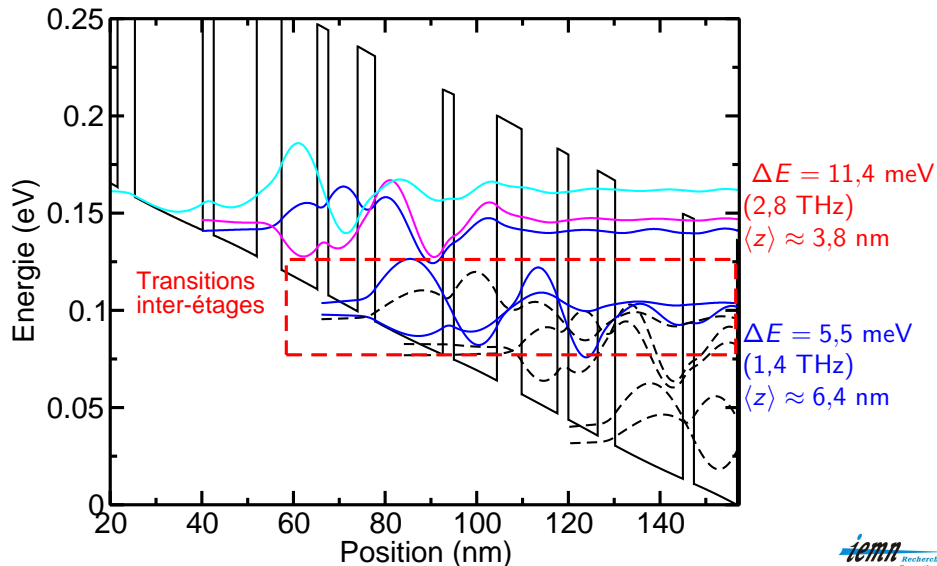
Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)



Possibilité d'émettre à 1,4 THz

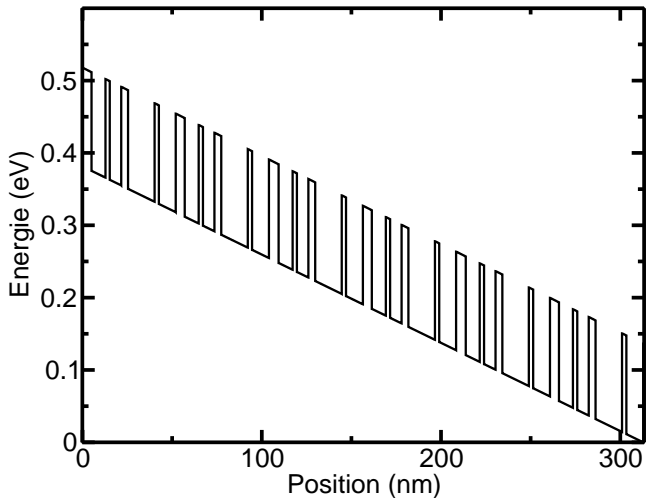
d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)



Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)

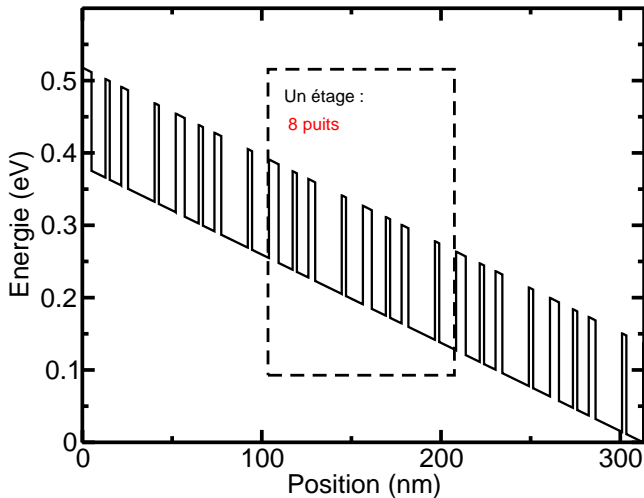
Transitions inter-étages \Rightarrow Nouvelle variante composée de deux périodes



Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)

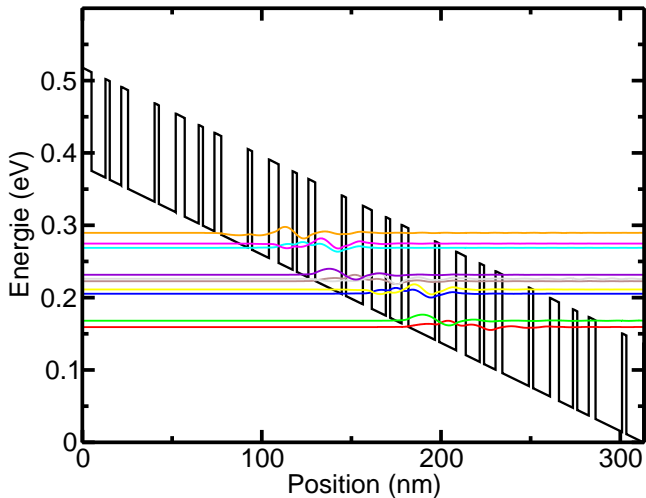
Transitions inter-étages \Rightarrow Nouvelle variante composée de **deux périodes**



Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)

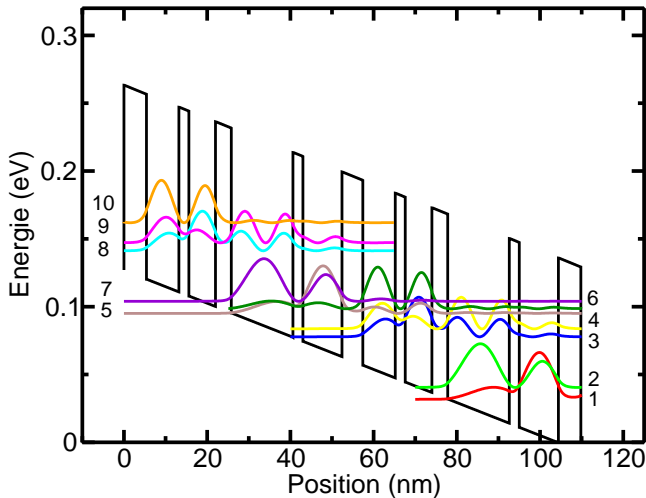
Transitions inter-étages \Rightarrow Nouvelle variante composée de deux périodes



Possibilité d'émettre à 1,4 THz

d'après Lee *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **83**, p. 2506 (2003)

Transitions inter-étages \Rightarrow Nouvelle variante composée de **deux périodes**

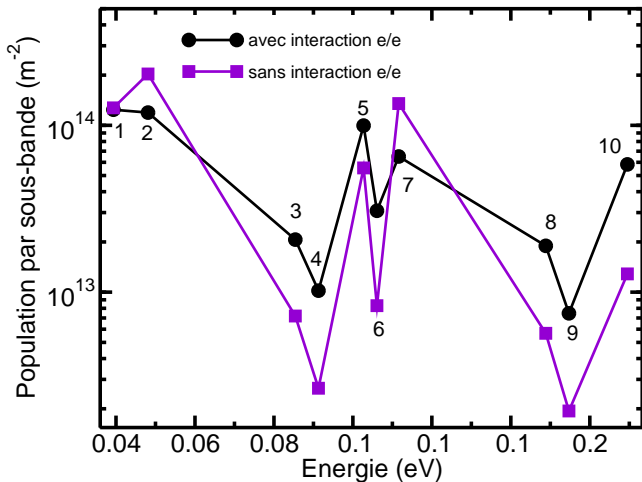


Transitions à 3,4 THz :
6 \rightarrow 4 et 10 \rightarrow 9

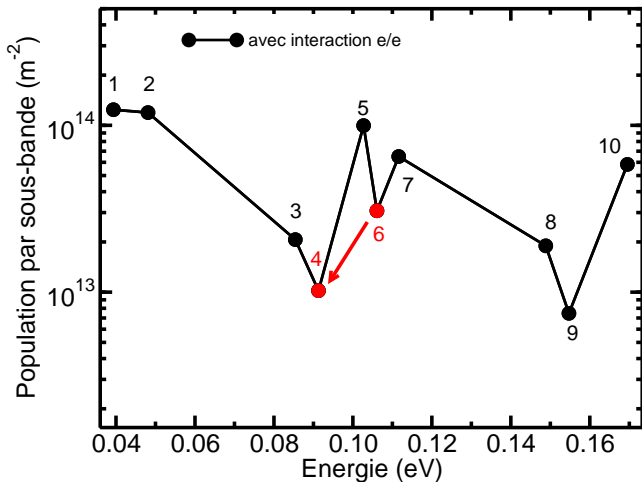
Transition à 2,8 THz :
5 \rightarrow 4

Transition à 1,4 THz :
7 \rightarrow 6

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz

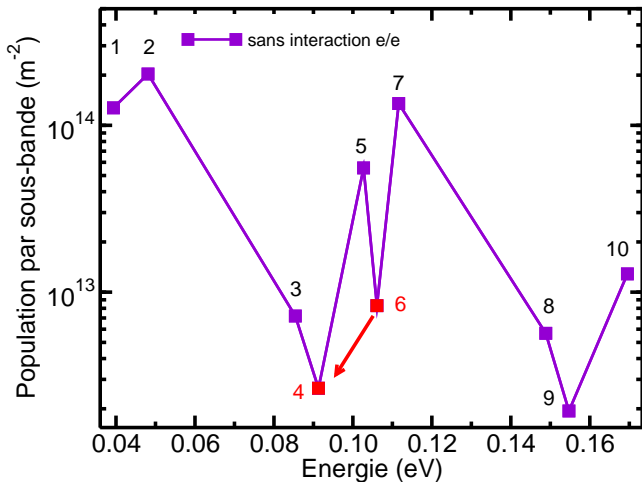


Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz



$\nu = 3,4 \text{ THz}$
 $\Delta n_{\text{av e/e}} = 2 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz

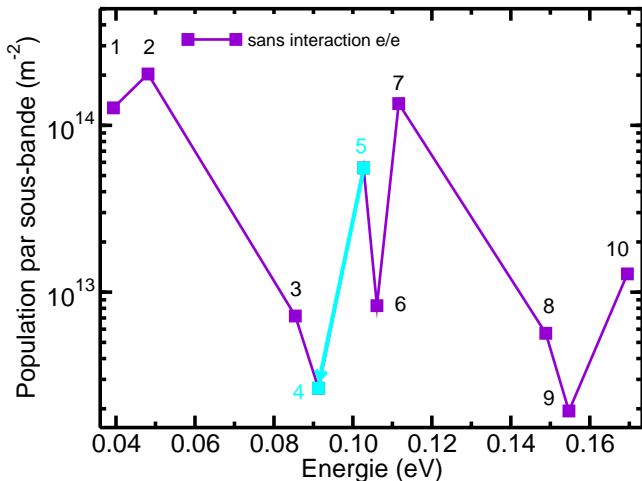


$$\nu = 3,4 \text{ THz}$$

$$\Delta n_{\text{av } e/e} = 2 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{\text{ss } e/e} = 5,7 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$$

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz



$$\nu = 3,4 \text{ THz}$$

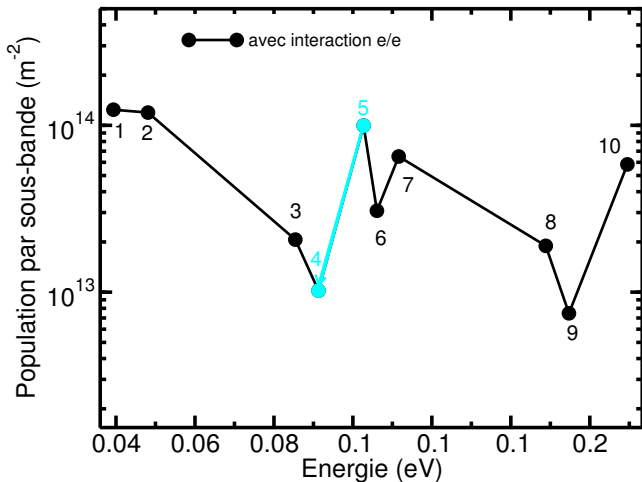
$$\Delta n_{av \text{ e/e}} = 2 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

$$\Delta n_{ss \text{ e/e}} = 5,7 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$$

$$\nu = 2,8 \text{ THz}$$

$$\Delta n_{ss \text{ e/e}} = 5,3 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz



$$\nu = 3,4 \text{ THz}$$

$$\Delta n_{av} e/e = 2 \times 10^{13} m^{-2}$$

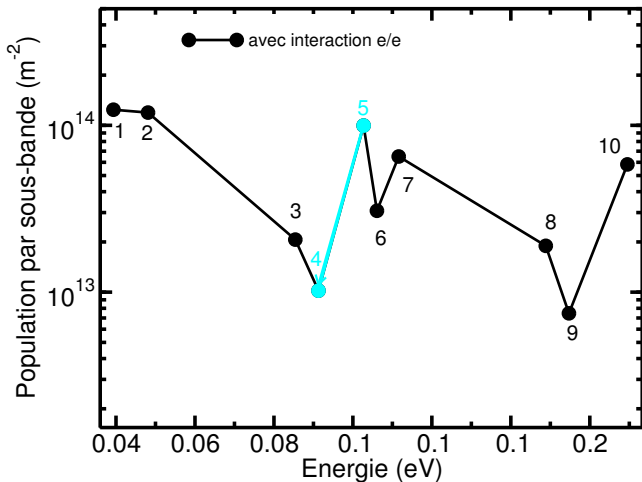
$$\Delta n_{ss} e/e = 5,7 \times 10^{12} m^{-2}$$

$$\nu = 2,8 \text{ THz}$$

$$\Delta n_{ss} e/e = 5,3 \times 10^{13} m^{-2}$$

$$\Delta n_{av} e/e = 9 \times 10^{13} m^{-2}$$

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz



$$\nu = 3,4 \text{ THz}$$

$$\Delta n_{av} e/e = 2 \times 10^{13} m^{-2}$$

$$\Delta n_{ss} e/e = 5,7 \times 10^{12} m^{-2}$$

$$\nu = 2,8 \text{ THz}$$

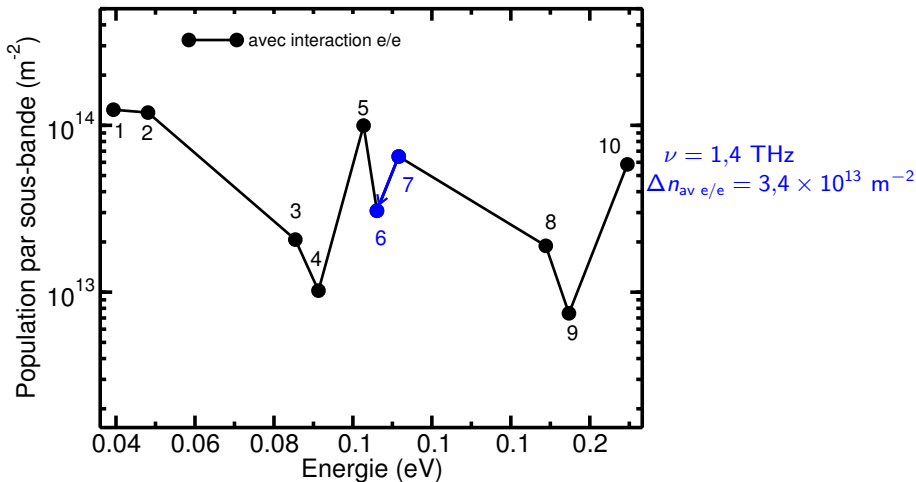
$$\Delta n_{ss} e/e = 5,3 \times 10^{13} m^{-2}$$

$$\Delta n_{av} e/e = 9 \times 10^{13} m^{-2}$$

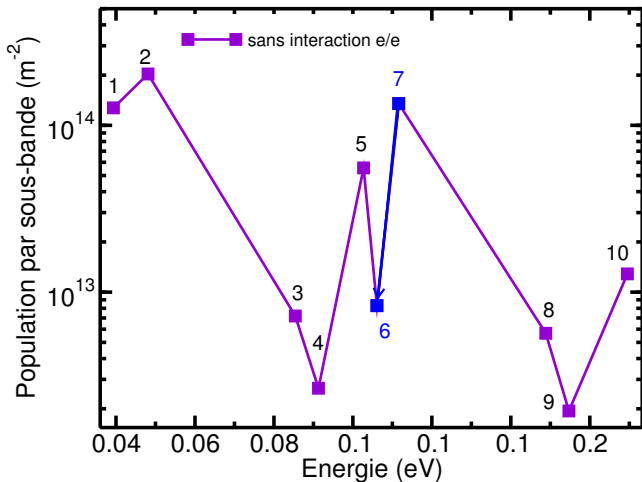


Interaction e/e favorable

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz

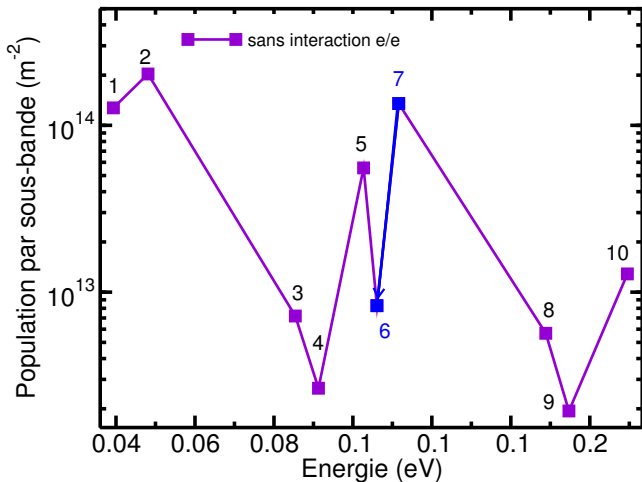


Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz



$\nu = 1,4 \text{ THz}$
 $\Delta n_{av} e/e = 3,4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$
 $\Delta n_{ss} e/e = 1,3 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$

Influence de l'interaction e/e sur l'émission à 1,4 THz

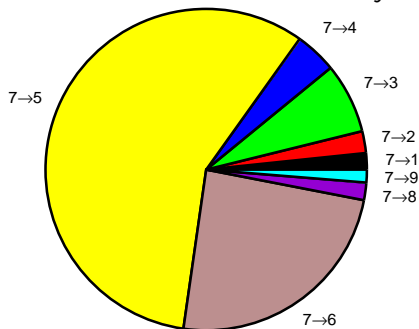


$$\nu = 1,4 \text{ THz}$$
$$\Delta n_{\text{av e/e}} = 3,4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$$
$$\Delta n_{\text{ss e/e}} = 1,3 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$$

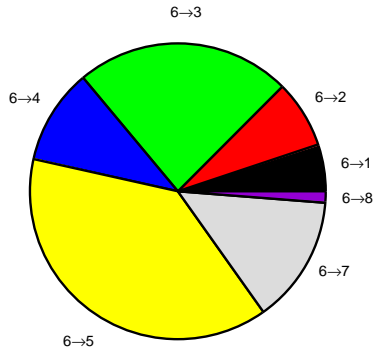
↓
Interaction e/e
défavorable vers $\sim 1 \text{ THz}$

Proportions des transitions inter-sous-bandes (tous mécanismes inclus)

Transition inter-sous-bande $7 \rightarrow j$

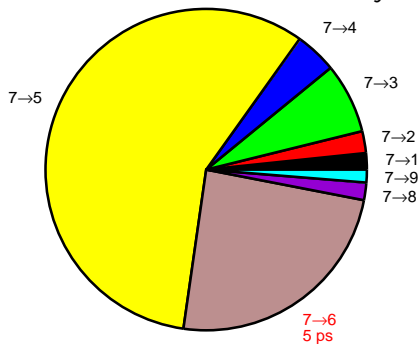


Transition inter-sous-bande $6 \rightarrow j$

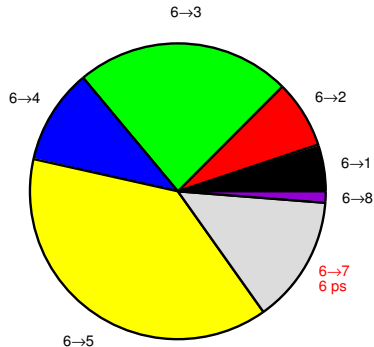


Proportions des transitions inter-sous-bandes (tous mécanismes inclus)

Transition inter-sous-bande $7 \rightarrow j$

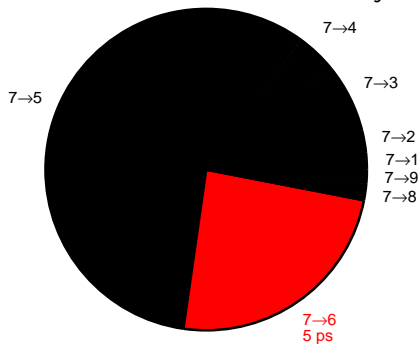


Transition inter-sous-bande $6 \rightarrow j$

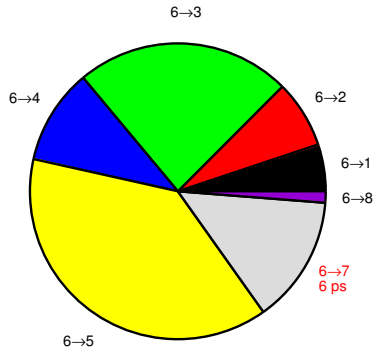


Proportions des transitions inter-sous-bandes (tous mécanismes inclus)

Transition inter-sous-bande $7 \rightarrow j$

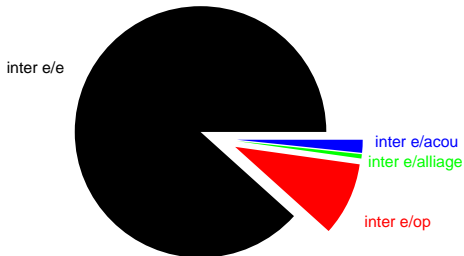


Transition inter-sous-bande $6 \rightarrow j$

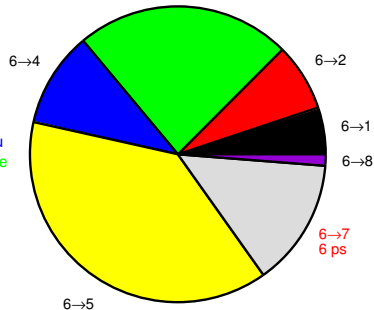


Proportions des différents mécanismes

Transition inter-sous-bande $7 \rightarrow 6$

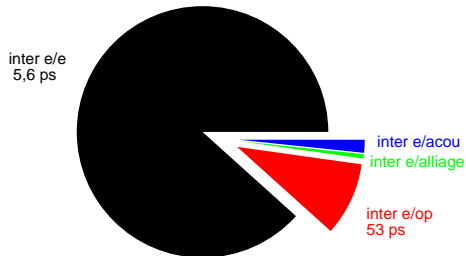


Transition inter-sous-bande $6 \rightarrow j$
 $6 \rightarrow 3$

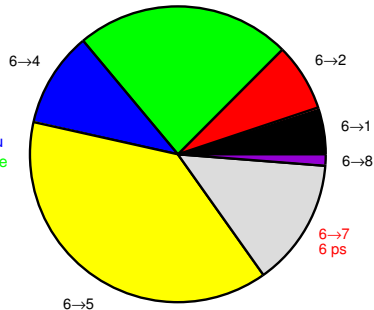


Proportions des différents mécanismes

Transition inter-sous-bande $7 \rightarrow 6$

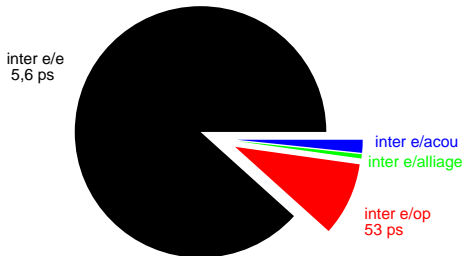


Transition inter-sous-bande $6 \rightarrow j$
 $6 \rightarrow 3$

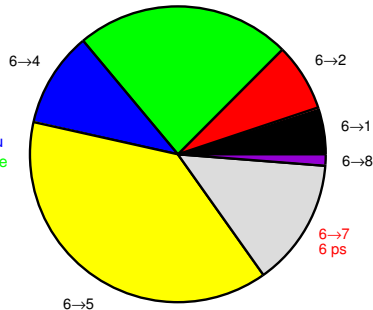


Proportions des différents mécanismes

Transition inter-sous-bande $7 \rightarrow 6$



Transition inter-sous-bande $6 \rightarrow j$
 $6 \rightarrow 3$



Nombreuses interactions e/e $7 \leftrightarrow 6 \Rightarrow$ égalisent les popu des niveaux et s'opposent à Δn

1 Introduction

2 Description du modèle

- Transport dans les LCQ
- Détermination des états électroniques
- Inclusion de l'interaction électron-électron

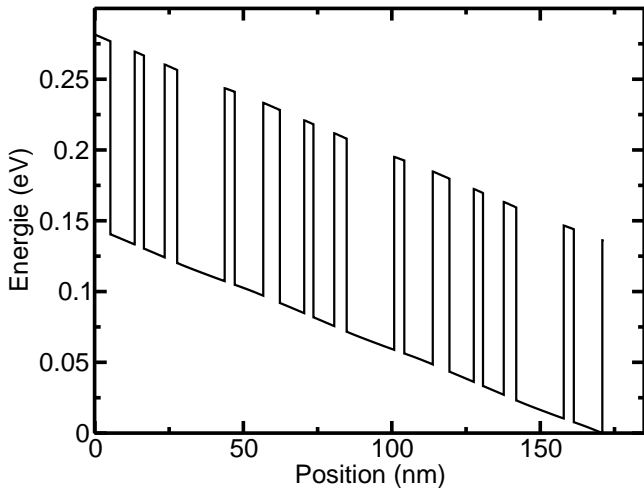
3 Résultats

- LCQ à superréseau à pas variable
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
- Émission à 1,4 THz
- LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz

4 Conclusion & perspectives

LCQ à résonance de phonon émettant à 2,1 THz

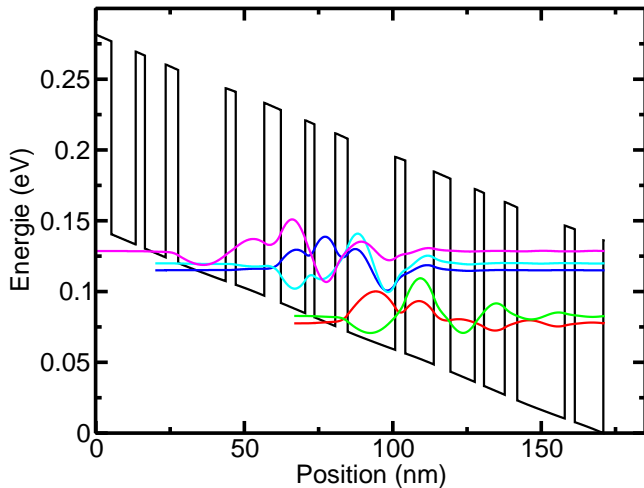
d'après Williams *et al.*, *Electr. Lett.*, **40**, p. 431 (2004)



$F = 8,5 \text{ kV/cm}$
 $\theta = 44 \text{ K}$

LCQ à résonance de phonon émettant à 2,1 THz

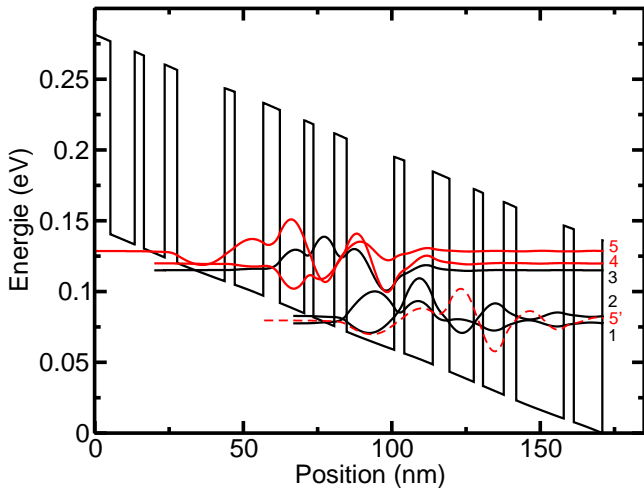
d'après Williams *et al.*, *Electr. Lett.*, **40**, p. 431 (2004)



$F = 8,5 \text{ kV/cm}$
 $\theta = 44 \text{ K}$

LCQ à résonance de phonon émettant à 2,1 THz

d'après Williams *et al.*, *Electr. Lett.*, **40**, p. 431 (2004)



$F = 8,5 \text{ kV/cm}$
 $\theta = 44 \text{ K}$

$\Delta E_{54} = 8,7 \text{ meV}$
Fréquence record
 $\nu = 2,1 \text{ THz}$

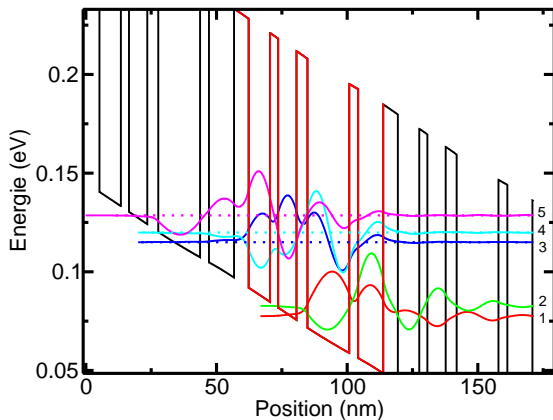
$\langle z_{54} \rangle = 6,6 \text{ nm}$

Comment diminuer la fréquence vers 1 THz ?

But : diminuer l'écart entre les sous-bandes 5 et 4

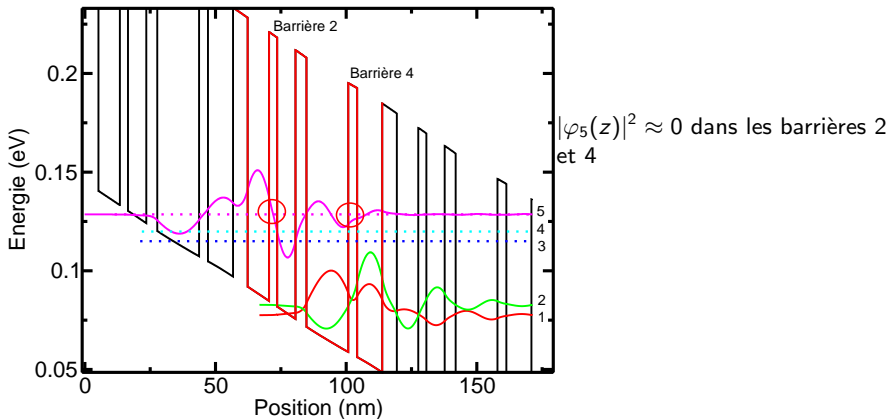
Comment diminuer la fréquence vers 1 THz ?

But : diminuer l'écart entre les sous-bandes 5 et 4



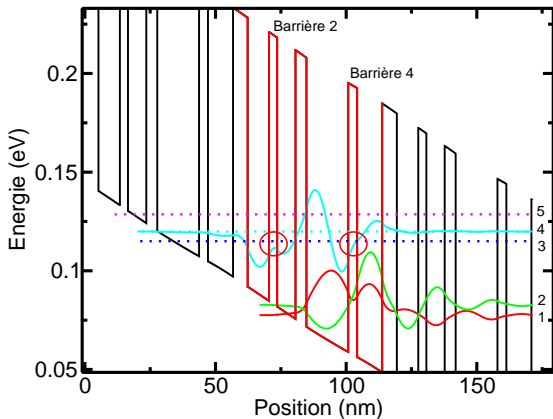
Comment diminuer la fréquence vers 1 THz ?

But : diminuer l'écart entre les sous-bandes 5 et 4



Comment diminuer la fréquence vers 1 THz ?

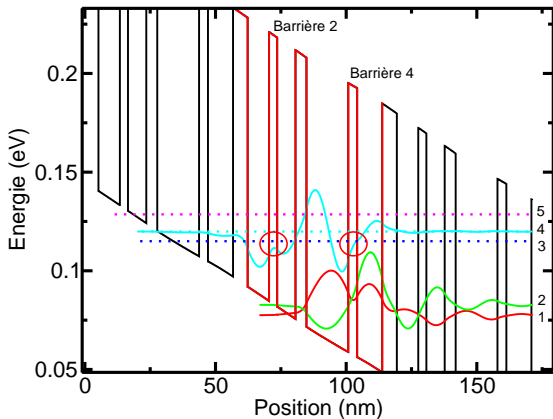
But : diminuer l'écart entre les sous-bandes 5 et 4



$|\varphi_5(z)|^2 \approx 0$ dans les barrières 2 et 4
 $|\varphi_4(z)|^2 \neq 0$ dans les barrières 2 et 4

Comment diminuer la fréquence vers 1 THz ?

But : diminuer l'écart entre les sous-bandes 5 et 4



$|\varphi_5(z)|^2 \approx 0$ dans les barrières 2 et 4

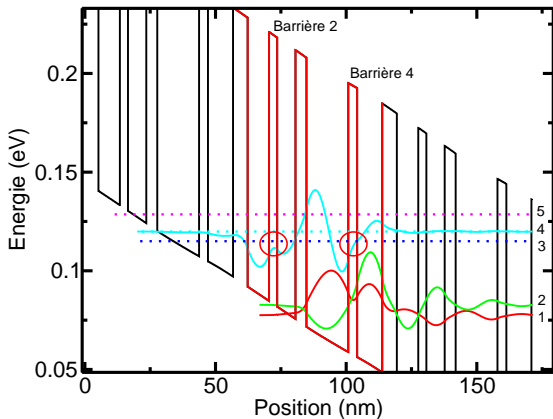
$|\varphi_4(z)|^2 \neq 0$ dans les barrières 2 et 4

En \nearrow la hauteur des barrières 2 et 4 \Rightarrow **diminue** $E_5 - E_4$

\nearrow la hauteur de barrière

Comment diminuer la fréquence vers 1 THz ?

But : diminuer l'écart entre les sous-bandes 5 et 4



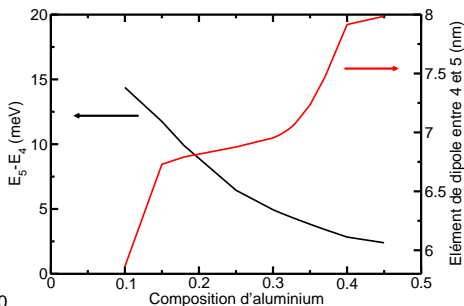
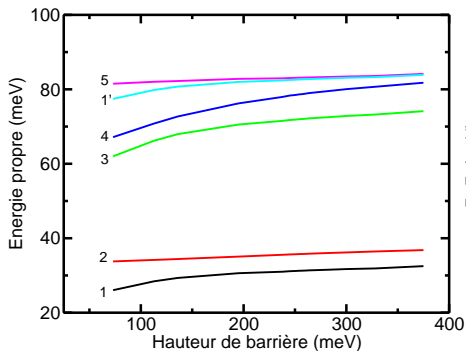
$|\varphi_5(z)|^2 \approx 0$ dans les barrières 2 et 4

$|\varphi_4(z)|^2 \neq 0$ dans les barrières 2 et 4

En \nearrow la hauteur des barrières 2 et 4 \Rightarrow **diminue** $E_5 - E_4$

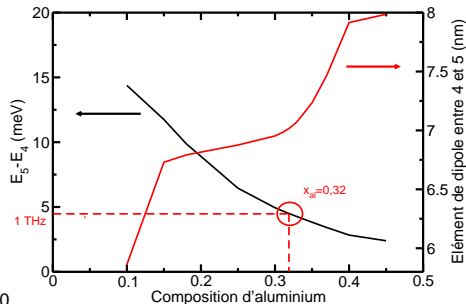
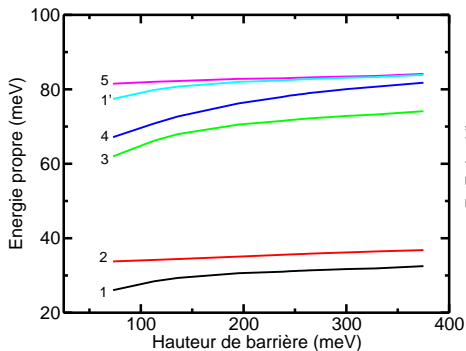
\nearrow la hauteur de barrière \iff Modifier la composition en aluminium

Influence des hauteurs de barrières



En augmentant la composition d'aluminium, on peut régler la fréquence finement

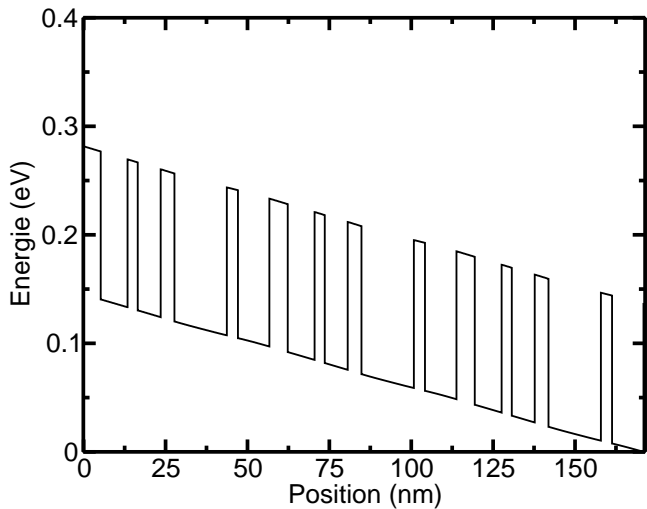
Influence des hauteurs de barrières



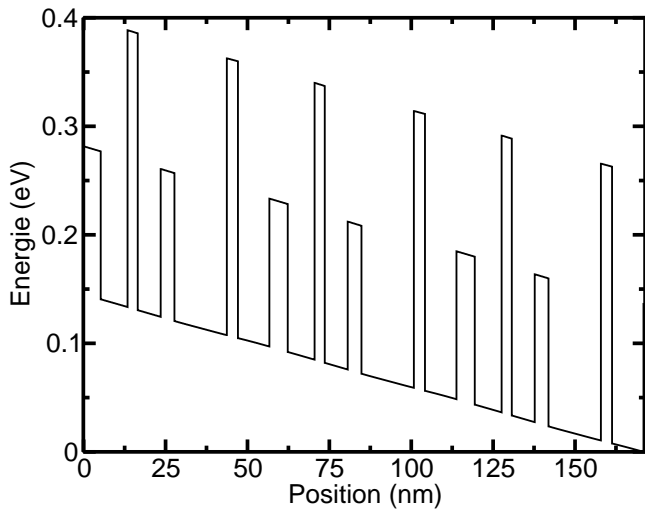
En augmentant la composition d'aluminium, on peut régler la fréquence finement

⇒ On peut atteindre en théorie **1 THz** avec un élément de dipole élevé

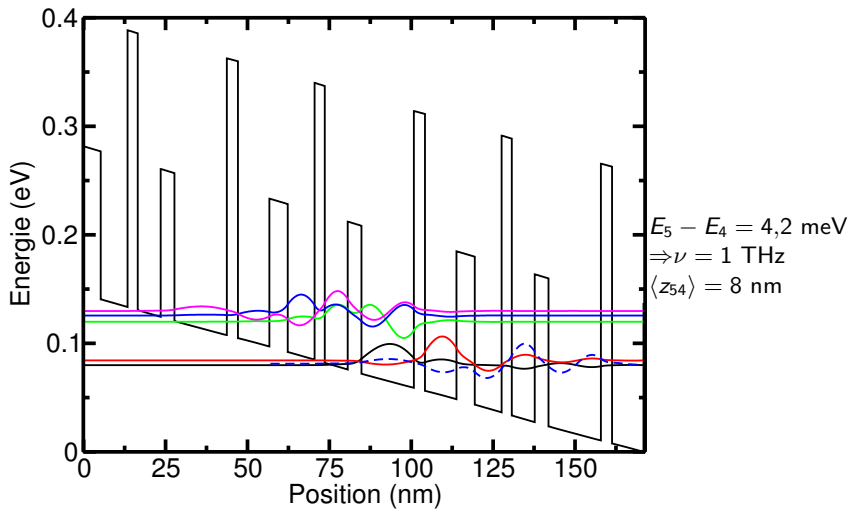
Structure de bande pour $x_{Al} = 32\%$



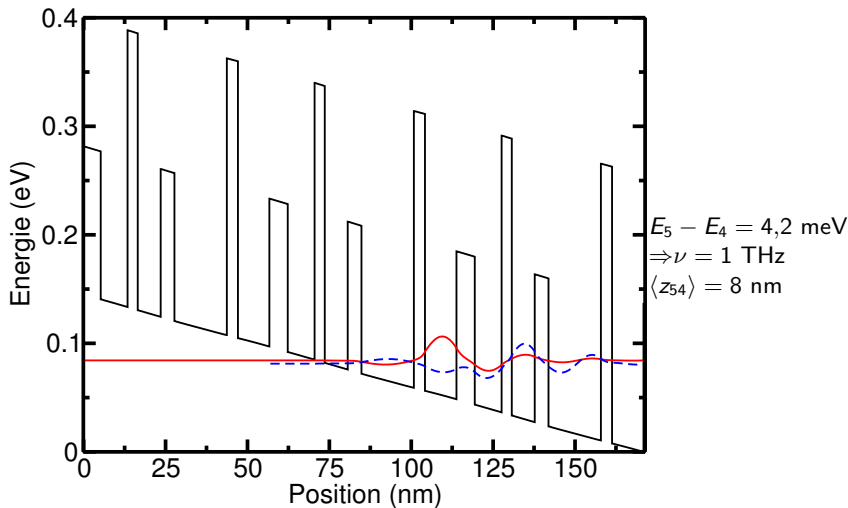
Structure de bande pour $x_{Al} = 32\%$



Structure de bande pour $x_{Al} = 32\%$



Structure de bande pour $x_{al} = 32\%$



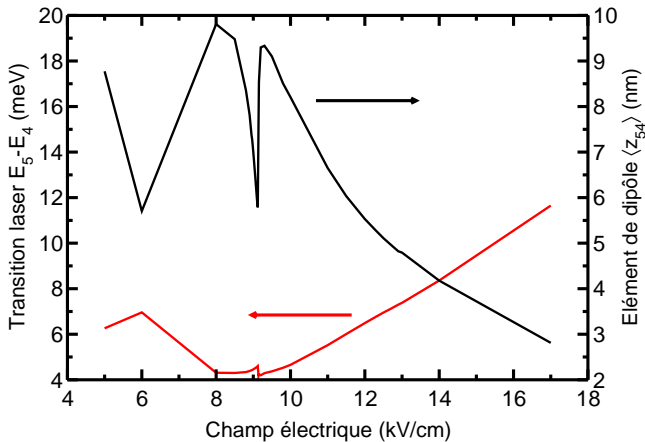
$\langle z_{15'} \rangle = 6 \text{ nm} \Rightarrow$ Fort recouvrement inter-étage !



Courant important

Fréquence d'émission en fonction du champ électrique

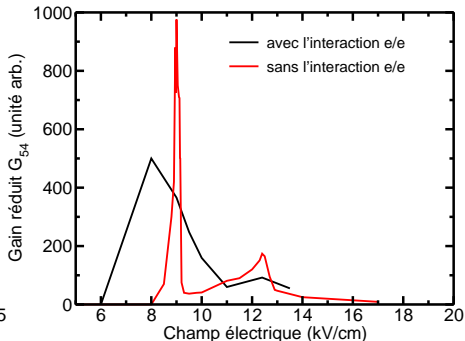
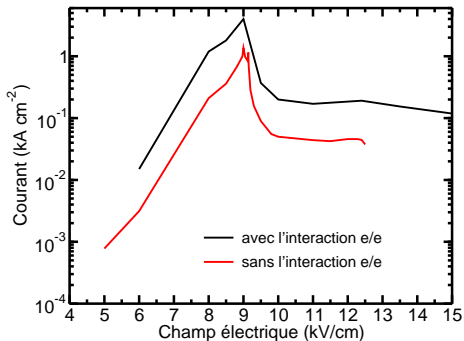
LCQ à 32 % d'aluminium



⇒ Régler la fréquence avec le champ

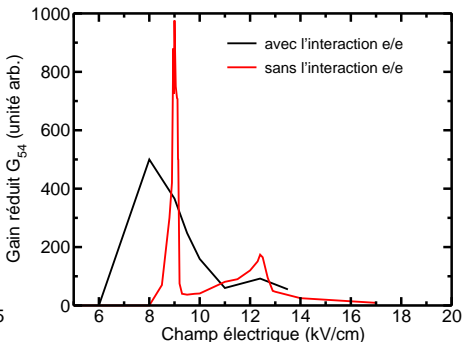
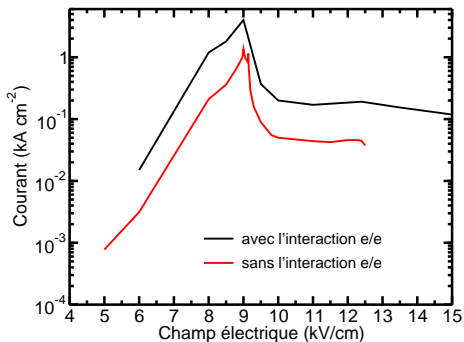
Caractéristique J/F en fonction du champ électrique

LCQ à 32 % d'aluminium – Influence de l'interaction e/e



Caractéristique J/F en fonction du champ électrique

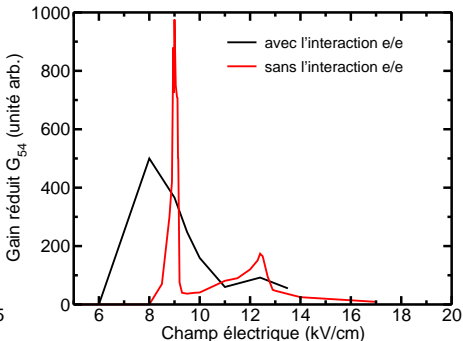
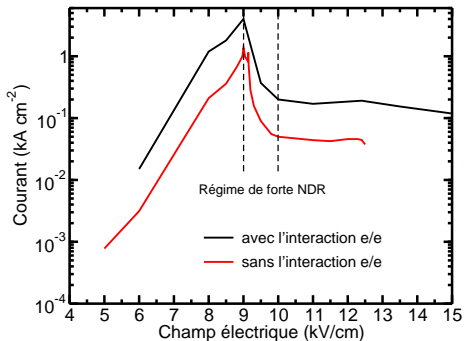
LCQ à 32 % d'aluminium – Influence de l'interaction e/e



Courant provient des interactions e/e ($\sim 80\%$)

Caractéristique J/F en fonction du champ électrique

LCQ à 32 % d'aluminium – Influence de l'interaction e/e



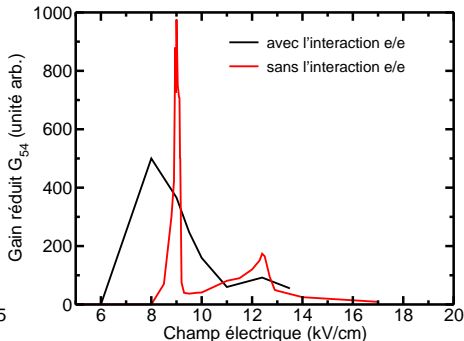
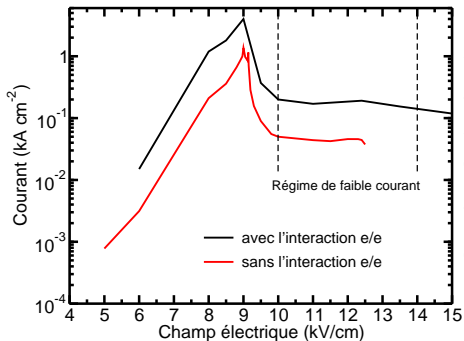
Courant provient des interactions e/e ($\sim 80\%$)

Régime de forte NDR

Caractéristique J/F en fonction du champ électrique

LCQ à 32 % d'aluminium – Influence de l'interaction e/e

$$\text{Gain : } G = \frac{e^2 \Delta n_{\nu\mu} \Delta E_{\nu\mu} z_{\nu\mu}^2}{\pi D c n_{\text{op}} \kappa_0 \hbar^2 \gamma_{\nu\mu}}$$



Courant provient des interactions e/e (~ 80 %)

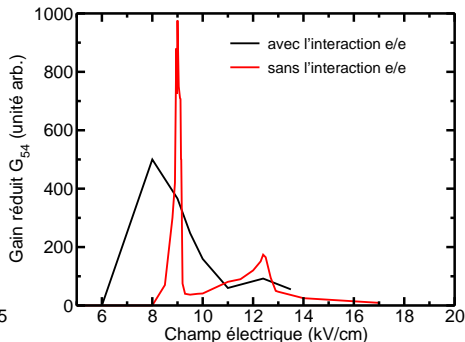
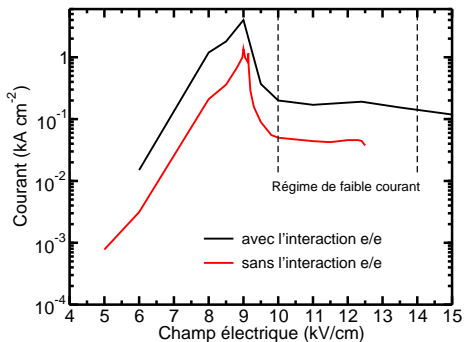
Régime de forte NDR

Pour $F \geq 10,5$ kV/cm, régime de faible courant ...

Caractéristique J/F en fonction du champ électrique

LCQ à 32 % d'aluminium – Influence de l'interaction e/e

$$\text{Gain : } G = \frac{e^2 \Delta E_{\nu\mu}}{\pi D c n_{\text{op}} \kappa_0 \hbar^2 \gamma_{\nu\mu}} \times \Delta n_{\nu\mu} z_{\nu\mu}^2$$



Courant provient des interactions e/e ($\sim 80\%$)

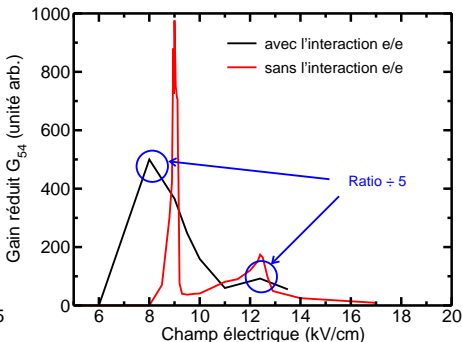
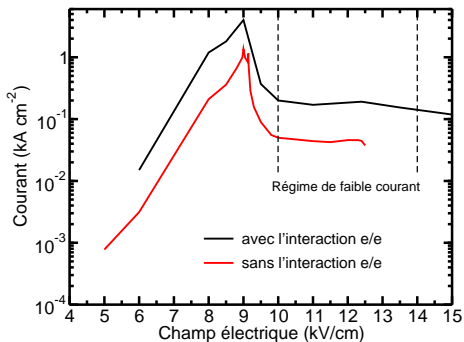
Régime de forte NDR

Pour $F \geq 10,5$ kV/cm, régime de faible courant ...

Caractéristique J/F en fonction du champ électrique

LCQ à 32 % d'aluminium – Influence de l'interaction e/e

$$\text{Gain : } G = \frac{e^2 \Delta E_{\nu\mu}}{\pi D c n_{\text{op}} \kappa_0 \hbar^2 \gamma_{\nu\mu}} \times \Delta n_{\nu\mu} z_{\nu\mu}^2$$



Courant provient des interactions e/e ($\sim 80\%$)

Régime de forte NDR

Pour $F \geq 10,5$ kV/cm, régime de faible courant ... **mais** de faible gain

- 1 Introduction
- 2 Description du modèle
 - Transport dans les LCQ
 - Détermination des états électroniques
 - Inclusion de l'interaction électron-électron
- 3 Résultats
 - LCQ à superréseau à pas variable
 - LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 3,4 THz
 - Émission à 1,4 THz
 - LCQ à dépopulation par résonance de phonon à 2,1 THz
- 4 Conclusion & perspectives

Conclusion

- Étude microscopique de LCQ à l'aide d'un simulateur de Monte Carlo
- Influence de l'interaction e/e sur les LCQ térahertz

Principales caractéristiques du modèle :

- Détermination des états électroniques en tenant compte de la périodicité
- Modèle d'écrantage multi-sous-bande

Conclusion

- Étude microscopique de LCQ à l'aide d'un simulateur de Monte Carlo
- Influence de l'interaction e/e sur les LCQ térahertz

Principales caractéristiques du modèle :

- Détermination des états électroniques en tenant compte de la périodicité
- Modèle d'écrantage multi-sous-bande

LCQ à superréseau à pas variable

⇒ interaction e/e : mécanisme inter-sous-bande indispensable

- Étude microscopique de LCQ à l'aide d'un simulateur de Monte Carlo
- Influence de l'interaction e/e sur les LCQ térahertz

Principales caractéristiques du modèle :

- Détermination des états électroniques en tenant compte de la périodicité
- Modèle d'écrantage multi-sous-bande

LCQ à superréseau à pas variable

⇒ interaction e/e : mécanisme inter-sous-bande indispensable

LCQ à résonance de phonon

- Structure simple, principe efficace
- Bonne tenue en température **mais courant élevé**

Interaction e/e favorable pour les fréquences $\nu \sim 3$ THz

Conclusion

- Étude microscopique de LCQ à l'aide d'un simulateur de Monte Carlo
- Influence de l'interaction e/e sur les LCQ térahertz

Principales caractéristiques du modèle :

- Détermination des états électroniques en tenant compte de la périodicité
- Modèle d'écrantage multi-sous-bande

LCQ à superréseau à pas variable

⇒ interaction e/e : mécanisme inter-sous-bande indispensable

LCQ à résonance de phonon

- Structure simple, principe efficace
- Bonne tenue en température **mais courant élevé**

Interaction e/e favorable pour les fréquences $\nu \sim 3$ THz

Possibilité de descendre vers 1 THz dans les structures à résonance de phonon

⇒ résultats théoriques positifs

Mais, les inversions à ~ 1 THz sont **dégradées** par l'interaction e/e 

Modèle

- Transport hors d'équilibre \Rightarrow effets de **charge d'espace** importants
couplage autocohérent entre **Schrödinger** et la simulation **Monte Carlo**
 \Rightarrow gros volumes de calculs attendus
- Problème de stabilité
- Non-parabolicité dans l'interaction électron-électron

Modèle

- Transport hors d'équilibre \Rightarrow effets de **charge d'espace** importants
couplage autocohérent entre **Schrödinger** et la simulation **Monte Carlo**
 \Rightarrow gros volumes de calculs attendus
- Problème de stabilité
- Non-parabolicité dans l'interaction électron-électron

LCQ

- Autres systèmes de matériaux
- LCQ photodétecteurs térahertz
 \Rightarrow Étude du bruit
 \Rightarrow Interaction avec la lumière (électron-photon)

Autres sources THz \Rightarrow phénomènes e/e \Rightarrow plasmons