

Interaction électrons – SPhP dans les puits quantiques

Sommaire

5.1	Phonons dans les puits quantiques	92
5.1.1	Comparaison des SPhP d'un puits quantique et des SPP d'un film métallique	93
5.1.1.1	Cas simple d'une interface plane	93
5.1.1.2	Cas d'une double interface	94
5.1.2	SPhP d'un puits GaAs/Al _{0,33} Ga _{0,67} As et de la structure <i>Lapsus</i> complète	96
5.1.3	Phonons confinés	98
5.2	Interaction électrons-phonons	103
5.2.1	Paramètres clés de l'interaction électrons-SPhP	103
5.2.2	Hamiltonien d'interaction	104
5.2.3	Éléments de matrice	107
5.2.4	Durées de vie électroniques	108
5.2.5	Taux d'émission et d'absorption de chaque mode de SPhP	110
5.3	Couplage aux ondes progressives et simulations électroniques	114
5.3.1	Simulations de transport électronique par méthode de Monte Carlo	114
5.3.2	Absorption résonante	117

Les travaux développés dans ce chapitre s'inscrivent dans le cadre d'un projet financé par l'ANR et nommé *Lapsus* pour « laser assisté par phonons-polaritons de surface » (aujourd'hui, il ne s'agit plus d'un laser, mais d'une source de rayonnement). Ce projet, démarré en 2007, implique trois laboratoires, le Laboratoire Photonique et Nanostructures (LPN, Marcoussis), l'Institut d'Électronique Fondamentale (IEF, Orsay) et le laboratoire Charles Fabry. Au LPN, Fabrice Pardo et Jean-Luc Pelouard participent à la conception et à la fabrication des dispositifs, à l'IEF, Jérôme Saint-Martin et Philippe Dolfus participent à la simulation du comportement électrique des dispositifs, enfin au laboratoire Charles Fabry, Simon Vassant, François Marquier, Jean-Jacques Greffet et moi-même, participons à la modélisation, à la fabrication et à la caractérisation des dispositifs.

Ce projet est apparu comme une suite logique des travaux précédents de l'équipe de Jean-Jacques Greffet sur le rayonnement thermique spatialement cohérent (GREFFET et al. 2002 ; MARQUIER et al. 2004). La source thermique considérée dans ces études est constituée d'un cristal polaire (SiC) sur lequel est gravé un

réseau. Il a été démontré que la cohérence spatiale du rayonnement a pour origine l'existence de phonons-polaritons de surface (SPhP) à la surface de ce cristal polaire. Le réseau couple les SPhP, non radiatifs, au rayonnement. La grande longueur de propagation des SPhP permet de mettre en phase des points éloignés de la source conduisant à la cohérence spatiale du rayonnement. Dans l'expérience du rayonnement thermique spatialement cohérent, les SPhP sont excités thermiquement en chauffant le cristal polaire. Le but du projet *Lapsus* est d'exciter les SPhP électriquement, via un puits quantique situé à proximité de la surface du cristal polaire et du réseau, comme décrit sur la figure 5.1. Un courant d'électrons circule dans le puits quantique,

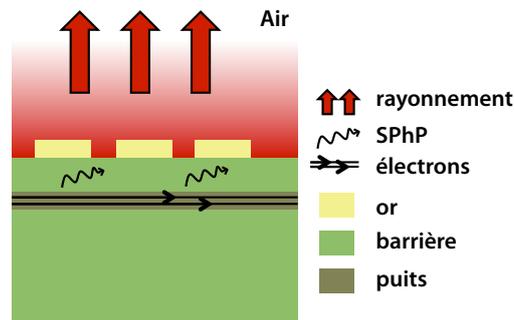


FIGURE 5.1 – Idée initiale du projet *Lapsus*. Des électrons circulent dans un puits quantique, situé à proximité d'une interface supportant des SPhP. Un recouvrement entre le puits et le champ des SPhP permet aux électrons d'émettre des SPhP (aux énergies considérées, par transitions inter- et intrasousbandes). Ces SPhP sont couplés aux ondes progressives au-dessus du puits via un réseau. On obtient ainsi une source de rayonnement, à la fréquence des SPhP de la structure, située dans le domaine térahertz pour le GaAs.

parallèlement aux interfaces du puits. Ce puits est peuplé par modulation de dopage, de sorte que des électrons sont présents dans la bande de conduction du puits, et permettent le transport d'un courant (WEISBUCH et VINTER 1991). Le confinement des électrons dans le puits conduit à une quantification de leur quantité de mouvement dans la direction perpendiculaire aux interfaces, de sorte que dans le puits, les niveaux d'énergie pour les électrons sont eux-mêmes quantifiés et forment des sousbandes (WEISBUCH et VINTER 1991). Celles-ci sont représentées schématiquement plus loin sur la figure 5.12. Les électrons peuvent émettre des SPhP en passant d'une sousbande donnée à une sousbande inférieure.

La figure 5.2 représente une structure, effectivement fabriquée dans le cadre du projet *Lapsus*, étudiée par Simon Vassant (2011) dans le cadre de sa thèse. Cette figure illustre le fonctionnement d'une structure agissant en *modulateur* dans le domaine térahertz. Ceci constitue une première application de cette structure dans laquelle les électrons d'un puits quantique interagissent fortement avec des SPhP couplés au rayonnement via un réseau. Ce point sera abordé dans la partie 5.3.2.

Le but du projet *Lapsus* est donc de réaliser une structure dans laquelle les électrons d'un puits quantique interagissent fortement avec des SPhP, eux-mêmes couplés au rayonnement via un réseau. Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser dans un premier temps aux différents SPhP de la structure (ils existent potentiellement à chaque interface), et nous verrons que certains de ces SPhP peuvent interagir fortement avec les

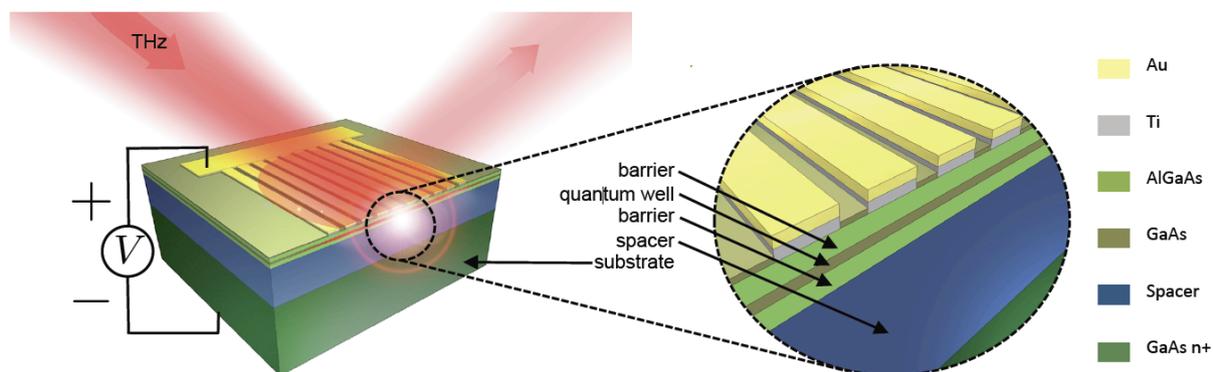


FIGURE 5.2 – Structure réalisée pour le projet *Lapsus*. La vue en perspective (gauche) et l'agrandissement (droite) indiquent la géométrie de la structure réalisée. Voir la figure 5.24 pour les dimensions des différents éléments. (Le faisceau incident sur la structure ainsi que la tension appliquée permettent de décrire le fonctionnement en tant que modulateur de la structure et sont donc secondaires ici). Image extraite de (VASSANT et al. 2011).

électrons du puits quantique. Nous verrons que ces SPhP ont des propriétés différentes des SPhP d'une interface simple cristal polaire/air, et présentent des analogies avec les plasmons-polaritons de surface (SPP) d'un film métallique. Nous modéliserons ensuite leur interaction avec les électrons d'un puits, en nous basant sur le formalisme quantique développé au chapitre 4. Nous discuterons du phénomène d'absorption résonante permis par ces modes, et ayant conduit à la réalisation d'un modulateur THz contrôlé électriquement, ainsi que des premiers calculs de simulation de transport électronique réalisés par l'équipe de l'IEF (voir ci-dessus).

5.1 Phonons dans les puits quantiques

Lorsque l'on modélise l'interaction électrons-phonons dans les puits quantiques, on décrit généralement les phonons comme des phonons de volume du matériau du puits (ROSENCHER et VINTER 2002). Lorsque l'on prend en compte les différentes interfaces de la structure, deux types de phonons, SPhP et phonons confinés, se substituent en fait aux phonons optiques longitudinaux de volume (« phonons LO »). Ces derniers constituent le principal canal de désexcitation des électrons dans les puits quantiques, avec des durées de vie de l'ordre de la picoseconde, voire du dixième de picoseconde. Ceci limite sévèrement la possibilité de réaliser des sources de rayonnement basées sur des puits quantiques aux longueurs d'onde des phonons. L'énergie transmise aux phonons est généralement considérée comme perdue (LIU et CAPASSO 2000 ; ROSENCHER et VINTER 2002). En s'appuyant sur un modèle plus précis de ces phonons, le projet *Lapsus* a pour but de tirer parti de l'énergie transmise à ces phonons, en couplant certains d'entre-eux au rayonnement via un réseau.

Au cours des années 1980 et 1990, une littérature abondante a discuté de ce problème de modélisation des phonons dans les puits quantiques. Le but poursuivi par ces auteurs était notamment d'augmenter les durées de vie des électrons associées à leur interaction avec les phonons (qui constituent le principal canal de pertes dans les puits quantiques) afin d'exploiter les transitions intersousbandes pour obtenir un gain optique et réaliser un laser aux fréquences de ces dernières, ce qui sera fait par FAIST et al. (1994) avec des structures à « cascades quantiques ». Le principal point à l'origine de controverses concerne les relations de passage des différentes grandeurs, champ électrique et déplacement ioniques notamment, au niveau des interfaces du puits. En effet, champ électrique et déplacements ioniques sont liés et se déduisent a priori l'un de l'autre – dans le cadre d'un modèle local, le champ électrique en un point \mathbf{r} , $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, et le déplacement ionique en ce point, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, sont liés par une formule de la forme $\mathbf{u}(\mathbf{r}, \omega) = \alpha(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$. Or, les conditions mécaniques imposent des relations de continuité sur $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, et les équations de Maxwell en imposent sur $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, et ces relations peuvent être incompatibles.

Ainsi, plusieurs catégories de modèles ont été développés. Le modèle dit « hydrodynamique » tient compte des relations de continuité mécaniques et fait l'impasse sur celles du champ électromagnétique (RIDLEY et BABIKER 1991). Ce modèle prédit correctement les symétries mises en évidence lors d'observations par mesures Raman de ces phonons – ces mesures, au cours desquelles le vecteur d'onde n'est pas conservé constituent, avec les mesures de durées de vie électroniques, les points d'appui expérimentaux de ces modèles théoriques. Le modèle dit du continuum diélectrique (DCM, pour *dielectric continuum model*), s'appuie sur les équations de Maxwell et sur une modélisation du comportement des matériaux par leur constante diélectrique, supposée locale (DEREUX et al. 1988 ; MORI et ANDO 1989). Les symétries des modes prévus par ce modèle sont contradictoires avec celles prédites par le modèle hydrodynamique. Au cours des années 1990, deux modèles sont venus résoudre cette controverse. Le premier est le modèle « hybride » de Ridley (RIDLEY 1993 ; RIDLEY et al. 1994 ; RIDLEY 1997), où des phonons LO et TO (obtenus par un modèle où déplacements ioniques et champ électrique sont liés par une relation *non locale*) ainsi que des phonons de surface sont superposés afin de satisfaire aux relations de continuité mécaniques et électromagnétiques. Toutefois, ce modèle ne tient pas compte de la réponse non locale des matériaux lors de l'écriture de la composante normale du déplacement et

de sa continuité aux interfaces, mélangeant à la fois des modèles locaux et non locaux. Un second modèle, plus élégant, s'appuie sur des constantes diélectriques *non locales*, et montre que leurs relations de continuité électromagnétiques et mécaniques peuvent être satisfaites en même temps sans problème (PEREZ-ALVAREZ et al. 1993 ; COMAS et al. 1997).

Dans le cadre de cette thèse, nous nous appuyerons sur le modèle du continuum diélectrique (DCM). Bien qu'il ne tienne pas compte des relations de continuité mécaniques, ce modèle présente l'avantage de permettre de s'appuyer sur des outils développés pour les équations de Maxwell. De plus, nous nous intéresserons à des phonons de faible vecteur d'onde (proches de $\frac{\omega}{c}$, quelques μm^{-1} au plus) donc de grande longueur d'onde auxquelles les modèles locaux s'appliquent, et l'accord théorie-expérience obtenu par VASSANT (2011) nous ont conforté dans cette voie. Il faut ajouter à cela que ce modèle permet de tenir compte très facilement des pertes des matériaux, ce qui à notre connaissance n'a été fait dans le cadre d'aucun des modèles abordés ci-dessus. Nous verrons que certains de ces modes sont très amortis, avec des facteurs de qualité compris entre 20 et 50, ce qui soulève des doutes sur la validité de l'approximation sans pertes effectuée pour décrire l'interaction de ces modes avec les électrons. (Toutefois, les modes les plus intéressants pour nous auront des facteurs de qualité supérieurs à 100.)

Dans cette section, nous allons nous intéresser aux différents modes de type phonons présents dans une structure à puits quantique. Nous discuterons tout d'abord des SPhP, dont on sait qu'ils présentent des analogies avec les SPP existant au niveau d'interfaces métalliques. Nous verrons que certains de ces modes ont un champ important dans le puits quantique, et pourront donc interagir fortement avec ses électrons.

Nous expliquerons également ce que sont les « phonons confinés », modes optiques qui ont la particularité d'avoir un champ entièrement compris dans une unique couche de cristal polaire, et d'exister uniquement à la fréquence des phonons LO de cette couche. Ces phonons confinés constitueront le principal canal de désexcitation « parasite » pour les électrons du puits quantique.

5.1.1 Comparaison des SPhP d'un puits quantique et des SPP d'un film métallique

5.1.1.1 Cas simple d'une interface plane

Revenons tout d'abord au cas le plus simple d'une interface plane séparant un métal ou un cristal polaire du vide. Cette interface porte des ondes de surface (SPhP ou SPP). En tant que modes du champ électromagnétique, les SPhP présentent des analogies avec les SPP. Dans les deux cas, il s'agit d'ondes électromagnétiques confinées à proximité d'une ou plusieurs interfaces planes, dont certaines séparent des milieux de constantes diélectriques opposées. Ces deux types d'ondes nécessitent ainsi au moins un matériau dont la constante diélectrique peut être négative : métal pour les SPP, cristal polaire pour les SPhP. Les cristaux polaires sont caractérisés par les pulsations de leurs phonons optiques de volume, longitudinaux (ω_{LO}) ou transverses (ω_{TO}), entre lesquelles leur constante diélectrique est négative et des SPhP peuvent exister. Ces pulsations se situent généralement dans l'infrarouge lointain ou le domaine térahertz.

Comme pour les SPP, le module du vecteur d'onde des SPhP, dans le plan de l'interface, prend des valeurs supérieures à $\frac{\omega}{c}$ (« hors du cône de lumière »), inaccessibles pour les ondes progressives, et l'on ne peut les

exciter en éclairant simplement une surface parfaitement plane. Un moyen courant d'exciter les ondes de surface est d'utiliser un réseau. Dans ce cas, une onde progressive incidente excite par diffraction l'onde de surface. Cela est possible avec les SPP (WOOD 1904 ; HUTLEY et MAYSTRE 1976) et les SPhP (WATANABE et al. 1989 ; VASSANT et al. 2010).

5.1.1.2 Cas d'une double interface

De même que pour l'interface plane, on peut comparer les SPhP d'un film mince constitué d'un cristal polaire et les SPP d'un film mince métallique, abondamment étudiés dans la littérature (SARID 1981 ; BERINI 2000 ; DE LEON et BERINI 2010).

En ce qui concerne les SPhP d'un film constitué d'un cristal polaire, on retrouve également une analogie avec les SPP. La figure 5.3 (gauche) montre la relation de dispersion des SPhP d'un film de GaAs, d'épais-

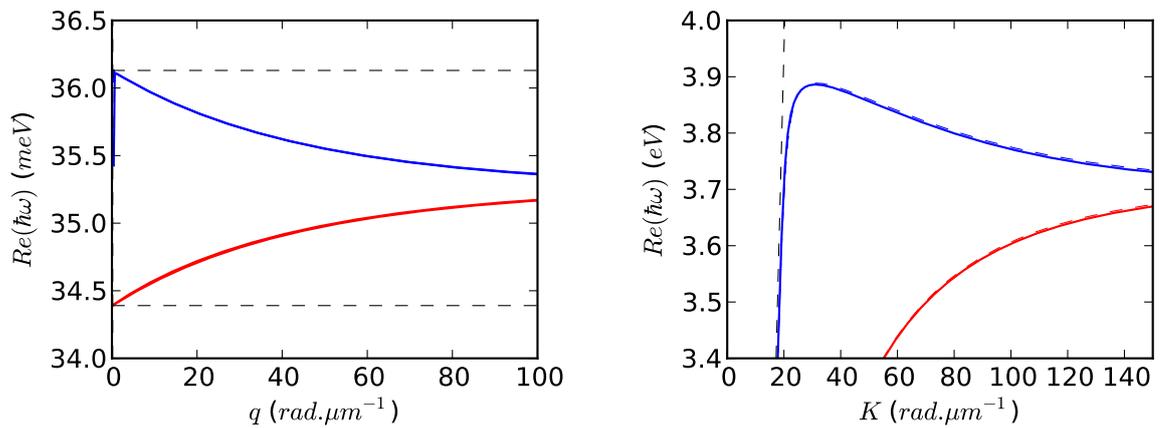


FIGURE 5.3 – Relation de dispersion des SPhP d'un puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As et d'un des SPP d'un film d'argent entourés d'air. Épaisseur du film de GaAs : 21,6 nm [constantes diélectriques de GaAs et Al_{0,33}Ga_{0,67}As : (KIM et SPITZER 1979)]. Épaisseur du film d'argent : 20 nm [constante diélectrique pour l'argent : (ARCHAMBAULT et al. 2010)]. Bleu : modes de champ antisymétrique (« LRSPP »). Rouge : modes de champ symétrique (« SRSPP »). Tirets noirs : à gauche, intervalle de fréquences pour lequel les constantes diélectriques de GaAs et Al_{0,33}Ga_{0,67}As sont opposées (ω_{LO} du caractère GaAs de Al_{0,33}Ga_{0,67}As, et de GaAs), à droite, cône de lumière $K = \frac{\omega}{c}$. Les modes déterminés ici ont une pulsation complexe. Un modèle analytique de constante diélectrique est utilisé afin d'évaluer ces dernières en des pulsations ω complexes. Le modèle de constante diélectrique de l'argent utilisé ici ne s'applique plus au delà de 3,75 eV. Les relations de dispersion et les modes correspondant au delà de 3,75 eV doivent donc être vus comme propres au modèle utilisé et ne s'appliquent que de manière limitée à un film d'argent.

seur 20 nm, inclus dans de l'Al_{0,33}Ga_{0,67}As, et pour comparaison, la figure 5.3 (droite) montre la relation de dispersion des SPP d'un film d'argent entouré d'air, d'épaisseur 20 nm également. Dans les deux cas, cette relation de dispersion est constituée de branches correspondant à des modes dont le champ est symétrique (branche inférieure) ou antisymétrique (branche supérieure). Les notions de symétrie et antisymétrie

du champ électrique sont rappelées sur la figure 5.4. Pour les SPP, on parle habituellement de SPP *short range*

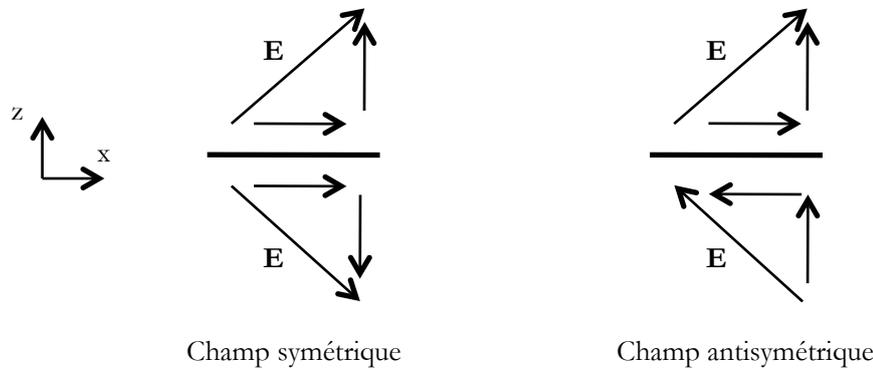


FIGURE 5.4 – Représentation des symétries des SPhP d'un puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As. Gauche : champ électrique \mathbf{E} symétrique (composante E_x paire, composante E_z impaire). Droite : champ électrique \mathbf{E} antisymétrique (composante E_x impaire, composante E_z paire). Trait épais : plan de symétrie.

(SRSPP) et *long range* (LRSPP), pour les modes symétriques et antisymétriques respectivement.

Dans le cas courant où le métal utilisé est de l'or ou de l'argent, les épaisseurs minimales technologiquement atteignables sont de l'ordre de 10 à 20 nm, soit $\lambda_p/20$ environ, où λ_p est la longueur d'onde correspondant à la pulsation plasma ω_p , caractéristique du métal et vérifiant $\epsilon(\omega_p) = 0$ (uniquement $Re[\epsilon'(\omega_p)] \approx 0$ en présence de pertes dans le métal).

L'épaisseur typique des puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As utilisés dans nos structures est également typiquement de 20 nm. Toutefois, la longueur d'onde correspondant à l'asymptote des SPhP est ici proche de 35 μm . Ainsi, l'épaisseur du puits est ici d'environ $\lambda_{LO}/1750$, où λ_{LO} est la longueur d'onde correspondant à la pulsation des phonons LO du cristal polaire, pour laquelle on a $\epsilon(\omega_{LO}) \approx 0$ (ω_{LO} est donc analogue à ω_p pour les métaux qui vérifie également $\epsilon(\omega_p) \approx 0$). Cette valeur de $\lambda/1750$ est à comparer à $\lambda/10 - 20$ pour les SPP d'un film d'argent de 20 nm, voir ci-dessus. On se situe donc dans une configuration beaucoup plus sub-longueur d'onde que lorsqu'on étudie les SPP d'un film métallique. Les deux branches de la relation de dispersion se repoussent ainsi beaucoup plus l'une par rapport à l'autre qu'usuellement avec des SPP. La branche supérieure de la relation de dispersion des SPhP s'approche à certains vecteurs d'onde de ω_{LO} (voir figure 5.3).

Pour le champ des SPhP de cette branche, la composante E_z du champ électrique est quasi-uniforme sur l'épaisseur du film et discontinue à ses interfaces. Aux faibles valeurs K du vecteur d'onde, la branche supérieure des SPhP du puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As pour laquelle le GaAs est de constante diélectrique négative, se rapproche de la pulsation ω_{LO} pour laquelle la constante diélectrique du GaAs est nulle. Ceci a une conséquence spectaculaire en ce qui concerne la structure spatiale du champ électrique. En effet, la continuité de $D_z = \epsilon E_z$ avec $|\epsilon|$ faible dans le puits conduit à un champ E_z dans le puits beaucoup plus grand qu'à l'extérieur. Sur la figure 5.5, on a représenté la répartition en énergie des branches supérieures des SPhP et

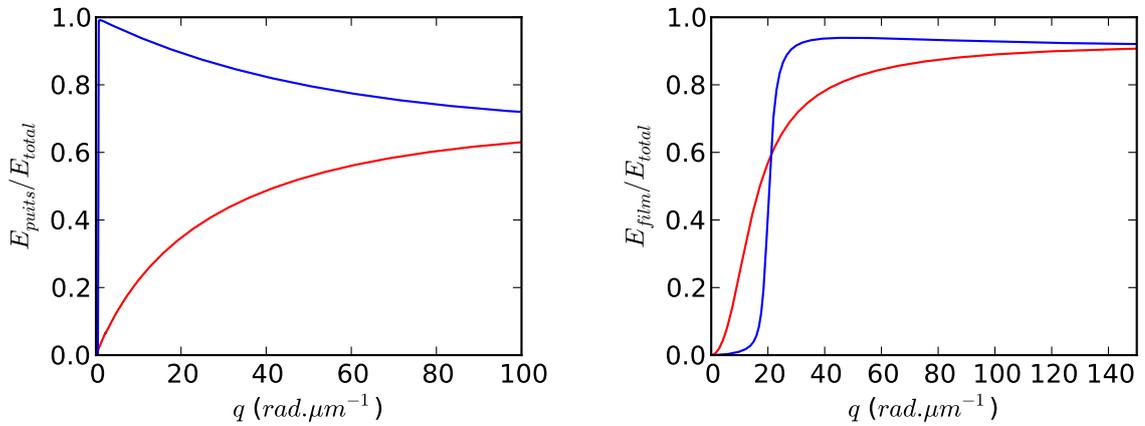


FIGURE 5.5 – Fraction de l'énergie dans le puits ou le film des SPhP d'un puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As et des SPP d'un film d'argent. La figure de gauche (droite) correspond au puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As (film d'argent). L'ordonnée correspond à la fraction d'énergie dans le puits ou dans le film d'argent. Les courbes bleues (rouges) correspondent aux modes antisymétriques (symétriques), comme sur la figure 5.3. La répartition de l'énergie dans les différentes couches est déterminée à l'aide des résultats de l'annexe B.4. On remarque sur la figure de gauche qu'à certains vecteurs d'onde, l'énergie du SPhP antisymétrique est quasi-entièrement dans le puits.

SPP en fonction de leur vecteur d'onde K . On remarque qu'aux faibles K , les SPhP ont un comportement nettement différent des SPP. Pour les SPhP, l'énergie du mode est quasi-entièrement dans le puits, ce qui contraste avec les SPP, dont le champ se situe en grande partie hors du film métallique dans la même gamme de vecteur d'onde q (ce qui minimise leurs pertes, d'où la dénomination de *long range*). Notons que malgré ce confinement, les pertes de ces SPhP n'augmentent pas de manière démesurée, car la partie imaginaire de la constante diélectrique du GaAs reste faible aux pulsations correspondantes, contrairement au cas du métal.

5.1.2 SPhP d'un puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As et de la structure *Lapsus* complète

Le puits simple représenté sur la figure 5.6 est constitué de deux matériaux : GaAs et Al_{0,33}Ga_{0,67}As. Ces deux matériaux sont des cristaux polaires et ont des résonances allant de 7,9 à 11,4 THz (de 32,8 à 47,1 meV). Leurs constantes diélectriques sont tracées sur la figure 5.7. On remarque sur cette figure trois intervalles de fréquences pour lesquelles les signes des constantes diélectriques du GaAs et du Al_{0,33}Ga_{0,67}As sont opposés : des ondes de surface existeront donc dans ces intervalles de fréquences. L'intervalle de fréquences les plus faibles correspond à la résonance GaAs du Al_{0,33}Ga_{0,67}As (« A » sur la figure 5.7, la constante diélectrique du Al_{0,33}Ga_{0,67}As est négative, à cause de la résonance due à son caractère GaAs), l'intervalle central à la résonance du GaAs (« B » sur la figure 5.7, la constante diélectrique du GaAs est négative), et l'intervalle supérieur à la résonance AlAs du Al_{0,33}Ga_{0,67}As (« C » sur la figure 5.7). Nous nous intéresserons principalement aux SPhP de l'intervalle B – ce sont ces SPhP qui interagiront le plus avec les électrons, comme nous le verrons plus loin, dans la section 5.2. On a comparé ces SPhP aux SPP d'un film métallique dans la partie 5.1.1.



FIGURE 5.6 – Puits GaAs/AlGaAs.

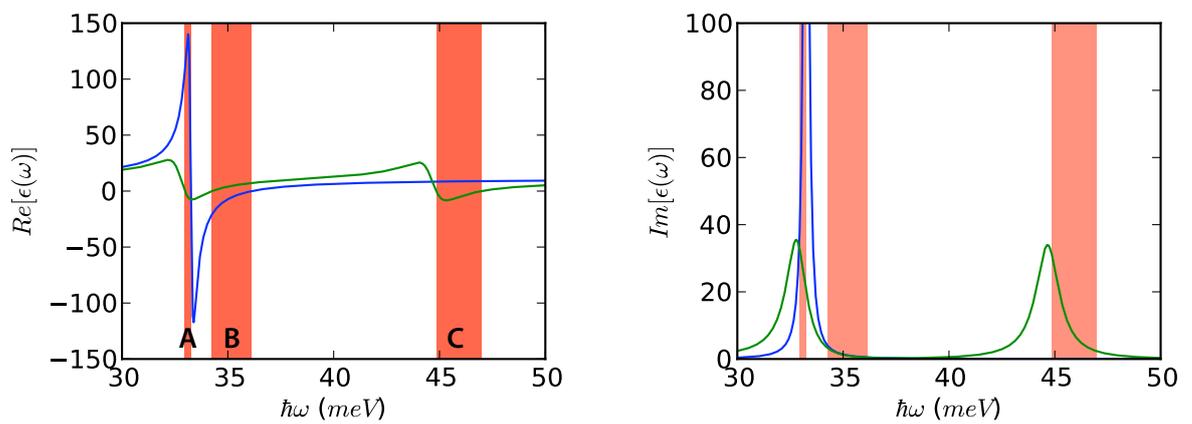


FIGURE 5.7 – Constantes diélectriques de GaAs et $Al_{0,33}Ga_{0,67}As$. Les intervalles de fréquence A, B et C, correspondent à ceux pour lesquels les parties réelles des constantes diélectriques de GaAs et $Al_{0,33}Ga_{0,67}As$ sont opposées et auxquelles des SPhP peuvent exister.

Les relations de dispersion de ces ondes de surface sont tracées sur la figure 5.8. Chaque intervalle de

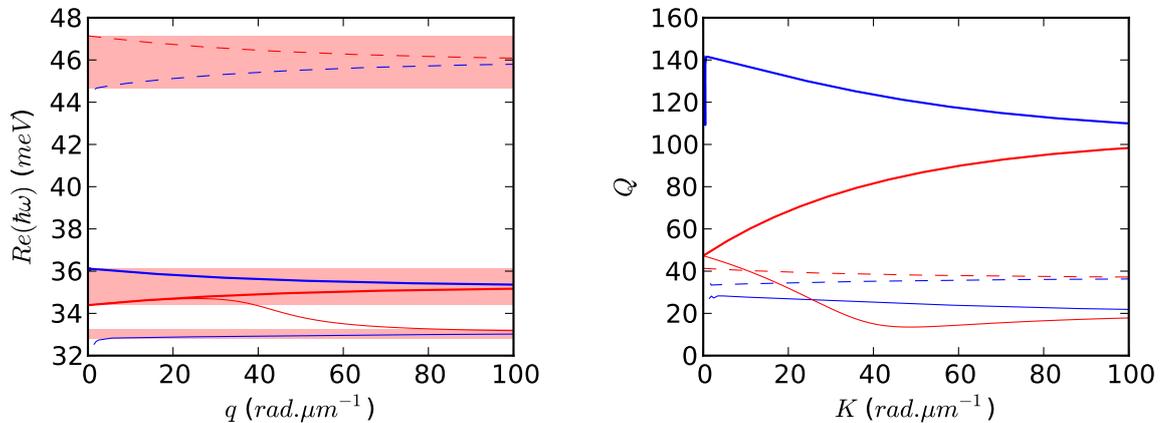


FIGURE 5.8 – Relation de dispersion (gauche) et facteurs de qualité (droite) des SPhP d'un puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As. Les intervalles de fréquence de la figure 5.7 sont reproduits sur la figure de gauche. On remarque que certaines parties des relations de dispersion ne sont pas incluses dans les intervalles de fréquences attendus, voire ont un comportement surprenant en passant d'un intervalle à l'autre (branche en trait fin rouge) – les pulsations correspondantes ont une partie imaginaire importante, et les constantes diélectriques correspondantes s'éloignent de la figure 5.7. On remarque que la branche en trait bleu épais, dont nous avons discuté dans la partie 5.1.1.2, a des facteurs de qualité supérieurs à 100.

fréquence est à l'origine de deux branches de la relation de dispersion : une correspond aux modes symétriques (traits rouges sur la figure), l'autre aux modes antisymétriques (traits bleus). On a tracé le champ de certains de ces modes sur les figures 5.9, où l'on peut constater qu'à des faibles vecteurs d'onde, le champ du mode antisymétrique « B » est quasi-entièrement dans le puits.

Dans l'annexe H.1, on traite le cas d'une structure plus proche (figure H.1) de celle représentée sur la figure 5.2. Les relations de dispersion obtenues (figure H.2) ont notamment des branches proches de celles obtenues ici pour un puits simple, et présentent des symétries proches, et les branches supplémentaires interagissent peu avec les électrons.

5.1.3 Phonons confinés

Nous avons rappelé en introduction que l'interaction électrons-phonons dans les puits quantiques s'appuie en général sur une modélisation approximative des phonons, où l'on suppose qu'il s'agit des phonons de volume du matériau du puits. Parmi ces phonons de volume, figurent les phonons optiques longitudinaux (« phonons LO »), les seuls possédant un champ électrique significatif. Une modélisation plus fine des modes électromagnétiques de la structure, prenant en compte ses différentes interfaces, montre qu'il existe deux types de phonons possédant un champ électrique : les SPhP du puits que nous avons vus dans les parties précédentes, ainsi que les phonons confinés, que nous allons étudier dans cette partie, dont nous verrons qu'ils consistent

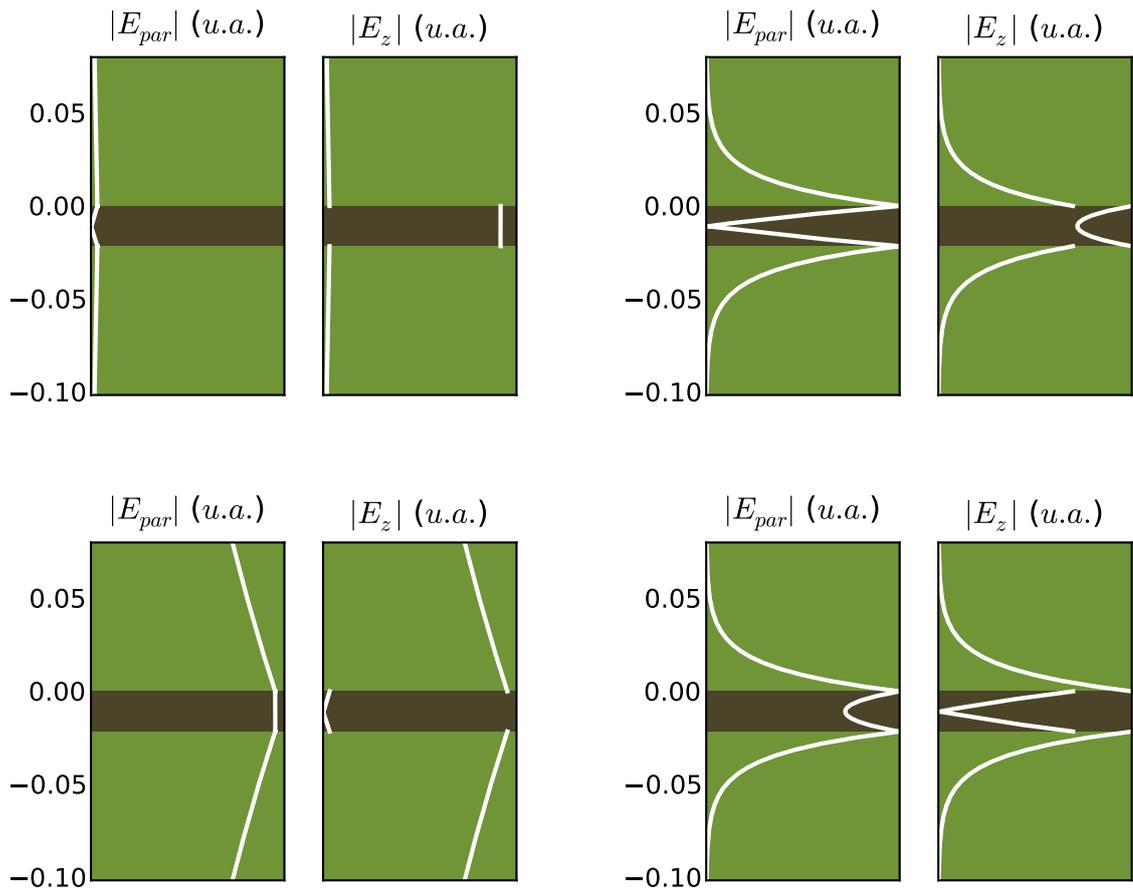


FIGURE 5.9 – Champ électrique des SPhP d'un puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As correspondant aux branches supérieure (haut) et inférieure (bas) des branches « B » (voir figures 5.7 et H.2), à des vecteurs d'onde $K = 3 \text{ rad} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ (gauche) et $80 \text{ rad} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ (droite). L'échelle des champs électriques est arbitraire mais les deux composantes sont normalisées de la même manière (les valeurs relatives de $|E_{//}|$ et $|E_z|$ peuvent être comparées entre elles sur une même figure).

en une superposition de phonons LO dans une couche de cristal polaire dont le champ est parfaitement nul à l'extérieur de cette couche (NASH 1992).

Les phonons confinés ont la particularité de n'exister qu'à la pulsation ω à laquelle $\epsilon(\omega) = 0$. Leur champ est entièrement confiné dans une couche de la structure dont la constante diélectrique vérifie cette condition.

Nous allons nous intéresser ici aux phonons confinés de la couche de GaAs qui constitue le puits, et négliger les phonons confinés des barrières d' $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$, les fonctions d'onde des électrons prenant des valeurs relativement faibles dans les barrières. On s'intéresse en effet principalement aux modes susceptibles d'interagir avec des électrons du puits.

On peut déterminer le champ de ces modes simplement. On part des équations de Maxwell sans sources, dans un milieu non magnétique,

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega\mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (5.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0 \quad (5.1b)$$

$$\nabla \cdot \epsilon(z, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (5.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = -i\frac{\omega}{c^2}\epsilon(z, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (5.1d)$$

et l'on ne s'intéresse qu'à la couche pour laquelle $\epsilon(\omega) = 0$. Il vient directement

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega\mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (5.2a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0 \quad (5.2b)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}. \quad (5.2c)$$

(l'équation 5.1c est alors tout le temps satisfaite). Parmi les solutions de ces équations, on s'intéresse à celles vérifiant $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$, qui ne possèdent donc qu'un champ électrique. Les solutions de $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$ peuvent s'écrire sous la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r}), \quad (5.3)$$

où $\phi(\mathbf{r})$ est une fonction scalaire, qui doit prendre en compte les relations de continuité aux interfaces de la couche considérée. On cherche des solutions pour lesquelles le champ est nul hors de celle-ci, ce qui présente l'avantage de ne pas avoir à s'intéresser à la géométrie à l'extérieur de la couche considérée – le champ y est simplement nul. Cette condition, ainsi que les précédentes, n'empêcheront pas l'existence d'un grand nombre de solutions. Les conditions aux limites nous donnent aux interfaces :

$$\mathbf{E}_{//}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}, \epsilon(z, \omega)E_z(\mathbf{r}) = 0. \quad (5.4)$$

La seconde condition est automatiquement satisfaite car $\epsilon(z, \omega) = 0$. La première équation impose

$$\nabla_{//}\phi(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad (5.5)$$

aux interfaces de la couche. On utilise alors l'invariance par translation dans les directions x et y pour nous intéresser à la transformée de Fourier par rapport à x et y de $\phi(\mathbf{r})$, $\phi(\mathbf{K}, z)$ vérifiant $\phi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2\mathbf{K}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \phi(\mathbf{K}, z)$. La condition aux limites (5.5) peut alors se mettre sous la forme $i\mathbf{K}\phi(\mathbf{K}, z) = \mathbf{0}$, soit $\phi(\mathbf{K}, z) = 0$ aux limites de la couche. On peut alors développer $\phi(\mathbf{K}, z)$ sous forme de série de Fourier, $\phi(\mathbf{K}, z) = \sum_{n>0} \phi_n(\mathbf{K}) \sin(n\pi \frac{z}{a})$, où a est l'épaisseur de la couche considérée comprise entre $z = 0$ et $z = a$. On a finalement

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{n>0} \int \frac{d^2\mathbf{K}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \sin(n\pi \frac{z}{a}) \phi_n(\mathbf{K}), \quad (5.6)$$

que l'on peut réécrire sous la forme

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{n>0} \int \frac{d^2\mathbf{K}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{i\frac{n\pi}{a}z} - e^{-i\frac{n\pi}{a}z}}{2i} \phi_n(\mathbf{K}), \quad (5.7)$$

qui montre que les phonons confinés sont une superposition de deux phonons LO de vecteurs d'onde $\mathbf{K} + \frac{n\pi}{a}\mathbf{z}$ et $\mathbf{K} - \frac{n\pi}{a}\mathbf{z}$, et d'extension limitée à une couche de la structure (voir figure 5.10). Leur relation de dispersion

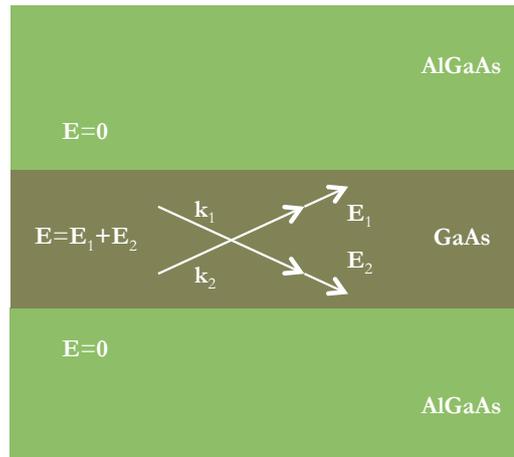


FIGURE 5.10 – Représentation des phonons confinés sous forme de superposition de deux phonons LO.

est représentée sur la figure 5.11 pour une couche de GaAs. Celle-ci est plate. En effet, la pulsation de phonons confinés est constante (et vaut ω_{LO}) et tous les vecteurs d'onde leur sont accessibles. Dans l'expression (5.6), n représente l'ordre des phonons confinés – un phonon confiné d'ordre n a un potentiel présentant n ventres.

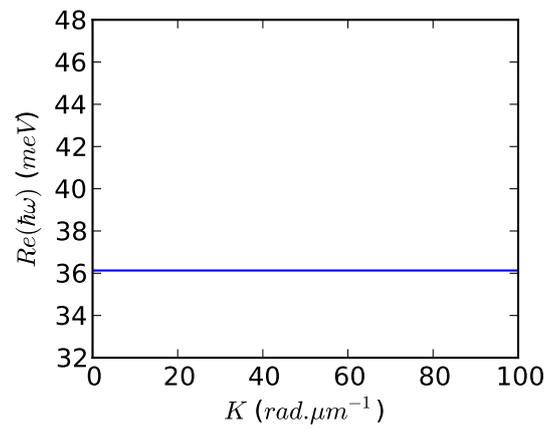


FIGURE 5.11 – Relation de dispersion des phonons confinés d'une couche de GaAs.

5.2 Interaction électrons-phonons

Dans cette section, nous allons étudier l'interaction des électrons avec les SPhP, ainsi que les taux d'émission et d'absorption de chacune des branches de SPhP par une population d'électrons dans la bande de conduction du puits quantique (transitions inter- ou intrasousbandes). L'objectif initial du calcul de ces taux d'interaction est leur utilisation dans un code de calcul Monte Carlo permettant de simuler le fonctionnement du dispositif du projet *Lapsus*. Ces taux indiquent également l'intensité de l'interaction entre électrons et SPhP. Nous verrons tout d'abord quels sont les paramètres clés favorisant l'interaction entre électrons et SPhP. Nous déterminerons ensuite une expression de ces taux en effectuant quelques approximations. Nous tracerons ces différents taux pour un puits simple et pour la structure *Lapsus* afin de mettre en évidence quels SPhP interagissent le plus avec les électrons, et comparer les durées de vie qui leur sont associées avec celles des phonons confinés. Enfin, nous déterminerons les taux d'émission et d'absorption de chaque mode de SPhP avec une population donnée d'électrons, et nous étudierons numériquement le cas d'une population d'électrons thermalisée.

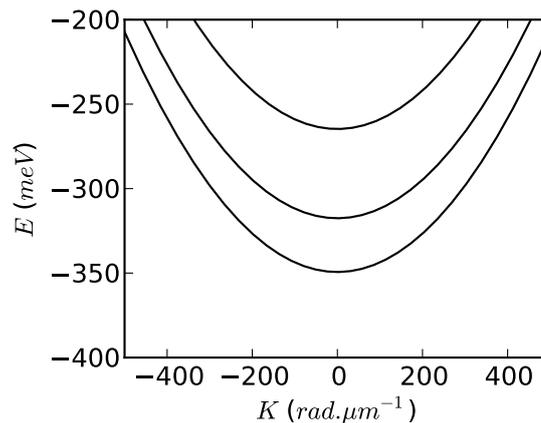


FIGURE 5.12 – Relation de dispersion des électrons dans la bande de conduction d'un puits quantique. Les électrons se répartissent dans des sousbandes (on en a représenté 3 ici). On a considéré un puits quantique rectangulaire de largeur 20 nm, dont le puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As du dispositif du projet *Lapsus* se rapproche.

5.2.1 Paramètres clés de l'interaction électrons-SPhP

Les énergies des SPhP sont pour les matériaux qui nous intéressent de l'ordre de quelques dizaines de meV. À ces énergies, les électrons interagissent avec ces SPhP via des transitions inter- et intrasousbandes. Dans un second temps, le réseau couple ces phonons de surface au rayonnement. On obtient ainsi une structure commandée électriquement capable d'émettre un rayonnement à la fréquence de ces SPhP.

Toutefois, plusieurs problèmes doivent être surmontés pour que cette structure fonctionne de cette manière. Il faut tout d'abord que les fonctions d'onde des électrons et le champ des SPhP émis se recouvrent.

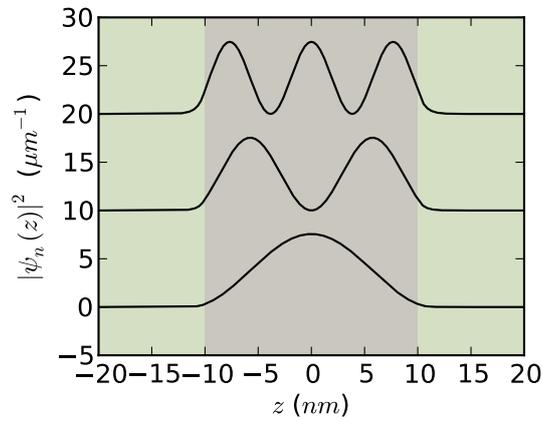


FIGURE 5.13 – Module au carré des fonctions enveloppes des électrons dans les premières sousbandes d'un puits rectangulaire GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As. L'épaisseur du puits est de 20 nm. On suppose le puits rectangulaire, et l'influence du potentiel créé par la charge des électrons sur leurs fonctions enveloppes (qui dépend de la densité – variable – d'électrons dans le puits) a été ignorée.

Pour mieux fixer les idées, nous avons représenté sur la figure 5.13 les fonctions enveloppes des trois premières sousbandes d'un puits rectangulaire, proche de celui de la structure de la figure 5.1. La figure 5.9 montre que certains SPhP (pour certains \mathbf{K}) ont un champ important dans le puits et peuvent donc interagir avec les électrons. Nous donnerons dans la partie 5.2.3 une expression des intégrales de recouvrement traduisant ce recouvrement entre les fonctions enveloppes des électrons et le champ des SPhP.

La structure considérée étant invariante par translation dans les directions parallèles aux interfaces, le moment dans ces directions parallèles doit être conservé. La conservation de l'énergie et du moment parallèle est représentée graphiquement sur la relation de dispersion des électrons sur la figure 5.14. Les composantes du vecteur joignant les états de départ et d'arrivée de l'électron (vecteur d'onde horizontalement et énergie verticalement) doivent correspondre à un point de la relation de dispersion des SPhP (figure H.2).

Comme on le voit sur la figure 5.14, l'ordre de grandeur des vecteurs d'onde électroniques est d'environ $100 \text{ rad} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ et ces derniers peuvent dépasser les $1000 \text{ rad} \cdot \mu\text{m}^{-1}$. Cela correspond à de grands vecteurs d'onde pour les SPhP, au sens où ces valeurs sont très éloignées du cône de lumière ($\frac{\omega}{c} < 1 \text{ rad} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ aux fréquences considérées). Les SPhP émis auront un vecteur d'onde parallèle approximativement compris entre 0 et environ $1000 \text{ rad} \cdot \mu\text{m}^{-1}$. Le réseau à proximité du puits ne permet de coupler efficacement au rayonnement que *quelques* intervalles, séparés de $2\pi/a$, où a est la période du réseau, figure 5.15. Ainsi, seule une très faible fraction des SPhP émis sera susceptible de rayonner, ce qui pénalise l'efficacité de la structure.

5.2.2 Hamiltonien d'interaction

Avant d'utiliser la règle d'or de Fermi afin de calculer des taux d'interaction entre électrons et SPhP, il faut exprimer l'élément de matrice du hamiltonien d'interaction (équation 5.10) entre deux états du système

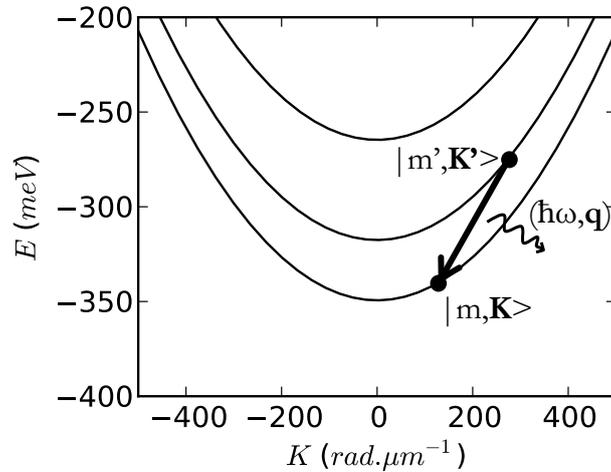


FIGURE 5.14 – Conservation du moment parallèle et de l'énergie lors de l'interaction électrons-SPhP. Moment parallèle en ordonnée, énergie en abscisse. Le vecteur d'onde \mathbf{K} a deux composantes, une seule est représentée ici (en abscisse). On a représenté le passage de l'électron d'un état $|m', \mathbf{K}'\rangle$ à un état $|m, \mathbf{K}\rangle$ par émission d'un SPhP. L'énergie ($\hbar\omega$) et le vecteur d'onde (\mathbf{q}) du SPhP correspondent aux composantes du vecteur joignant $|m', \mathbf{K}'\rangle$ à $|m, \mathbf{K}\rangle$. ($\hbar\omega, q$) doit correspondre à un point de la relation de dispersion des SPhP (figure H.2) – le processus d'émission n'est pas possible dans le cas contraire. L'absorption correspond au processus inverse.

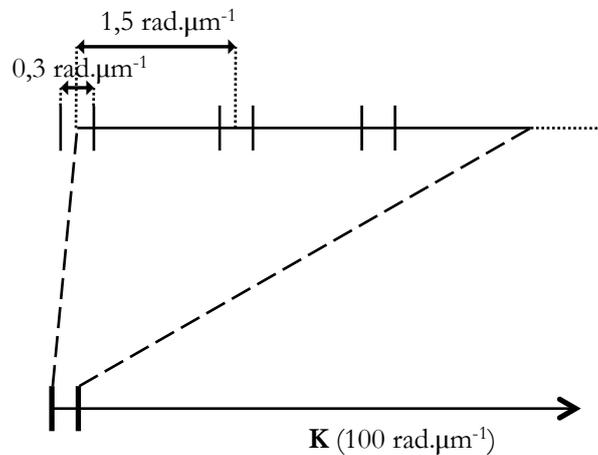


FIGURE 5.15 – Comparaison des intervalles de vecteurs d'onde émis (ordres de grandeur jusqu'à $100 \text{ rad.}\mu\text{m}^{-1}$, vecteur du bas) et couplés au rayonnement par le réseau (intervalles de largeur $2\frac{\omega}{c} \approx 0,3 \mu\text{m}^{-1}$, séparés de $\frac{2\pi}{a} \approx 1,5 \text{ rad.}\mu\text{m}^{-1}$, où a est la période du réseau en or, voir figure 5.2 – symbolisés par des traits fins verticaux, axe en haut). Seuls les premiers intervalles (premiers ordres diffractés par le réseau) sont couplés efficacement au rayonnement.

{électrons + SPhP}. Dans cette partie, nous allons détailler les raisons conduisant au choix de l'hamiltonien d'interaction \mathbf{A}_p entre les électrons de la bande de conduction du puits quantique et les SPhP. L'expression « hamiltonien d'interaction » désigne le terme perturbatif du hamiltonien du système {électrons + SPhP} *en représentation d'interaction* (représentation de Schrödinger pour les électrons et représentation de Heisenberg pour les SPhP).

Les SPhP sont issus d'un couplage entre des photons et des phonons. Aux grands vecteurs d'onde (grands devant $\frac{\omega}{c}$), le caractère « phonon » prédomine : le champ électrique des SPhP vérifie approximativement $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$ et dérive donc d'un potentiel scalaire $\phi(\mathbf{r})$ dont on déduit $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ avec $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r})$. Un hamiltonien d'interaction possible serait alors le hamiltonien $e\phi$, utilisé pour l'interaction électrons-phonons LO (ROSENCHER et VINTER 2002),

$$W_{e\phi} = e\phi(\hat{\mathbf{r}}), \quad (5.8)$$

qui fait intervenir la charge e des électrons et le potentiel scalaire dont dérive le champ des phonons considérés, dont l'argument est l'opérateur position $\hat{\mathbf{r}}$.

À des vecteurs d'onde plus faibles, le caractère « photon » est plus important. On ne peut négliger le champ magnétique des SPhP et leur champ électrique ne dérive plus d'un potentiel scalaire. On pourrait alors être tenté d'utiliser l'hamiltonien $\mathbf{E}\mathbf{D}$, couramment employé pour décrire l'interaction entre la lumière (les photons) et un système à deux niveaux (LOUDON 2000 ; ROSENCHER et VINTER 2002),

$$W_{ED} = \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_0, t) \cdot \hat{\mathbf{D}}, \quad (5.9)$$

où $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_0, t)$ désigne l'opérateur champ électrique à la position \mathbf{r}_0 du système à deux niveaux (il ne s'agit plus de l'opérateur position $\hat{\mathbf{r}}$) et $\hat{\mathbf{D}} = e\hat{\mathbf{r}}$ désigne l'opérateur moment dipolaire du système à deux niveaux avec e la charge de ce système. Toutefois, cet hamiltonien est une approximation du hamiltonien \mathbf{A}_p , plus général, et cette approximation n'est valide que si le champ électromagnétique considéré varie peu à l'échelle du système à deux niveaux (LOUDON 2000), ce qui n'est pas le cas ici à cause des fortes discontinuités du champ aux interfaces du puits et également dans le puits pour des vecteurs d'onde de module $K \gtrsim \frac{1}{a}$ où a est l'épaisseur du puits.

Nous utiliserons donc par la suite l'hamiltonien \mathbf{A}_p pour décrire l'interaction entre les SPhP et les électrons,

$$W_{A_p} = \frac{e}{m} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (5.10)$$

où $\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{r}}, t)$ désigne l'opérateur potentiel-vecteur du champ considéré (ici celui des SPhP) évalué en $\hat{\mathbf{r}}$, l'opérateur position des électrons. $\hat{\mathbf{p}}$ désigne l'opérateur impulsion des électrons, e leur charge et m leur masse. Comme cela est montré par BASTARD (1988), si l'on retire des états électroniques leurs parties périodiques dues aux réseaux cristallins sous-jacents ¹, il faut substituer à la masse m figurant dans W_{A_p} la masse *effective*

1. Dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe, un état électronique $|\psi\rangle$ a une expression de la forme $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = f(\mathbf{r})u(\mathbf{r})$ où $u(\mathbf{r})$ est une fonction présentant les mêmes propriétés de symétrie et de périodicité que le matériau sous-jacent au point \mathbf{r} . Ci-dessus, les opérateurs considérés ne s'appliquent qu'à la partie « enveloppe » $f(\mathbf{r})$ de l'état $|\psi\rangle$, et les états électroniques ne contiennent que cette dernière et sont donnés par l'expression (H.2).

m^* des électrons dans le puits. L'opérateur potentiel-vecteur des SPhP se déduit de l'équation (B.34b). En adaptant les notations à celles de ce chapitre, on obtient

$$\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{r}}, t) = \sum_{p>0} \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_p(q)S}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}}^{(p)}(z) \hat{a}_p(\mathbf{q}) e^{-i\omega_p(q)t} + h.c. \quad (5.11)$$

\mathbf{q} désigne le vecteur d'onde des SPhP, p est un indice parcourant les branches de SPhP, et $\omega_p(q)$ est la pulsation du SPhP de la branche p de vecteur d'onde de norme q .

5.2.3 Éléments de matrice

Après avoir détaillé les raisons conduisant au choix du hamiltonien \mathbf{A}_p pour décrire l'interaction entre électrons et SPhP, nous allons déterminer dans cette partie une expression des éléments de matrice de ce hamiltonien. Certaines étapes de ce calcul sont détaillées dans l'annexe H.2. Ces éléments de matrice imposeront une conservation du moment parallèle lors de l'interaction, et feront notamment intervenir des intégrales de recouvrement entre les fonctions enveloppes des électrons et le champ des SPhP.

On considère donc l'émission et l'absorption d'un mode de SPhP de vecteur d'onde \mathbf{q} entre des états électroniques « fondamental » et « excité », $|m, \mathbf{K}\rangle$ et $|m', \mathbf{K}'\rangle$, La figure 5.14 illustre le cas de l'émission. La relation de dispersion des SPhP contient plusieurs branches (voir figure 5.8 pour un puits, et figure H.2 pour la structure complète). Nous nous intéresserons à l'émission et l'absorption des SPhP d'une unique branche au cours de ces calculs, et les expressions obtenues s'appliqueront à chacune des branches de SPhP. On note les états du système {électrons + SPhP}, $|g\rangle = |m, \mathbf{K}, n_{\mathbf{q}} + 1\rangle$ et $|e\rangle = |m', \mathbf{K}', n_{\mathbf{q}}\rangle$, où $n_{\mathbf{q}}$ est le nombre de quanta dans le mode \mathbf{q} de la branche de SPhP à laquelle on s'intéresse (\mathbf{q} est le vecteur d'onde de SPhP émis ou absorbé).

Du hamiltonien d'interaction (5.10), on ne s'intéresse qu'aux termes correspondant au mode \mathbf{q} , dont on ne garde que les termes en $e^{-i\omega t}$ pour l'absorption et ceux en $e^{i\omega t}$ pour l'émission (LAVERNE 1994), ce qui revient à ne conserver que les termes en $\hat{a}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ pour l'émission et $\hat{a}_{\mathbf{q}}$ pour l'absorption – on note W_a et W_e les expressions résultantes.

Le calcul des éléments de matrice correspondant, $\langle g|W_e|e\rangle$ et $\langle e|W_a|g\rangle$ est détaillé dans l'annexe H.2. On trouve que leurs modules au carré sont égaux, et valent

$$|\langle g|W_e|e\rangle|^2 = |\langle e|W_a|g\rangle|^2 \quad (5.12a)$$

$$= \hbar^2 \frac{e^2}{m^{*2}} \frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0\omega^2 S} \delta_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}'} \left| i\mathbf{K}\cdot\mathbf{q} I_{m,m',q}^{(//)} + I_{m,m',q}^{(z)} \right|^2 (n_{\mathbf{q}} + 1). \quad (5.12b)$$

Dans cette expression, ω désigne la pulsation du SPhP émis ou absorbé. Celle-ci sera fixée par la condition de conservation de l'énergie dans la règle d'or de Fermi. Les moments $\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}$, pour lesquels on évalue cette expression sont a priori quelconques, mais cet élément de matrice sera nul si la conservation du moment $\mathbf{K} + \mathbf{q} = \mathbf{K}'$ n'est pas vérifiée, comme l'indique le symbole de Kroenecker $\delta_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}$. Cette expression fait également intervenir des intégrales de recouvrement entre le champ des SPhP et les fonctions enveloppes des

électrons,

$$I_{m,m',q}^{(//)} = \int dz' \zeta_{m'}^*(z') \zeta_m(z') e_{q, //}(z'), \quad (5.13a)$$

$$I_{m,m',q}^{(//)} = \int dz' \zeta_{m'}^*(z') \frac{d\zeta_m}{dz'} e_{q,z}(z'). \quad (5.13b)$$

Ces intégrales de recouvrement font intervenir à la fois les fonctions enveloppes des états électroniques $\zeta_m(z)$ et $\zeta_{m'}(z)$ et le champ des SPhP (via les composantes $e_{q, //}(z)$ et $e_{q,z}(z)$ du vecteur $\mathbf{e}_q(z)$). Si ces trois fonctions présentent une symétrie par rapport au milieu du puits, des règles de sélection apparaissent. Il est important de le signaler car ces règles de sélection se feront encore ressentir lorsque l'environnement du puits ne sera plus exactement symétrique, comme cela est le cas dans le dispositif final.

5.2.4 Durées de vie électroniques

À partir des éléments de matrice calculés dans la partie précédente et des relations de dispersion des électrons et des SPhP, on peut déterminer les taux d'émission et d'absorption de SPhP d'un électron dans un état donné. Les calculs de cette partie sont détaillés dans l'annexe H.3.

Pour l'émission, on considère ainsi un électron dans un état $|m', \mathbf{K}'\rangle$ (voir la figure 5.14) et on exprime le taux d'émission de SPhP de la branche considérée à l'aide de la règle d'or de Fermi, en sommant sur les états d'arrivée de l'électron ($\sum_{\mathbf{K}}$) ainsi que sur les SPhP pouvant être émis ($\sum_{\mathbf{q}}$),

$$w_e = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{q}} |\langle g | W_e | e \rangle|^2 \delta(E_{m, \mathbf{K}} + \hbar\omega - E_{m', \mathbf{K}'}). \quad (5.14)$$

Dans cette expression, $E_{m, \mathbf{K}}$ ($E_{m', \mathbf{K}'}$) désigne l'énergie des électrons dans l'état $|m, \mathbf{K}\rangle$ ($|m', \mathbf{K}'\rangle$) et ω est la pulsation des SPhP de vecteur d'onde \mathbf{q} . Le calcul de ce taux d'émission est effectué dans l'annexe H.3. On obtient au final

$$w_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m^*} \frac{1}{K'} 2 \int_{|\cos\theta'| < 1} dq (n_q + 1) \frac{1}{\omega} \frac{1}{|\sin\theta'|} \left| iK'q \cos\theta' I_{m,m',q}^{(//)} + I_{m,m',q}^{(z)} \right|^2. \quad (5.15)$$

Cette expression fait intervenir la masse m^* effective, le module du moment initial de l'électron K' ainsi que les indices des sousbandes m et m' , qui sont connus. L'intégrale fait intervenir le module du vecteur d'onde des SPhP émis q ainsi que leur pulsation ω (donnée par leur relation de dispersion) et leur angle d'émission par rapport à \mathbf{K}' , noté θ' (angle entre \mathbf{K}' et \mathbf{q} , voir la figure 5.16). θ' est donné par l'expression

$$\cos\theta' = \frac{q}{2K'} \left[1 - \frac{2m}{\hbar^2 q^2} (\epsilon_m - \epsilon_{m'} + \hbar\omega) \right]. \quad (5.16)$$

Cette égalité se déduit à la fois de la conservation du moment $\mathbf{K} + \mathbf{q} = \mathbf{K}'$ et de l'énergie $E_{m, \mathbf{K}} + \hbar\omega = E_{m', \mathbf{K}'}$. Le membre de droite ne dépend que de q , les autres variables étant fixées. Pour que l'équation (5.16) soit valide, son membre de droite doit être compris entre -1 et 1 : les valeurs de q pour lesquelles c'est le cas

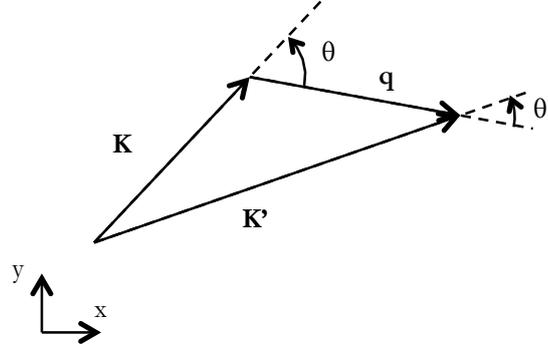


FIGURE 5.16 – Représentation de la conservation du moment lors de l'émission ou de l'absorption d'un SPhP. \mathbf{q} est le vecteur d'onde du SPhP, \mathbf{K} et \mathbf{K}' les vecteurs des états « fondamentaux » et « excités » de l'électron. θ désigne l'angle entre \mathbf{K} et \mathbf{q} et θ' celui entre \mathbf{K}' et \mathbf{q} .

forment l'intervalle d'intégration de l'intégrale figurant dans (5.15). Ainsi, cette intégrale est une somme sur les modules permis des SPhP émis. Pour chaque valeur de q de ce module, (5.16) indique l'angle du vecteur d'onde \mathbf{q} .

De plus, on a supposé que le nombre $n_{\mathbf{q}}$ de SPhP dans chaque mode (caractérisé par le vecteur d'onde \mathbf{q}) est isotrope (on le note alors n_q), ce qui permet de simplifier la somme $\sum_{\mathbf{q}}$ figurant dans (5.14), mais peut ne pas être valide si le réseau en or joue un rôle important.

On calcule le taux d'absorption de SPhP d'un électron à l'aide de la règle d'or de Fermi de manière analogue. L'état de départ de l'électron est cette fois-ci $|m, \mathbf{K}\rangle$, et le taux d'absorption est donné par

$$w_a = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{K}'} \sum_{\mathbf{q}} |\langle e|W_a|g\rangle|^2 \delta(E_{m',\mathbf{K}'} - \hbar\omega - E_{m,\mathbf{K}}). \quad (5.17)$$

Le calcul de ce taux d'absorption est effectué dans l'annexe H.3, et a pour résultat

$$w_a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m^*} \frac{1}{K} 2 \int dq_{|\cos\theta|<1} (n_q + 1) \frac{1}{\omega} \frac{1}{|\sin\theta|} \left| iKq \cos\theta I_{m,m',q}^{(//)} + I_{m,m',q}^{(z)} \right|^2. \quad (5.18)$$

Cette expression présente de fortes similarités avec le taux d'émission (équation 5.15). Le module du vecteur d'onde initial est ici K et non plus K' . Les intégrales de recouvrement ne sont pas exactement les mêmes ($I_{m,m',q}^{(//)}$ et $I_{m,m',q}^{(z)}$ des équations (H.13) pour l'émission, $I_{m,m',q}^{(//)}$ et $I_{m,m',q}^{(z)}$ des équations (H.9) pour l'ab-

sorption). L'angle θ dans (5.18) est l'angle entre les moments \mathbf{K} et \mathbf{q} , donné par l'expression

$$\cos \theta = \frac{q}{2K'} \left[-1 - \frac{2m}{\hbar^2 q^2} (\epsilon_m - \epsilon_{m'} + \hbar\omega) \right]. \quad (5.19)$$

Cette égalité présente des similarités avec (5.16) (K est substitué à K' , et certains signes changent). Les valeurs de q pour lesquelles le membre de droite de cette égalité est compris entre -1 et 1 sont les valeurs permises pour le module des vecteurs d'onde des SPhP émis, et l'intégrale figurant dans (5.18) porte sur ces valeurs.

On a représenté sur la figure 5.17, les taux d'émission et d'absorption des SPhP d'un puits simple. On voit ainsi que parmi les SPhP, les modes de l'intervalle B (figure 5.7, GaAs résonnant) prédominent, suivis par ceux de l'intervalle C (caractère AlAs de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$ résonnant). Aux faibles vecteurs d'onde électroniques, les modes de l'intervalle B peuvent prédominer également sur les phonons confinés (figure 5.17a). Toutefois, ils ont tendance plus généralement à avoir des taux d'interaction environ 6 à 7 fois inférieurs, et donc non négligeables devant eux.

Dans l'annexe H.1, on a tracé sur la figure H.3 les taux d'émission et d'absorption obtenus dans le cas d'une structure proche de celle représentée sur la figure 5.2. Les branches de la relation de dispersion de cette structure proches de celle d'un puits simple ont également des taux d'interaction avec les électrons présentant peu d'écart avec ceux d'un puits simple.

5.2.5 Taux d'émission et d'absorption de chaque mode de SPhP

Les calculs de taux d'émission et d'absorption de SPhP par un électron donné, effectués dans la partie précédente, ne fournissent pas directement d'informations sur le vecteur d'onde des SPhP émis ou absorbés. Cette information est contenue implicitement dans les sommes sur les modules q des vecteurs d'onde des SPhP figurant dans les équations (5.15) et (5.18), l'angle par rapport au moment initial de l'électron étant donné par les équations (5.16) et (5.19). Toutefois, il ne s'agit que des vecteurs d'onde des SPhP émis par un électron dans un état donné, et non émis par l'ensemble des électrons.

Afin de savoir dans quelle mesure chaque mode de SPhP interagit avec les électrons, on se propose de calculer les taux d'émission et d'absorption de SPhP d'un mode donné d'une branche p de SPhP et pour un vecteur d'onde \mathbf{q} . Ces taux indiqueront dans quelle mesure les SPhP couplés au rayonnement via le réseau sont susceptibles d'interagir avec les électrons par rapport aux autres modes.

On cherche ces taux d'émission et d'absorption à l'aide de la règle d'or de Fermi. Dans un premier temps, on ne conserve du hamiltonien d'interaction (équation 5.10) que les termes concernant le mode de la branche p de vecteur d'onde \mathbf{q} ,

$$W_{\mathbf{q}}^{(p)} = \frac{e}{m^*} \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{q}}^{(p)}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (5.20)$$

avec

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{q}}^{(p)}(\hat{\mathbf{r}}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_p(q)S}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}}^{(p)}(z) \hat{a}_p(\mathbf{q}) e^{-i\omega_p(q)t} + h.c. \quad (5.21)$$

Les états fondamental et excité du système {électrons + SPhP} sont les mêmes que dans les parties 5.2.3

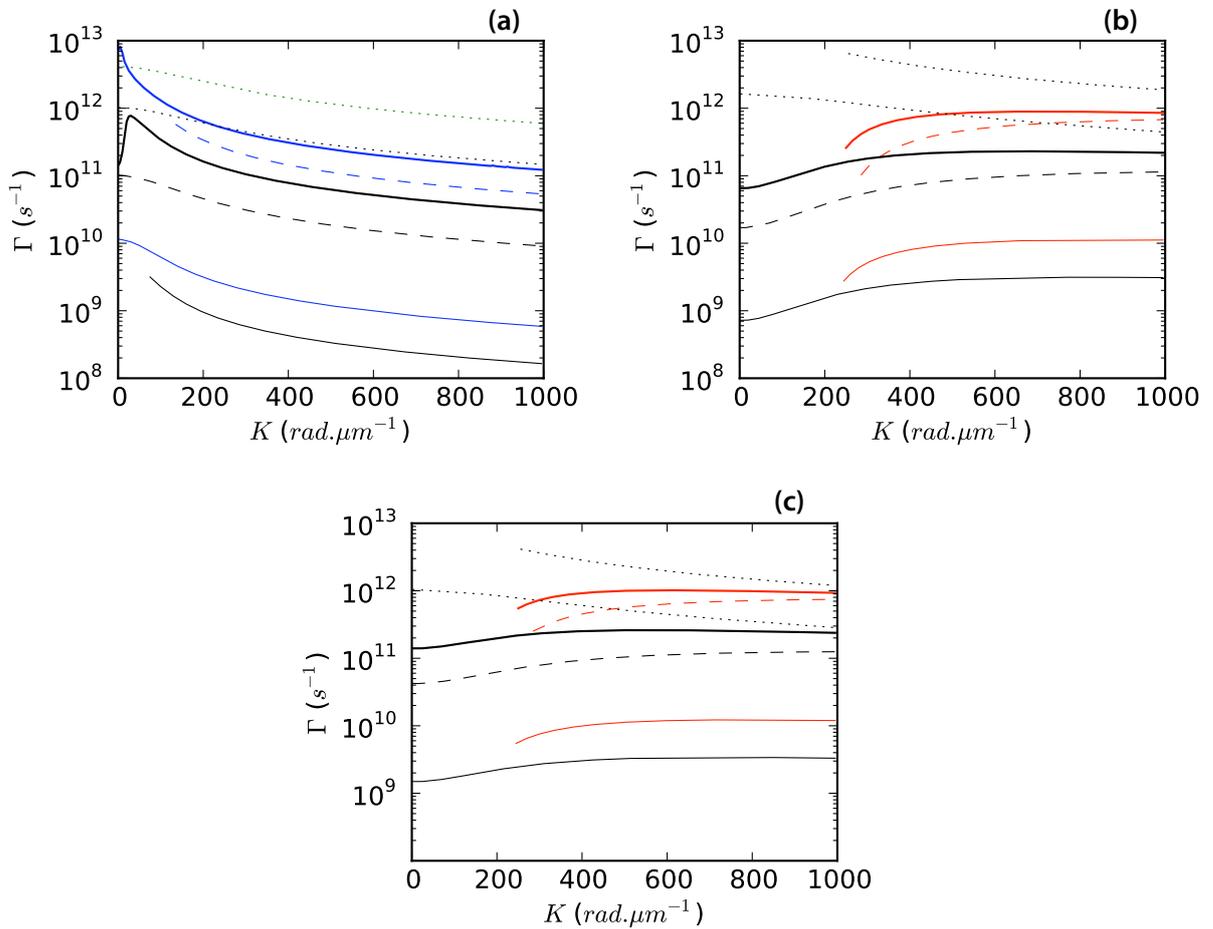


FIGURE 5.17 – Taux d'émission et d'absorption de chaque branche de SPhP d'un électron dans un puits quantique (figure 5.6). Transitions (a) : $2 \leftrightarrow 1$ (émission $2 \rightarrow 1$, absorption $1 \rightarrow 2$), (b) : $1 \leftrightarrow 1$, (c) : $2 \leftrightarrow 2$. Pour les taux d'émission, les couleurs et traits correspondent à la figure 5.8. Les différents traits bleus correspondent aux modes antisymétriques, et les traits rouges correspondent aux modes symétriques. Sur la figure (a), les symétries rendent impossible l'émission et absorption de modes symétriques, de même pour les modes antisymétriques pour les figures (b) et (c). Les taux d'absorption sont représentés en noir, avec le même type de trait (épaisseur, tirets) que les taux d'émission. Les taux d'absorption d'une branche donnée se situent juste en deçà de ses taux d'émission, identifiables grâce à leur couleur. Les taux d'émission et d'absorption de phonons confinés (sommé sur les ordres n) sont représentés en pointillés (courbe supérieure pour l'émission, inférieure pour l'absorption). Le peuplement des différents modes de phonons de surface et d'interface sont calculés à l'aide de la statistique de Bose-Einstein, avec une température $T = 300$ K.

et 5.2.4, $|g\rangle = |m, \mathbf{K}, n_{\mathbf{q}} + 1\rangle$ et $|e\rangle = |m', \mathbf{K}', n_{\mathbf{q}}\rangle$. Les éléments de matrice de (5.20) sont les mêmes que dans la partie 5.2.3 et sont donnés par l'équation (5.12b).

La règle d'or de Fermi permet d'exprimer les taux d'émission et d'absorption de quanta de ce mode de SPhP par une population d'électrons décrite par une fonction de distribution $f(m, \mathbf{K})$ ($f(m, \mathbf{K})$ est la probabilité qu'un état $|m, \mathbf{K}\rangle$ soit occupé, et est donnée par la distribution de Bose-Einstein si la population d'électrons est en équilibre thermique). Le taux d'émission est ainsi déterminé dans l'annexe H.4 et vaut

$$w_{e,\mathbf{q}}^{(p)} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m^*\omega q} \left| i\mathbf{q}\cdot\mathbf{K}' I'_{m,m',q}(\parallel) + I'_{m,m',q}(z) \right|^2 (n_{\mathbf{q}}^{(p)} + 1) \int dK_y f(m', \mathbf{K}') [1 - f(m, \mathbf{K})]. \quad (5.22)$$

On détermine également le taux d'absorption du processus inverse,

$$w_{a,\mathbf{q}}^{(p)} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m^*\omega q} \left| i\mathbf{q}\cdot\mathbf{K}' I'_{m,m',q}(\parallel) + I'_{m,m',q}(z) \right|^2 n_{\mathbf{q}}^{(p)} \int dK_y f(m, \mathbf{K}) [1 - f(m', \mathbf{K}')], \quad (5.23)$$

et lorsque les électrons sont thermalisés (à une température T_e), on trouve que la différence entre $w_{e,\mathbf{q}}^{(p)}$ et $w_{a,\mathbf{q}}^{(p)}$ (taux d'émission « net ») se met sous la forme

$$w_{e,\mathbf{q}}^{(p)} - w_{a,\mathbf{q}}^{(p)} = \Gamma_{e^-, \mathbf{q}}^{(p)}(T_e) [n_{\mathbf{q}}^{(p)} - n_{\mathbf{q}}^{(p)}(T_e)], \quad (5.24)$$

avec

$$\Gamma_{e^-, \mathbf{q}}^{(p)}(T_e) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m^*\omega q} \left| i\mathbf{q}\cdot\mathbf{K}' I'_{m,m',q}(\parallel) + I'_{m,m',q}(z) \right|^2 \int dK_y [f_{T_e, \mu_e}(m', \mathbf{K}') - f_{T_e, \mu_e}(m, \mathbf{K})]. \quad (5.25)$$

Ce taux d'interaction donne la vitesse à laquelle chaque mode de SPhP tend vers $n_{\mathbf{q}}^{(p)}(T_e)$, sa valeur d'équilibre avec la population d'électrons thermalisée. L'expression de $n_{\mathbf{q}}^{(p)}(T_e)$ est donnée par la statistique de Bose-Einstein.

On a représenté sur la figure 5.18 ces taux d'interaction calculés pour les SPhP d'un puits simple (figure 5.6). On a supposé que la densité d'électrons dans le puits était de $n_s = 1,14 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, et que la température électronique était de 300 K.

Dans l'annexe H.1, on a tracé sur la figure H.4 les taux d'interaction obtenus dans le cas de la structure proche de celle représentée sur la figure 5.2. Là encore, on obtient des résultats très proches de ceux d'un puits simple.

On voit que le taux d'interaction des SPhP antisymétriques de l'intervalle de fréquence B (courbe bleue en trait épais sur la figure 5.18a) interagissent fortement avec électrons, via la transition intersousbande $2 \rightarrow 1$. Cette interaction est particulièrement forte pour les SPhP de faible vecteur d'onde, supérieure de plusieurs ordres de grandeurs à la plupart des autres phonons présents. Bien qu'il existe un nombre important de ces autres modes de phonons qui interagissent avec les électrons (voir figure 5.17), on s'attend à ce que les électrons circulant dans le puits émettent une quantité de SPhP couplés au rayonnement permettant l'obtention d'un rayonnement térahertz avec un rendement acceptable.

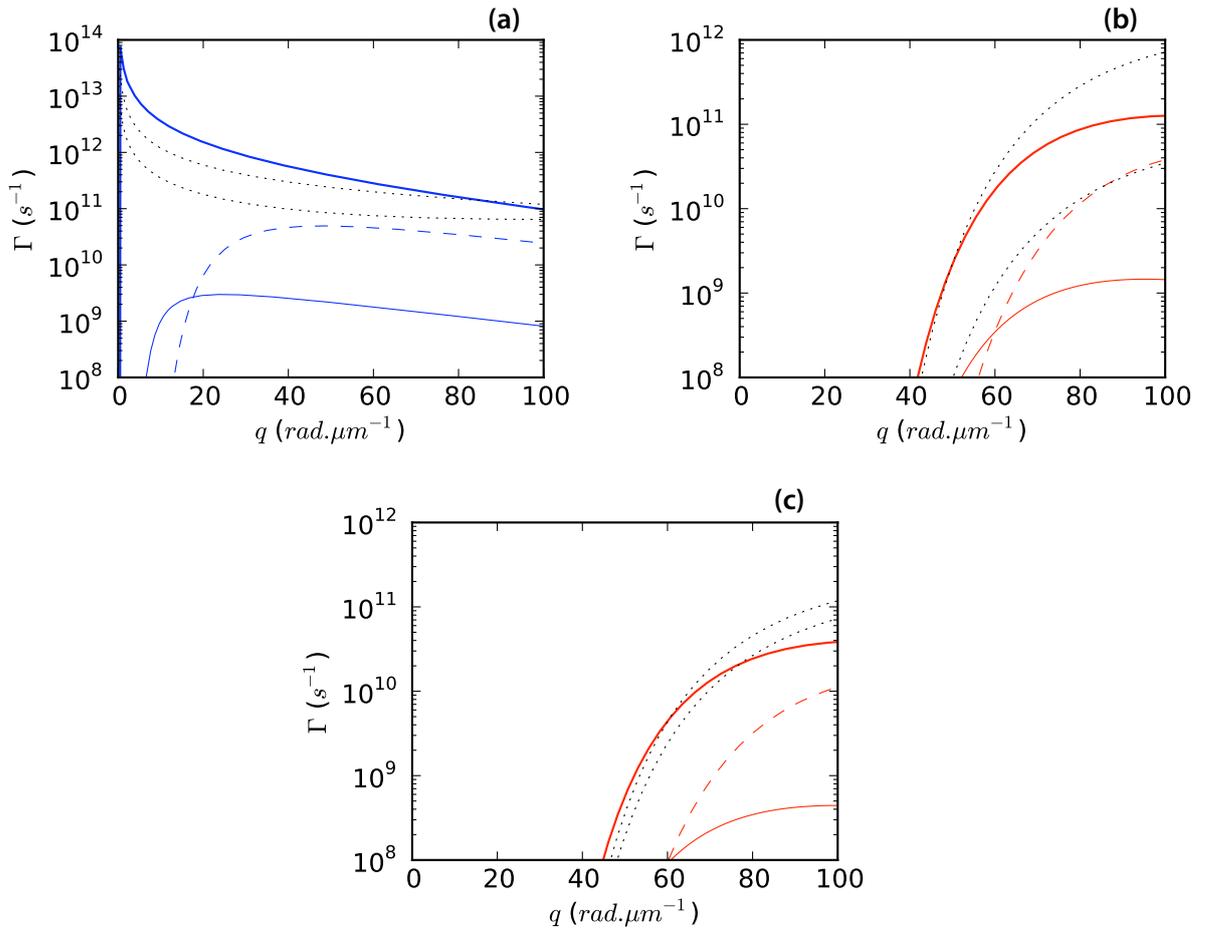


FIGURE 5.18 – Taux d'interaction de chaque mode de SPhP avec une population d'électron, dans un puits simple. Transitions (a) : $2 \leftrightarrow 1$, (b) : $1 \leftrightarrow 1$, (c) : $2 \leftrightarrow 2$. Les couleurs et traits correspondent à la figure 5.8. Les remarques de la figure 5.17 s'appliquent. Les pointillés correspondent aux ordres de phonons confinés dont les taux d'interaction avec les électrons sont les plus importants ((a) : $n = 4$ et 2 , (b) et (c) : $n = 1$ et 3).

5.3 Couplage aux ondes progressives et simulations électroniques

Dans cette section, nous allons discuter des simulations de transport électronique s'appuyant sur la méthode de Monte Carlo et simulant le fonctionnement de structure du type de celle présentée dans ce chapitre. Les résultats présentés s'appuient sur des calculs et une structure préliminaire du projet *Lapsus*, et nous expliquerons en quoi la structure que nous avons étudié conduira à des résultats plus prometteurs. Nous discuterons également du phénomène d'absorption résonante étudiée par VASSANT (2011), qui illustre notamment l'excitation de SPhP via un réseau dans la structure étudiée dans les sections précédentes.

5.3.1 Simulations de transport électronique par méthode de Monte Carlo

Les calculs de taux d'interaction présentés dans ce chapitre s'inscrivent dans la continuité de premières simulations de transport électronique par méthode de Monte Carlo (SAINT-MARTIN et al. 2006), publiés dans (MAZZAMUTO et al. 2009). Nous allons dans un premier temps rappeler brièvement leurs résultats. Ces premiers calculs s'appuient sur une modélisation des SPhP de la structure employée comme SPhP d'une interface simple GaAs/air. Dans un second temps, nous justifierons les raisons qui font que la structure étudiée dans ce chapitre permettra d'obtenir de meilleurs résultats.

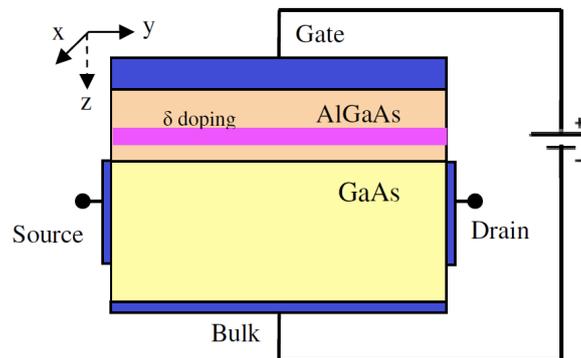


FIGURE 5.19 – Structure modélisée dans le cadre des simulations de transport électronique par méthode de Monte Carlo. Figure extraite de (MAZZAMUTO et al. 2009).

Ces calculs consistent à simuler le transport des électrons dans un puits quantique situé dans une structure telle que celle représentée sur la figure 5.19. Lors de ces calculs, on considère que les électrons interagissent avec trois types de phonons : les phonons acoustiques « bulk », les phonons optiques « bulk », ainsi que les SPhP.

Dans la structure considérée (figure 5.19), le plan de dopage (« δ doping ») induit un puits triangulaire dans le GaAs à l'interface avec AlGaAs. Les électrons circulent dans le puits entre la source et le drain, et une grille permet d'appliquer un champ électrique statique dans le puits, ce qui permet d'ajuster les écarts en énergie entre les sousbandes du puits (par effet Stark, voir WEISBUCH et VINTER 1991 ; ROSENCHER et VINTER 2002).

Dans ces premiers calculs, nous n'avions pas encore développé le traitement quantique des SPhP dans les hétérostructures (annexe B), et les SPhP étaient modélisés comme ceux d'une interface GaAs/air. L'influence de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$ et de la grille était négligée, malgré l'impact que ces couches pouvaient avoir sur ces SPhP (la couche de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$ a une constante diélectrique qui varie fortement aux fréquences considérées et présente elle-même des SPhP, et la grille, métallique, a une constante diélectrique très élevée). Leur relation de dispersion est représentée sur la figure 5.20. On a tracé sur la figure 5.21 la valeur normalisée de la composante

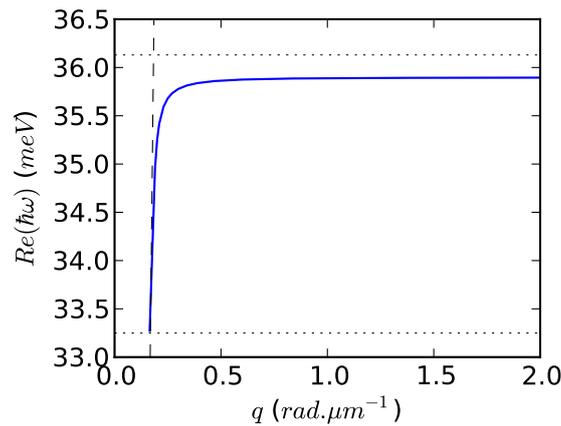


FIGURE 5.20 – Relation de dispersion des SPhP d'une interface GaAs/air. Bleu : relation de dispersion. Tirets noirs : cône de lumière $q = \frac{c}{\epsilon}$. Pointillés noirs : pulsations des phonons TO (bas) et LO (haut) de GaAs. La relation de dispersion se prolonge aux q plus grands, en restant plate (elle garde la même pulsation).

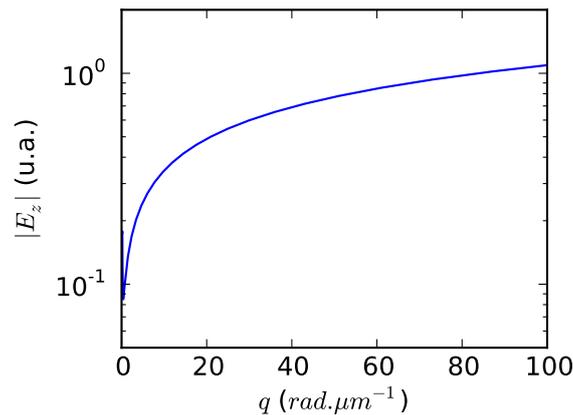


FIGURE 5.21 – Composante E_z du champ normalisé des SPhP d'une interface GaAs/air, dans GaAs, à l'interface avec l'air. Abscisse : vecteur d'onde des SPhP. La composante E_z du champ normalisé décroît fortement aux faibles vecteurs d'onde.

E_z de leur champ électrique dans le GaAs à proximité immédiate de l'interface avec l'air. Ce champ normalisé

intervient directement dans les intégrales de recouvrement (équations H.9b et H.13b) apparaissant dans les éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction électrons-SPhP. Comme on peut le voir, aux faibles vecteurs d'onde q , ce champ normalisé tend vers 0 : les SPhP de faible vecteur d'onde interagissent ainsi très peu avec les électrons du puits. Ainsi, bien que les taux d'émission de SPhP soient proches des taux d'émission de phonons optiques (voir figure 5.22), le spectre des vecteurs d'onde des SPhP émis (figure 5.23) révèle que le

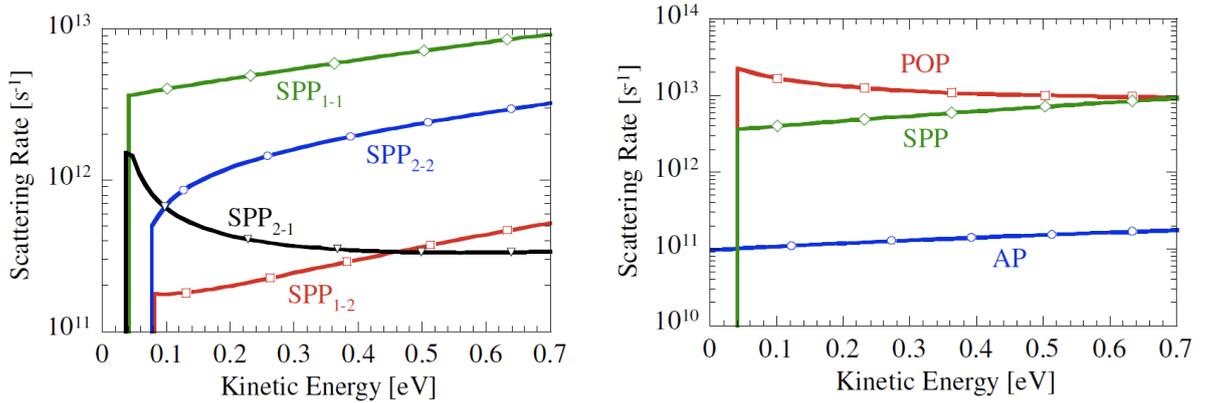


FIGURE 5.22 – Taux d'émission de phonons calculés par MAZZAMUTO et al. (2009). Gauche : taux d'émission de SPhP pour différentes transitions inter- et intrasousbandes (les sousbandes de départ et d'arrivée sont indiquées en indice sur le schéma). Droite : taux d'émission de phonons optiques (« POP »), acoustiques (« AP »), et de SPhP (pour les SPhP, par transitions intrasousbandes de la sousbande 1, transition de taux d'émission les plus élevés, voir figure de gauche). Les taux d'émission de SPhP représentés sur la figure de droite sont jusqu'à un ordre de grandeur inférieurs aux taux d'émission de phonons optiques. Images extraites de (MAZZAMUTO et al. 2009).

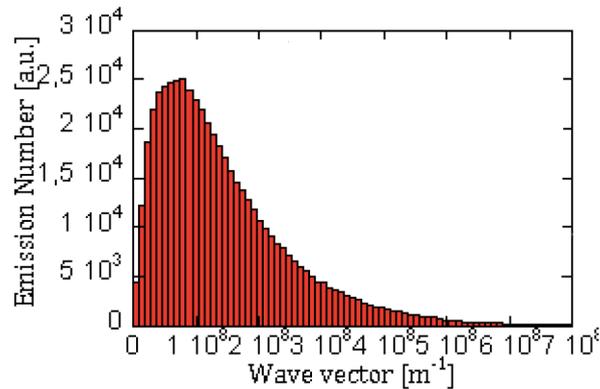


FIGURE 5.23 – Spectre des vecteurs d'onde des SPhP émis déterminé par MAZZAMUTO et al. (2009). Le spectre est maximal aux alentours de $100 \text{ rad}.\mu\text{m}^{-1}$, et est important de quelques dizaines à environ $300 \text{ rad}.\mu\text{m}^{-1}$. Image extraite de (MAZZAMUTO et al. 2009).

nombre de SPhP émis aux faibles vecteurs d'onde tend vers 0 également, minisant la probabilité d'émission de SPhP dont le vecteur d'onde les rend susceptibles d'être couplés au rayonnement. Deux facteurs contribuent

à minimiser l'émission de SPhP pouvant rayonner : la fraction relativement faible de SPhP susceptible de rayonner comparée à l'ensemble des SPhP (voir figure 5.15, partie 5.2.1), et la faiblesse du champ normalisé des SPhP susceptibles de rayonner (figure 5.21).

La structure étudiée dans les sections 5.1 et 5.2 de ce chapitre, s'appuyant sur un puits rectangulaire, présente l'avantage de lever la seconde limitation. Comme cela est représenté sur la figure 5.5 (partie 5.1.1.2), le champ du mode antisymétrique de l'intervalle de fréquences B est de plus en plus confiné dans le puits, où se situent les électrons. Ainsi, les SPhP de faible vecteur d'onde de cette branche interagissent fortement avec les électrons, comme le montre le calcul de taux d'interaction des modes individuels, figure 5.18.

5.3.2 Absorption résonante

Dans la partie 5.1.2, nous avons vu qu'une des branches de SPhP du puits GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As et de la structure *Lapsus* simplifiée a, à certains vecteurs d'onde, un champ très confiné dans le puits (sans être rigoureusement nul à l'extérieur de celui-ci – il s'agit de la branche antisymétrique de l'intervalle de fréquence « B », aux faibles vecteurs d'onde, voir figures 5.7 et H.2). Ce fort confinement peut s'expliquer par la faible valeur de la constante diélectrique de GaAs aux fréquences d'existence de ces SPhP, proches de la pulsation des phonons LO de GaAs, ω_{LO} .

Les propriétés des matériaux ayant une constante diélectrique proche de zéro ont déjà fait l'objet de quelques travaux. On parle de matériau (ou d'effet) « ENZ » pour *epsilon near zero*. Les propriétés des matériaux ENZ permettent de concevoir des guides d'ondes « parfaits » (SILVEIRINHA et ENGHETA 2006 ; EDWARDS et al. 2008). Ici, nous obtenons des modes très confinés dans un volume extrêmement sub-longueur d'onde (couche de GaAs d'environ 20 nm d'épaisseur à une longueur d'onde dans le vide d'environ 35 μm).

L'existence de ce mode, dont nous avons souligné le confinement dans le puits dans la partie 5.1.1.2 (illustré par la figure 5.5), permet d'abord d'obtenir un phénomène d'absorption résonante, qui peut dans un deuxième temps être exploité afin de réaliser un modulateur THz contrôlé électriquement, comme cela est représenté sur la figure 5.2.

La figure 5.24 donne le détail de la géométrie utilisée. Cette structure présente un substrat en GaAs dopé, séparé des couches du puits, des barrières, et du réseau en or, par un espaceur constitué d'une alternance de monocouches GaAs/AlAs (matériau choisi pour sa facilité de déposition, et de propriétés proches de celle de Al_{0,50}Ga_{0,50}As). Cette partie inférieure de la structure permet de former une cavité qui exalte le champ dans le puits, effet qui se superpose à l'effet ENZ décrit ci-dessus. La figure 5.25 (gauche) représente la réflectivité de la structure précédente (à une incidence de 45°). Le creux de réflectivité à $\lambda_0 = 34,34\mu\text{m}$ est attribuable aux effets ENZ et de cavité dont on vient de discuter. Le champ correspondant est représenté sur la figure 5.26, sur laquelle on peut voir l'exaltation de champ dans le puits. La figure 5.25 représente la fraction de puissance incidente absorbée dans le puits en fonction de l'angle d'incidence, à $\lambda_0 = 34,34\mu\text{m}$. Comme on peut le voir, jusqu'à 70% de celle-ci peut être absorbée dans le puits. (Cette valeur peut dépasser 80% avec un substrat plus réfléchissant.)

L'obtention par la suite d'un modulateur térahertz s'appuie sur une modulation de la densité d'électrons dans le puits, en polarisant ce dernier. On module alors leur contribution à l'absorption dans le puits via

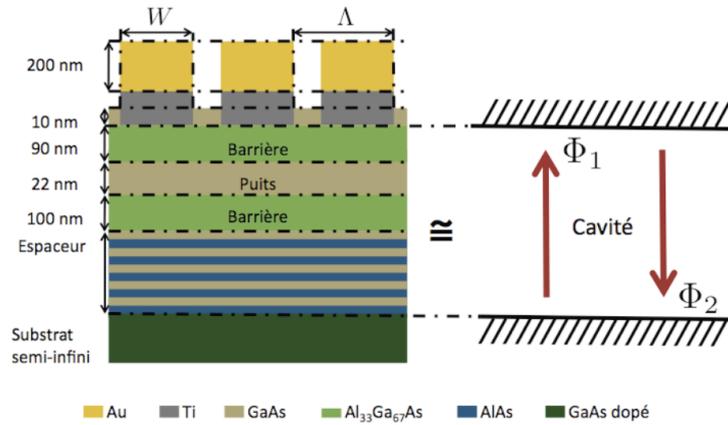


FIGURE 5.24 – Géométrie et matériaux utilisés dans la conception de la structure *Lapsus*. Figure extraite de (VASSANT 2011).

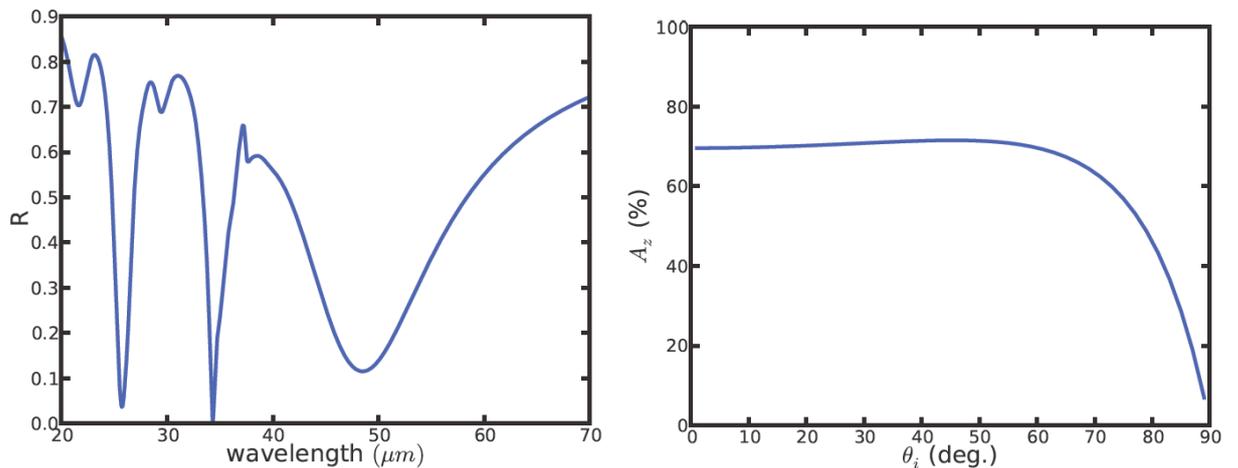


FIGURE 5.25 – Réflectivité (angle d'incidence : 45°) et fraction de la puissance incidente absorbée dans le puits à $\lambda_0 = 34,34 \mu\text{m}$. Figure extraite de (VASSANT 2011).

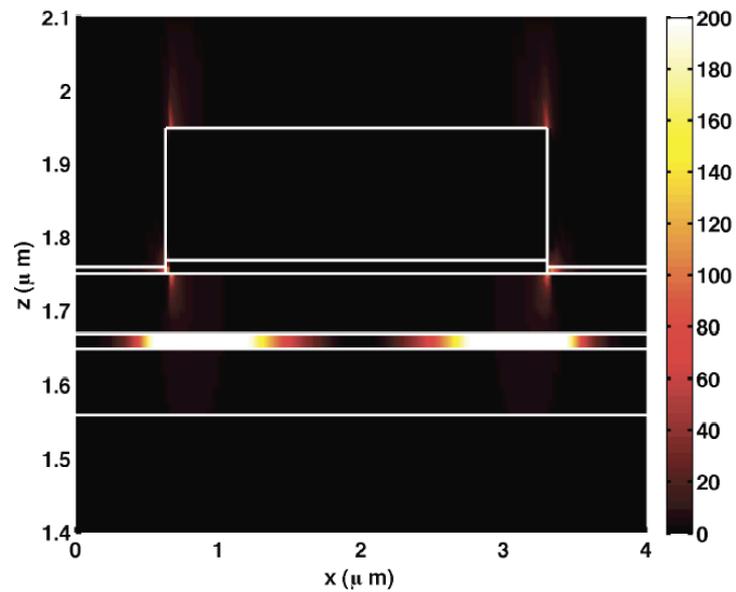


FIGURE 5.26 – Champ ($|E_z|^2$) dans la structure en incidence normale à $\lambda_0 = 34,34\mu\text{m}$. Les traits blancs représentent la géométrie de la structure. Le module du champ incident est 1. Figure extraite de (VASSANT 2011).

la partie imaginaire de sa constante diélectrique (contribution non prise en compte dans les calculs effectués dans ce chapitre), ce qui module l'efficacité de l'absorption résonante et la réflectivité de la structure, et permet d'obtenir un modulateur térahertz.