RÉPUBLIQUE ALGERIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ DE MEDEA

FACULTÉ DES SCIENCES



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de :

Master en Physique

Spécialité : Physique des matériaux

Par :

KARA Fethia
BELHOUT Louiza

Thème :

Etude de l'absorption linéaire et non linéaire dans une structure a puits quantique à base de AlGaAs/GaAs

---

Soutenu, le 14/07/2021, devant le jury composé de:

M. Dehbaoui	MCA	UYFM	Président
A. Boukaoud	MCA	UYFM	Examinateurs 1
D. Houatis	MCB	UYFM	Examinateurs 2
D. Sabbar	MCB	UYFM	Encadreur

Année universitaire : 2020 / 2021

Résumé

Dans ce thème, on a étudie les changements des coefficients d'absorption optique inter-sous-bandes des puits quantiques gradué à base de AlGaAs/GaAs sont étudiés théoriquement. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde d'enveloppe d'un électron confiné dans un quantum à potentiel fini les puits sont calculés dans le cadre d'approximation de la masse effective. Les expressions analytiques de coefficients d'absorption optique inter-sous-bandes sont obtenues en utilisant la compacte approche par matrice de densité. Les effets de l'intensité optique incidente et des paramètres de structure, tels que la largeur de la barrière, le potentiel de confinement et la largeur du puits, sur les propriétés optiques du double des puits quantiques en forme gradué sont étudiés. Les résultats numériques montrent que l'incident les paramètres d'intensité optique et de structure ont un effet important sur les caractéristiques optiques de ces structures.

Abstract

In this topic, we studied the changes of the inter-sub-band optical absorption coefficients of graduated quantum wells based on AlGaAs / GaAs are studied theoretically. The energy levels and the envelope wave functions of an electron confined in a finite potential quantum wells are calculated as part of the effective mass approximation. The analytical expressions of inter-subband optical absorption coefficients are obtained using the compact density matrix approach. The effects of incident optical intensity and structural parameters, such as barrier width, confinement potential and well width, on the optical properties of double quantum wells in graduated form are investigated. The numerical results show that the incident optical intensity and structure parameters have a significant effect on the optical characteristics of these structures.

الملخص

في هذا الموضوع، درسنا التغيرات في معاملات الامتصاص البصري بين النطاق الفرعي للآبار الكمية المتماثلة المدرجة بناءً على التي تمت دراستها نظريًا. يتم حساب مستويات الطاقة ووظائف الموجة المغلفة للإلكترون المحصور في آبار AlGaAs / GaAs كمية محدودة محتملة كجزء من تقريب الكتلة الفعال. يتم الحصول على التحيزات التطبيقية لمعاملات الامتصاص البصري بين النطاق الفرعي باستخدام نهج مصفوفة الكثافة المدمجة. تمت دراسة تأثير الشدة الضوئية للحادث والمعلمات الهيكلية ، مثل عرض الحاجز ، وإمكانات الحبس ، وعرض البئر ، على الخواص البصرية للآبار الكمومية المدرجة. أظهرت النتائج العددية أن الكثافة الضوئية للحوادث ومعلمات البنية لها تأثير معتوي على الخصائص البصرية لهذه الهيكلة

Remerciement

Tout d'abord, je remercie notre Dieu Allah, notre créateur de m'avoir donné la force, la volonté, la patience, l'espoir et le courage a fin d'accomplir ce travail modeste et je salue notre Prophète Mohammed que le Salut soit sur lui Je suis très reconnaissant tout en remerciant chaleureusement mon promoteur Dr. Djamel SABAR. Je le remercie pour sa gentillesse et sa disponibilité, j'ai eu le grand plaisir de travailler sous sa direction. Mes remerciements à tous les membres de jury qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leurs cautions, plus particulièrement Dr. M.Dehbaoui , Dr. A.Boukaoud et Dr. D.Houatis et aussi le remercie spécialement Dr. K.Bouchachia pour leur aide. Mes remerciements vont aussi a tous ceux qui ont contribue de prés ou de loin a la concrétisation de ce travail pour leurs conseils, leurs encouragements et leurs soutiens.

Dédicace

A fin d'être reconnaissant envers tous ceux qui me sont chers, je dédie ce travail à mes parents, ma mère pour ses encouragements et ses prières tout au long de mes études, mon père pour tout ce qu'il a fait pour que je puisse avoir ce résultat, a mon frères ainsi qu'à ma sœur tous pour leur complicité et aussi mon marrie pour leur aide. A tous ceux qui m'aime et que ma réussite leur tient à cœur.

Table des Matières

Introduction **10**

1 introduction à la mécanique quantique **11**

1.1 *Postulats de la mécanique quantique* 11

1.1.1 *Premiere postulat* 11

1.1.2 *Deusième postulat* 12

1.1.3 *Troisième postulat* 12

1.1.4 *Quatrième postulats* 12

1.1.5 *Cinquième postulat* 12

1.1.6 *Séxième postulat* 13

1.1.7 *Espace des états* 13

1.2 *L'équation de Schrödinger* 14

1.2.1 *L'équation de Schrödinger stationnaire* 15

1.2.2 *L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension* 16

1.2.3 *Hamiltonien* 16

1.3 Matrice densité 17

1.3.1 *Définition de l'opérateur densité* 17

1.3.2 *les poprities de l'opérateur densité* 18

2 Calculs théoriques de coefficient d'absorption **19**

2.1 *La matrice densité* 19

2.1.1 *Ensembles quantiques purs* 19

2.1.2 *Ensembles quantiques mixtes* 20

2.1.3 *Matrice de densité et temps de relaxation pour un système de deux niveaux* 22

2.1.4 *Équation de matrice de densité* 23

2.2 *Absorptions optiques linéaires et non linéaires des systèmes quantiques asymétriques* 27

2.2.1 *Absorptions optiques intersubband des linéaires et non linéaires d'un puits quantum a semi-conducteur à champ electrique appliqué* 28
2.2.2 *Absorption intersubband linéaire et non linéaire avec un champ électrique appliqué* 29
2.2.3 *Susceptibilité de la deuxième génération d'harmonique de formalisme de la matrice de densité* 31
2.3 *Méthode de shooting* 33

3 calculs numérique de coefficient d'absorption **37**
3.1 Résultats et discutions 39

Conclusion **47**

Introduction

Le progrès de la technologie de croissance épitaxiale pendant plusieurs années ont permis de préparer des différentes formes de semi-conducteurs tels que: puits quantiques carrés (PQC), puits quantiques paraboliques (PQP), puits quantiques en forme de V (PQV) et puits quantiques en forme de semi V (PQSV).

Les puits quantique de différents formes affichent un comportement trés important dans les dispositifs microélectroniques et optoélectroniques de sorte qu'ils affectent les propriétés électriques, mecaniques et optiques. Les propriétés optiques linéaires et non linéaires dans l'hétéro structures semi-conducteur peuvent être utilisées pour des applications pratiques dans les photo détecteurs et dispositifs électro-optiques à grande vitesse. L'absorption linéaire et non linéaire basées sur les transitions inter-sous-bandes (TISB) dans le semi-conducteur quantique de systèmes à faible dimensions ont été étudiés par des nombreux chercheurs ces dernières années [1], [2]. Karabulut et Baskoutas ont étudié les influences d'impuretés, champ électrique appliqué et intensité optique incidente sur les absorptions optiques linéaires et non linéaires dans des puits quantiques carrés [3]. Chen et coll. discuté de l'optique linéaire, non linéaire du troisième ordre et totale. Les effets du champ laser haute fréquence intense sur les coefficients d'absorption optique dans un puits quantique carré à base de AlGaAs/GaAs et sous le champ électrique statique ont été étudiés théoriquement. Les niveaux d'énergie des électrons et les fonctions d'onde d'enveloppe des puits quantiques carrés sont calculés dans l'approximation de la masse effective. Les expressions analytiques pour les propriétés optiques sont obtenues en utilisant l'approche de matrice de densité compacte. Comme les résultats numériques montrent que le champ laser haute fréquence intense a un effet important sur les caractéristiques optiques de ces structures. Les études sur ces systèmes offrent une large gamme des applications potentielles dans le développement de semi-conducteurs dispositifs optoélectroniques à conducteurs [4],[5]. Dans le chapitre1 on donne un entrée de la mécanique quantique et leur principes. Dans le chapitre 2, les fonctions propres et les énergies propres des états électroniques sont obtenues en utilisant la méthode des différences finies, et l'expression analytique pour les coefficients linéaire et non linéaires

est dérivée au moyen de l'approche de matrice de densité compacte et de la méthode de shooting. Dans le chapitre 3, les résultats numériques et les discussions sont présentés pour les PQs asymétriques et symétriques à potentiel gaussien avec champ électrique appliqué.

Chapitre 1

introduction à la mécanique quantique

La mécanique quantique est la science de la physique qui étudie les phénomènes fondamentaux dans les systèmes physiques et elle joue un rôle intéressant pour la description et la compréhension des phénomènes naturels à l'échelle atomique ou moléculaire. Historiquement on peut dire que la physique quantique voit ses premiers jours au début du vingtième siècle, lorsque Planck, proposa une formule simple en parfait accord avec les expériences sur le spectre du rayonnement du corps noir. Puis Einstein publie en 1905 son célèbre mémoire sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière. Dans ce chapitre, nous nous limitons à l'étude des notions de l'équation de Schrödinger stationnaire dans un potentiel central. Nous allons énoncer les postulats de base de la physique quantique.

1.1 *Postulats de la mécanique quantique*

Chaque théorie est basée sur un certain nombre de postulats qui doivent obéir à quelques règles, telles que la causalité, la conservation de l'énergie-impulsion d'un système isolé. C'est la confrontation à l'expérience qui permet de validation des résultats obtenus.

1.1.1 *Premiere postulat*

A un instant t_0 fixé, l'état d'un système physique isolé est défini par la donnée d'un vecteur t_0 appartenant à l'espace des états ε.

Il est essentiel ici de noter que, comme l'espace des états ε est un espace vectoriel, ce premier postulat implique un principe de superposition : i.e. une combinaison linéaire de vecteurs d'état est un vecteur d'état.

1.1.2 *Deusième postulat*

Description des grandeurs physiques

Toute grandeur physique mesurable A est décrite par un opérateur A agissant dans ε ; cet opérateur est connu par l'observable.

Remarque :

Contrairement à la mécanique classique, dans la mécanique quantique le vecteur décrit de façon fondamentalement les différentes états d'un système et leurs grandeurs physiques associées, donc un vecteur ou une grandeur physique sont représentés par des opérateurs (des matrices).

1.1.3 *Troisième postulat*

Mesure des grandeurs physiques

La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres de l'observable A correspondante.

Remarques:

(i) Une mesure de A donnera toujours une valeur réelle, puisque A est par définition hermitique.

(ii) Si le spectre de A est discret, les résultats que l'on peut obtenir en mesurant A sont quantifiés.

1.1.4 *Quatrième postulats*

(cas d'un spectre discret non dégénéré) Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état

normé, la probabilité $P(an)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée an de l'observable A correspondante est :

$P(an) = |\langle\varphi \mid \psi\rangle|^2$

où φ_n est le vecteur propre normé de A associé à la valeur propre an, et $\langle\varphi \mid \psi\rangle$ est le produit scalaire entre φ_n et ψ

1.1.5 *Cinquième postulat*

Si la mesure de la grandeur physique A sur le système dans l'état donne le résultat an, l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée

$$\frac{p_n\psi}{\sqrt{|\langle\psi \mid p_n \mid \psi\rangle|}} \tag{1.1}$$

de sur le sous-espace propre associé à an. On a noté $\langle\psi \mid p_n \mid \psi\rangle \ \langle\psi \mid (p_n\psi)\rangle$.

L'état du système aussi tôt après la mesure est donc toujours un vecteur propre de A de valeur propre an.

1.1.6 *Séxième postulat*

Evolution des systèmes dans le temps

L'évolution temporelle du vecteur d'état $\psi(t)$ est régie par l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = H(t)\psi(t) \tag{1.2}$$

où $H(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système.[6], [7]

Rapeles sur le formalisme de Dirac

Le formalisme de Dirac permet de construire un état quantique en l'absence de toute référence à une représentation. Cette construction repose essentiellement sur le principe de super-position. Elle généralise la mécanique des matrices et la mécanique ondulatoire et permet de décrire des systèmes qui sont différents à la conception de la mécanique classique classique.

1.1.7 *Espace des états*

L'éspace des kets:

Considérons un espace vectoriel ε sur le corps des complexes dont la dimension est spécifiée par la nature du système physique en question. Dans les expériences du type Stern et Gerlachoù le seul degré de liberté quantique est le spin, la dimension est déterminée par le nombre detrajectoires distinctes que les atomes d'argent . Il existe aussi des cas où le spectre est continu - par exemple, la position ou l'impulsion d'une partie et où le nombre de degrés de liberté est infini non-dénombrable, auquel cas d'espace vectoriel de Hilbert d'après D.Hilbert qui a étudié les espaces vectoriels de dimension infinie.En mécanique quantique suivant Dirac, nous représentons un tel état par un vecteur (ket) et le noterons $\mid \psi\rangle$. D'après le premier postulat, ce ket contient toute l'information sur l'état physique; tout ce que nous somme s'autorisés à demander à propos de cet état est contenu dans le ket.

Propriétés de l'espace des kets :

• si $\mid \psi\rangle \in \varepsilon$ et$\mid \phi\rangle \in \varepsilon$ alors$\mid \psi\rangle + \mid \phi\rangle = \mid \gamma\rangle \in \varepsilon$

• $c \mid \psi\rangle \in \varepsilon$ ($\forall\ c \in \mathbb{C}$),

• $c \mid \psi\rangle = \mid \psi\rangle\ c$.

L'espace des bras et le produit scalaire:

Nous introduisons maintenant l'espace des bras, un espace vectoriel "dual" à l'espace des kets.Nous postulons qu'à chaque ket conjugué $\mid \psi\rangle$ correspond un bra noté $\langle\psi \mid$ qui est dans l'espace des bras. L'espace des bras est engendré par des bras propres $\{\langle an \mid\}$ correspondant aux kets propres $\{\mid an\rangle\}$ d'un certain opérateur A . Il ya une correspondance un à un entre l'espace des kets et celuides bras.[8], [9]

La fonction d'onde:

Fonction d'onde Considérons une particule quantique qui se déplace sur une droite. Si l'on fait une mesure de la position de la particule, la densité de probabilité de trouver la particule à l'endroit aux temps test donné par le module au carré d'une amplitude de probabilité complexe $\psi(x,t)$.[10]

La fonction d'onde c'est un postulat quantique, qui décrit le mouvement des particules quantiques, et donne toutes les informations des états quantiques (par exemple un électron dans l'atome) .En générale la fonction d'onde dépend de l'espace et du temps $\psi(\overrightarrow{r},t)$.

La fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r},t)$ doit satisfaire les conditions suivantes:

* Elle doit être continue pour $\overrightarrow{r}$.

*La dérivée$\frac{\partial\psi}{\partial t}$ doit être continue, ces contraints sont appliquées sous condition de la limite sur les solutions.

*Elle doit être normalisée. Cela implique que la fonction d'onde en approche à zéro comme $\overrightarrow{r}$ approche à l'infinité c'est-à-dire :

$$\int \psi^{*}\psi d^{3}r = \int |\psi|^{2}\, d^{3}r = 1 \tag{1.3}$$

avec $|\psi(\overrightarrow{r},t)|^{2}$est la densité de probabilité.

1.2 *L'équation de Schrödinger*

L'équation de Schrödinger a été proposée de façon inductive par Erwin Schrödinger en 1925, c'est une équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste. Sa forme générale est une équation aux dérivées partielles du premier ordre par rapport au temps, et du second

ordre par rapport aux coordonnées de l'espace ordinaire, cette équation joue un rôle fondateur en mécanique quantique par analogue à l'équation de Newton en mécanique classique et les équations de Maxwell en électromagnétisme.

Il y a deux types de l'équation de Schrödinger : l'équation de Schrödinger indépendante du temps (stationnaire) et l'équation de Schrödinger dépendante du temps (non stationnaire). Dans cette partie, nous allons présenter la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.[11]

1.2.1 *L'équation de Schrödinger stationnaire*

En générale l'équation de Schrödinger d'un système quantique est donnée par: [12]

$$H\psi(\overrightarrow{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{1.4}$$

Les fonctions d'ondes ψ qui porte le nom des fonctions propres qui sont les solutions de l'équation 1.4 sont données par :

$$\psi = \psi_0 \exp(-\frac{iE}{\hbar}t) \tag{1.5}$$

où ψ_0 est l'amplitude .

Pour des états stationnaires (indépendant du temps), l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme suivantes :

$$H\psi(\overrightarrow{r}) = E\psi(\overrightarrow{r}) \tag{1.6}$$

où E est l'énergie totale du système qui porte le nom des valeurs propres ou les spectres d'énergies.

L'opérateur Hest un opérateur nommé Hamiltonien, c'est l'opérateur quantique pour l'énergie totale du système :

$$H = E_c + V(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \tag{1.7}$$

où Vest l'énergie potentielle, E_c est l'énergie cinétique et Δ est le laplacien.

1.2.2 *L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension*

Si une particule de masse m se déplaçant sur l'axe x, soumise à une potentiel $V(x)$, pour déterminer les niveaux d'énergie, et les fonctions d'ondes associées nous devrons résoudre l'équation de Schrödinger unidimensionnelle suivante:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{1.8}$$

où $-\infty < x < +\infty$.

Conditions à remplir par la fonction propre

Le nombre des particules présentes dans un volume élémentaire est également proportionnel à la probabilité de présence de ces particules dans ce volume. On considère le volume élémentaire dr^3 de l'espace, la probabilité "prob" de trouver la particule dans ce volume est définie par [13]

$$prob=\int_{\infty}|\psi(\overrightarrow{r})|\,d^3r \tag{1.9}$$

En particulier, si l'on effectue une intégration étendue à tout l'espace,on doit avoir :

$$\int_{\infty}|\psi(\overrightarrow{r})|\,d^3r=1 \tag{1.10}$$

Donc les fonctions d'ondes $\psi(\overrightarrow{r})$ doivent être de carré sommable.

1.2.3 *Hamiltonien*

L'opérateur différentiel qui apparaît dans le membre de droite de l'équation de Schrödinger s'appelle le Hamiltonien et s'écrit généralement par $\hat{H}$.

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\left(x\right). \tag{1.11}$$

Soit H l'espace des fonctions d'onde du systéme (ici systéme = particule). L'opérateur $\hat{H}$ est une application linéaire de H dans H^2 :

$$\hat{H}:H\rightarrow H;\hat{H}\left(a\psi_1+b\psi_2\right)=a\hat{H}\psi_1+b\hat{H}\psi_2\ \forall a,b\in\mathbb{C}. \tag{1.12}$$

Comme nous le verrons plus tard, $\hat{H}$ représente physiquement l'énergie, cinétique plus potentielle, de la particule. En termes de l'opérateur $\hat{H}$, l'équation de Schrödinger prend la

forme compacte:[14]

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(x,t\right)}{\partial t}=\hat{H}\psi\left(x,t\right). \tag{1.13}$$

1.3 Matrice densité

1.3.1 *Définition de l'opérateur densité*

En mécanique quantique, on sait qu'un système isolé, ou bien un système soumis à des contraintes extèieures fixes, qui ne sont pas affectées par l'évolution du systéme. La matrice de densité ou opérateur de densité est une représentation alternative de l'état d'un système quantique pour lequel nous avons précédemment utilisé la fonction d'onde. Bien que décrire un système quantique, on obtient des avantages pratiques significatifs en utilisant la matrice de densité pour certains problèmes dépendant du temps en particulier la relaxation et la spectroscopie non linéaire dans la phase condensée.

La matrice de densité est formellement définie comme le produit extérieur de la fonction d'onde et de son conjugué, en mécanique quantique , on considère un espace de Hilbert H. Les états quantiques du systeme sont caractérisés par des fonctions d'ondes $\psi \in H$ (des ket-vecteurs$|\ \psi\rangle$).[15]

Comme H est muni d'un produit scalaire $\langle .\mid .\rangle$, pour chaque ket-vecteur, il existe un bra-vecteur, élément du dual de H qu'on note $\langle\psi\mid$. Une observable $\hat{f}$ est un opérateur sur H et sa moyenne dans l'état $\mid\psi\rangle$ est donné par $\langle\hat{f}\rangle=\langle\psi\mid\hat{f}\mid\psi\rangle$.

Si on veut introduire une description statistique, on doit considérer un mélange statistique de différents états ψ_i.

Notons par p_i la probabilité de l'état ψ_i alors la moyenne (statistique et quantique de $\hat{f}$ devient:

$$p(t)\equiv|\ \psi(t)\rangle\langle\psi(t)\mid \tag{1.14}$$

Alors pourquoi aurions-nous besoin de la matrice de densité? C'est un outil pratique lorsqu'il s'agit d'états mixtes. Les états purs sont ceux qui sont caractérisés par une seule fonction d'onde. Les états mixtes font référence à des mélanges statistiques dans lesquels nous avons des informations imparfaites sur le système, pour lesquels je dois effectuer des moyennes statistiques afin de décrire des observables quantiques. Un état mixte désigne tout cas dans lequel on subdivise un système microscopique ou macroscopique en un ensemble, pour lequel il n'y a initialement aucune relation de phase entre les éléments du mélange. Les

exemples incluent un ensemble à l'équilibre thermique et des états préparés indépendamment.

1.3.2 *les poprities de l'opérateur densité*

1- $\hat{p}$ est hermitique: $\hat{p} = \hat{p}$

preuve

$$\hat{p} = (\sum_i p_i \mid \psi_i\rangle\langle\psi_i \mid) = \sum_i p_i^* \mid \psi_i\rangle\langle\psi_i \mid = \hat{p} \tag{1.15}$$

car p_i est réel.

2- $Tr\hat{p} = 1$.

preuve :

$$Tr\hat{p} = \sum_i p_i Tr \mid \psi_i\rangle\langle\psi_i \mid = \sum_i p_i = 1 \tag{1.16}$$

3-Toutes les valeurs propres de $\hat{p}$ se trouvent dans $[0, 1]$.

preuve :

$\hat{p}$ est hermitienne donc elle peut être diagonalisée dans une base orthonormée (car H est muni d'un produit scalaire) :[16]

$$\hat{p} = (\sum_k \lambda_k \mid \phi_k\rangle\langle\phi_k \mid \tag{1.17}$$

$$\lambda_k = \langle\phi_k \mid \hat{p} \mid \phi_k\rangle = \langle\phi_k \mid \sum_i p_i \mid \phi_k\rangle = \sum_i p_i \tag{1.18}$$

$|\langle\psi_i \mid \phi_k\rangle|^2 \geq 0$

et $Tr\hat{p} = \sum_k \lambda_k = 1$

$\Longrightarrow \lambda_k \in [0, 1]$.

notre travail dans ce chapitre tourner sur les débutants de mécanique quantique et leur principes qui changer le concept de la science de la physique etles lois qui dependente de cette science comme l'équation de shrodinger en générale, les postulats de la mécanique quantique et la matrice densité.

Chapitre 2

Calculs théoriques de coefficient d'absorption

Les formes analytiques des coefficients d'absorption optique inter-sous-bandes linéaire (premier ordre) et non-linéaire (troisième ordre) sont obtenus pour des systèmes de puits quantiques symétriques et asymétriques, en tenant compte de la relaxation intra-sous-bande. Sur la base de ce modèle, dans ce chapitre nous utiliserons le formalisme de matrice de densité pour calculer le coefficient d'absorption optique lié à une transition inter- sous-bande.

2.1 *La matrice densité*

Le formalisme de la matrice densité se présente comme un cadre très puissant et élégant qui intégré ces deux notions dans un description mathématique unique.

2.1.1 *Ensembles quantiques purs*

considérons un système quantique dans un état $\mid \psi(t)\rangle$ décrit par:

$$\mid \psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) \mid \psi_n\rangle \tag{2.1}$$

Nous tensions à connaitre la valeur moyenne d'un opérateur A. Suite à léquation

$$\hbar\omega = E_f - E_i = \hbar\omega_{fi} \tag{2.2}$$

cette valeur moyenne $\langle A\rangle$ peut etre écrit sur une base particulière $j \mid \psi_k\rangle$

$$\langle A\rangle = \sum A_{m,n} C_m^* (t)\, C_n (t) \tag{2.3}$$

ou est $A_{m,n}$ un élément de la matrice

$$A_{m,n} = \langle \psi_m \mid A \mid \psi_n \rangle \tag{2.4}$$

L'équation 2.3 est quelque peu tropeuse car elle semle suggérer qu'une base privilégiée, il existe un ensemble dans lequel effectue la décomposition. Si nous changeons cette base cependant le $A_{m,n}; C_m^* (t); C_n (t)$ les inscriptions changeront de manière quitter 2.3 invariant. Cet inconvénient est éliminé en introduisant la matrice de densité, dont les éléments sont:

$$\rho_{m,n} (t) = C_m^* (t)\, C_n (t) \tag{2.5}$$

En fait la matrice $\rho (t)$ peut s'écrit:

$$\rho (t) = \mid \psi (t)\rangle\langle \psi (t) \mid \tag{2.6}$$

Avec cette d'équation, Eq 2.3 devient:

$$\langle A\rangle = Tr (\rho A) \tag{2.7}$$

qui est indépendante de la base de décomposition $\rho (t) = \mid \psi (t)\rangle\langle \psi (t) \mid$ car sa trace est un opérateur linéaire. De plus, en utilisant l'équation 2.6, nous voyons immédiatement que l'évolution de $\rho (t)$ en tant que la fonction du temps est donnée par :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho (t) = [H (t), \rho (t)] = H (t)\, \rho (t) - \rho (t)\, H (t) \tag{2.8}$$

2.1.2 *Ensembles quantiques mixtes*

Nous considérons maintenant un système constitué d'un mélange d'états statistiquement distribués à la base $\{\mid \phi_i\rangle\}$ Ce système a une probabilité thermodynamique P_i d'être dans un état $\mid \phi_i\rangle$:

En négligeant les interférences quantiques entre les états thermodynamique, donc on définie la valeur moyenne de l'observable A comme :

$$\overline{\langle A\rangle} = \sum_i P_i \langle A\rangle \tag{2.9}$$

où un $\langle A\rangle_{\phi_\iota}$est la valeur moyenne de l'observable A lorsque le système est dans l'état $\mid \phi_i\rangle$.

Aprés Eq

$$\langle A\rangle = Tr\left(\rho A\right) \tag{2.10}$$

Cela peut s'écrire :

$$\overline{\langle A\rangle} = \sum_i P_i Tr\left(\rho_i A\right) = Tr\left(\overline{\rho} A\right) \tag{2.11}$$

Où ρ est la matrice densité de systéme mixte :

$$\overline{\rho} = \sum_i P_i \rho_\iota = \sum_i P_i \mid \phi_\iota\rangle\langle\phi_i \mid \tag{2.12}$$

Dans Eq 2.12 on voit l'avantage obtenu lorsque en introduisant la matrice de densité. Il est la dépendance linéaire de $\langle A\rangle$ sur la matrice de densité ρ qui permet l'introduction de la densité ou de l'opérateur de valeur moyenne $\overline{\rho}$.

Comme chaque matrice densité ρ permet d'évolution temporelle, 2.8 la matrice densité pour le systéme mixte par l'équation:

$$i\hbar \frac{d}{d\left(t\right)} \overline{\rho} = \left[H\left(t\right), \overline{\rho}\left(t\right)\right] \tag{2.13}$$

Les équations fondamentales de la matrice de densité sont 2.11 et 2.13 Dans la matrice de densité elle-même, nous pouvons distingué deux conceptionellement constituants.

Eléments diagonaux:

Des équations $2.5 - 2.12$ les termes diagonaux peuvent être exprimes dans le base d'état stationnaire comme:

$$\overline{\rho}_{kk} = \sum P_i \mid c_k^i \mid^2 . \tag{2.14}$$

Où c_k^i est le composant $\mid \phi^i\rangle$ dans le base$\mid \psi_k\rangle$ .Une interprétation physique immédiate des termes diagonaux dans qu'ils représentent la probabilité de trouver le système, à l'état stationnaire $\mid \psi_k\rangle$. Par conséquent ρ_{kk} représente la population de l'état $\mid \psi_k\rangle$.

Comme ces éléments résultent de la sommation de termes positifs, ils peuvent ne pas être zéro sauf si la valeur de chacun de ces termes est zéro (c'est-à-dire que l'occupation de chacun l'état est nul)

Eléments hors diagonal:

La signification de ces termes est un peu plus difficile à comprendre. Elles sont parfois appelés les éléments de cohérence ils décrivent le comportement quantique de système.

2.1.3 *Matrice de densité et temps de relaxation pour un système de deux niveaux*

Nous considérons un système à deux niveaux avec un Hamiltonien H_0, des énergies propres E_1 et $E_2, \mid 1\rangle$ et$\mid 2\rangle$ (c.-à-d $H_0 \mid i\rangle = E_i \mid i\rangle$) . La Hamiltonien H_0 s'écrit par:

$$H_0 = \begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix} \tag{2.15}$$

Nous soumettons ce système au temps $t = t'_0$ à une perturbation sinusoïdale $W(t)$ qui peut s'exprimer sur la base de $\mid 1\rangle$ et $\mid 2\rangle$ comme:

$$W = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \cos \omega\tau \tag{2.16}$$

ou $m_{ij} = \langle i \mid W \mid j\rangle$. On peut supposer par symétrie, que les éléments m_{12} et m_{22} sont nuls, et que les termes m_{12} et m_{22} sont réels et donc égaux.

L'équation 2.13 s'écrivent alors:

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -i\frac{m_{12}}{\hbar}(\rho_{21} - \rho_{12}) \cos \omega t$$

$$\frac{d}{dt}(\rho_{11} + \rho_{22}) = 0 \tag{2.17}$$

$$\frac{d\rho_{21}}{dt} = -i\omega_{21}\rho_{21} + i\frac{m_{12}}{\hbar}(\rho_{22} - \rho_{11}) \cos \omega t$$

La deuxième équation de 2.17 indique que la population totale est conservée (C.-à-d $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$). Nous pouvons

enquêter sur le transitoire comportement du système .Par exemple, il est clair que les termes de $\cos \omega t$ agira pour entraîner le système cesse(C.-à-d en supposant que nous mettions m_{12} zéro) les termes diagonaux resteront constants et les termes hors diagonale continueront d'osciller avec la fréquence ω_{21}.

Intuitivement, on peut s'attendre à ce qu'une fois l'excitation arrêtée, les populations ρ_{ii} étendent vers leurs niveaux d'équilibre thermodynamique $\rho_{ii}^{\varepsilon q}$ avec un certain temps constante est souvent référée comme le temps de relaxation diagonale ou la durée de vie de la population, est écrit comme T_i .Dans le de la même manière,on s'attend à ce que les éléments hors diagonale perdent de la cohérence avec un temps Γ_{ij}^{-1} constante de ou T_2 si ce temps est indépendant de ij^3. l'ntroduction de différents temps de relaxations, les équations de la matrice de densité deviennent :[17], [18]

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -i\frac{m_{12}}{\hbar}\left(\rho_{21} - \rho_{12}\right)\cos\omega t - \frac{\rho_{11} - \rho_{11}^{\varepsilon q}}{T_1}$$

$$\frac{d\rho_{22}}{dt} = -i\frac{m_{12}}{\hbar}\left(\rho_{21} - \rho_{12}\right)\cos\omega t - \frac{\rho_{22} - \rho_{22}^{\varepsilon q}}{T_1} \tag{2.18}$$

$$\frac{d\rho 21}{dt} = -i\omega_{21}\rho_{21} + i\frac{m_{12}}{\hbar}\left(\rho_{22} - \rho_{11}\right)\cos\omega t - \frac{\rho_{21}}{T_2}$$

où

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -i\frac{m_{12}}{\hbar}\left(\rho_{21} - \rho_{12}\right)\cos\omega t - \Gamma_1\left(\rho_{11} - \rho_{11}^{eq}\right)$$

$$\frac{d\rho_{22}}{dt} = i\frac{m_{12}}{\hbar}\left(\rho_{21} - \rho_{12}\right)\cos\omega t - \Gamma_1\left(\rho_{22} - \rho_{22}^{eq}\right) \tag{2.19}$$

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = -i\left(\omega_{21} - i\Gamma_{12}\right)\rho_{21} + i\frac{m_{12}}{\hbar}\left(\rho_{21} - \rho_{12}\right)\cos\omega t$$

2.1.4 *Équation de matrice de densité*

On concidère un puits quantique asymétrique en présence d'un rayonnement optique de fréquence angulaire ω avec la polarisation selon la direction du puits z. Les cas de polarisation arbitraire introduiront un facteur supplémentaire $\cos\theta$ dans l'élément de matrice ou θ est l'angle entre l'axe z et la direction de polarisation. [19]

Pour les transition inter-sous- bandes, soit ρ la matrice de densité électronique unique pour ce système, H_0 l'hamiltonien non perturbé pour ce système avec une énergie potentielle asymétrique, M un opérateur dipolaire et $E\left(t\right)$ l'intensité du champ électrique du rayonnement optique de fréquence ω. Puisque nous considérons un système de puits quantique asymétrique, l'opérateur dipolaire peut avoir des éléments diagonaux non galvanisants, ce qui est différent

du système symétrique qui n'a que des éléments hors diagonale [20]. L'équation du matrice de densité à un électron avec relaxation intrabande devient [21]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H_0 - ME\left(t\right), \rho] - \frac{1}{2}[\Gamma(\rho - \rho^{(0)}) + (\rho - \rho^{(0)})\Gamma \tag{2.20}$$

où [,] est le commutateur mécanique quantique, h est la constante de Planck divisée par 2π, $\rho^{(0)}$ est la matrice de densité non perturbée, et r est l'opérateur phénoménologique responsable de l'endommagement dû à l'interaction électron-phonon, aux collision entre électrons. On suppose que Γ est une matrice diagonale et que son élément γ_{mm} est l'inverse du temps de relaxation pour l'état $\mid m\rangle$ [20]. Pour simplifier, nous limiterons notre attention aux systèmes à deux niveaux uniquement. Nous avons introduit deux notations abrégées $\mid a\rangle$ et $\mid b\rangle$, telles que

$$\mid a\rangle = \mid 1, \overrightarrow{k_t}\rangle \text{ et } \mid b\rangle = \mid 2, \overrightarrow{k_{t'}}\rangle \tag{2.21}$$

où $\overrightarrow{k_t}$ et $\overrightarrow{k_{t'}}$ sont les vecteurs d'onde de l'électron dans le plan xy, et 1 et 2 désignent les composants z quantifiées en taille de l'impulsion pour les états initial et final, respectivement. H_0 est diagonale en $\mid a\rangle$ et $\mid b\rangle$ avec les énergies E_a et E_b, respectivement.

Le champ incident monochromatique est défini comme

$$E\left(t\right) = \mathrm{Re}\left(E^0 e^{-i\omega t}\right) = \frac{1}{2}E^0 e^{-i\omega t} + \frac{1}{2}E^{0^*} e^{i\omega t} \tag{2.22}$$

$$= Ee^{-i\omega t} + E^* e^{-i\omega t}$$

les éléments diagonaux de l'opérateur Γ sont :

$$\langle b \mid \Gamma \mid b\rangle = 1/\tau_b, \text{et } \langle a \mid \Gamma \mid a\rangle = 1/\tau_a \tag{2.23}$$

où $\tau_a$et $\tau_b$sont les temps de relaxation pour les états $\mid a\rangle$ et $\mid b\rangle$, respectivement.

Nous résolvons (1) de maniére perturbative en développant ρ en puissance de n comme

$$\rho = \sum_n \rho^{(n)} \tag{2.24}$$

avec la matrice de densité non perurbée $\rho^{(0)}$supposée n'avoir que des termes diagonaux [20]. Soit $\rho_{aa}^{(n)} = \langle a \mid \rho^{(n)} \mid a\rangle$, $\rho_{ab}^{(n)} = \langle a \mid \rho^{(n)} \mid b\rangle$, $\rho_{ba}^{(n)} = \langle b \mid \rho^{(n)} \mid a\rangle$, et $\rho_{bb}^{(n)} = \langle b \mid \rho^{(n)} \mid b\rangle$,

Alors, ρ a la propriété de symétrie que $\rho_{ab}(t) = \rho^*_{ba}(t)$. Nous obtenons qutre équations pour chaque élément de la matrice de densité à partir de 2.20 et 2.24. En utilisant $2.20 - 2.24$, nous obtenons les $(n+1)$émes termes de perturbation pour $n \geqslant 0$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ba}^{(n+1)} = \left\{ \frac{1}{i\hbar}(E_b - E_a) - \gamma_{ab} \right\} \rho_{ba}^{(n+1)}$$

$$-\frac{1}{i\hbar}\left(\rho_{aa}^{(n)} - \rho_{bb}^{(n)}\right) M_{ba} E(t)$$

$$-\frac{1}{i\hbar}(M_{bb} - M_{aa}) E(t) \rho_{ba}^{(n)}, \tag{2.25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{ab}^{(n+1)} = \left\{ \frac{1}{i\hbar}(E_a - E_b) - \gamma_{ba} \right\} \rho_{ab}^{(n+1)}$$

$$-\frac{1}{i\hbar}\left(\rho_{bb}^{(n)} - \rho_{aa}^{(n)}\right) M_{ab} E(t)$$

$$-\frac{1}{i\hbar}(M_{aa} - M_{bb}) E(t) \rho_{ab}^{(n)} \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial \rho_{bb}^{(n+1)}}{\partial t} = -\gamma_{bb}\rho_{bb}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar}\left(M_{ba}\rho_{ab}^{(n)} - M_{ab}\rho_{ba}^{(n)}\right) E(t) \tag{2.27}$$

$$\frac{\partial \rho_{aa}^{(n+1)}}{\partial t} = -\gamma_{aa}\rho_{aa}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar}\left(M_{ab}\rho_{ba}^{(n)} - M_{ba}\rho_{ab}^{(n)}\right) E(t) \tag{2.28}$$

où $M_{aa} = \langle a \mid M \mid a \rangle$, $M_{ab} = \langle a \mid M \mid b \rangle$,

$M_{ba} = \langle b \mid M \mid a \rangle$, $M_{bb} = \langle b \mid M \mid b \rangle$,

$\gamma_{aa} = \frac{1}{\tau_a}$, $\gamma_{bb} = \frac{1}{\tau_b}$, et $\gamma_{ab} = \gamma_{ba} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tau_a} + \frac{1}{\tau_b}\right)$. Les équation $2.21 - 2.25$ sont facilement résolues en développant les éléments de la matrice de densité sous forme de sommes des termes proportionnels à $\exp(\pm i\omega t)$ et en assimilant les termes des deux côtés la même dépendance temporelle. Nous négligerons les termes harmoniques supérieurs qui correspondent à l'absorption ou l'émission successive de photons et nous ne considérons que la réponse en régime permanent. Sous ces hypothèses, le terme de perturbation d'ordre $\rho^{(n)}(t)$ peut être écrit comme

$$\rho^{(n)}(t) = \rho^{(n)}(\omega) e^{-i\omega t} + \rho^{(n)}(-\omega) e^{i\omega t} \tag{2.29}$$

Pour n impair. Lorsque n est pair, seulement en utilisant 2.17 , $2.21 - 2.26$, et en négligeant les termes hors résonance, nous obtenons $\rho_{ba}^{(1)}(\omega)$ et $\rho_{ba}^{(3)}(\omega)$ après quelques manipulation

mathématiques en obtient :

$$\rho_{ba}^{(1)}(\omega) = \frac{EM_{ba}\left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right)}{\hbar\left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)} \tag{2.30}$$

$$\rho_{ba}^{(3)}(\omega) = \frac{-E|E|^2 M_{ba}\left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right)}{\hbar^3\left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)}$$

$$\times\left[\frac{2\left(\left(1/\gamma_{aa}\right) + \left(1/\gamma_{bb}\right)\right)|M_{ba}|^2\gamma_{ab}}{\left(W_{ba} - \omega\right)^2 + \gamma_{ab}^2} - \frac{\left(M_{bb} - M_{aa}\right)^2}{\left(W_{ba} - i\gamma_{ab}\right)\left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)}\right] \tag{2.31}$$

$$\rho_{bb}^{(3)} = \frac{2iE|E|^2|M_{ba}|^2}{\hbar^3\left(\omega + i\gamma_{bb}\right)}\,\mathrm{Im}\left[\frac{\left(M_{bb} - M_{aa}\right)\left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right)}{\left(W_{ba} - i\gamma_{ab}\right)\left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)}\right] \tag{2.32}$$

et

$$\rho_{aa}^{(3)} = \frac{2iE|E|^2|M_{ab}|^2}{\hbar^3\left(\omega + i\gamma_{aa}\right)}\,\mathrm{Im}\left[\frac{\left(M_{bb} - M_{aa}\right)\left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right)}{\left(W_{ba} - i\gamma_{ab}\right)\left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)}\right] \tag{2.33}$$

Où $W_{ba} = \left(E_b - E_a\right)/\hbar$, et Im désigne la partie imaginaire. Cependant, les contributions de $\rho_{aa}^{(3)}(\omega)$ et $\rho_{bb}^{(3)}(\omega)$ à $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ s'avèrent plus tard négligeables. Les éléments diagonaux de la matrice de densité non perturbée $\rho^{(0)}$ sont les occupations des états d'équilibre déterminées par le niveau de Fermi. On peut donc représenter $\rho_{aa}^{(0)}$ et $\rho_{bb}^{(0)}$ par les fonctions de distribution de Fermi-Dirac f_a et f_b, respectivement:

$$\rho_{aa}^{(0)} = f_a$$

$$= \frac{1}{1 + \exp\left[\left(E_a - E_F\right)/k_BT\right]} \tag{2.34}$$

et

$$\rho_{bb}^{(0)} = f_b$$

$$= \frac{1}{1 + \exp\left[\left(E_a - E_F\right)/k_BT\right]} \tag{2.35}$$

où E_F est le niveau de Fermi du système, T est la température et k_B est la constante de Boltzmann.

2.2 *Absorptions optiques linéaires et non linéaires des systèmes quantiques asymétriques*

La polarisation électronique $p(t)$ et la susceptibilité $\chi(t)$ provoquées par le champ optique $E(t)$ peuvent être exprimées par l'opérateur dipôle M et la matrice de densité comme

$$P(t) = \epsilon_0 \chi(\omega) E e^{-i\omega t} + \epsilon_0 \chi(-\omega) E^* e^{i\omega t}$$

$$= \frac{1}{V} Tr(\rho M) \tag{2.36}$$

Où V est le volume du système, ϵ est la permittivité de l'espace libre et Tr désigne la trace ou la sommation sur les éléments diagonaux de la matrice ρM. La susceptibilité χ est liée au coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ par

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \operatorname{Im}(\epsilon_0 \chi(\omega)) \tag{2.37}$$

Où μ est la perméabilité du système. A partir de $2.12, 2.13, 2.15$ et 2.16, nous obtenons respectivement les coefficients d'absorption linéaire du première ordre et du troisième ordre a $\alpha^{(1)}(\omega)$ et $\alpha^{(3)}(\omega, I)$.

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \frac{2}{V} \sum_{\overrightarrow{k_t}} \sum_{\overrightarrow{k_{t'}}} |M_{ba}|^2$$

$$\times \frac{\left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right) \hbar \gamma_{ab}}{\left(E_b - E_a - \hbar\omega\right)^2 + \left(\hbar \gamma_{ab}\right)^2} \tag{2.38}$$

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \operatorname{Im} \times \left\{ \frac{2}{V} \sum_{\overrightarrow{k_t}} \sum_{\overrightarrow{k_{t'}}} \frac{|E|^2 |M_{ba}|^2 \left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right)}{\hbar^3 \left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)} \right.$$

$$\left. \times \left[\frac{\left(M_{bb} - M_{aa}\right)^2}{\left(W_{ba} - i\gamma_{ab}\right)\left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)} \right] \right\} \tag{2.39}$$

$$= -\frac{\omega \mu I}{2\epsilon_R} \operatorname{Im} \left\{ \frac{2}{V} \sum_{\overrightarrow{k_t}} \sum_{\overrightarrow{k_{t'}}} \cdot \frac{|M_{ba}|^2 \left(\rho_{aa}^{(0)} - \rho_{bb}^{(0)}\right)}{\hbar^3 \left(W_{ba} - \omega - i\gamma_{ab}\right)} \right.$$

$$\times \left[\frac{2\gamma_{ab}\left(\gamma_{aa}+\gamma_{bb}\right)\left|M_{ab}\right|^2}{\gamma_{aa}\gamma_{bb}\left\{\left(W_{ba}-\omega\right)^2+\gamma_{ab}^2\right\}} - \frac{\left|M_{bb}-M_{aa}\right|^2}{\left(W_{ba}-i\gamma_{ab}\right)\left(W_{ba}-\omega-i\gamma_{ab}\right)} \right] \Bigg\} \tag{2.40}$$

où I est l'intensité optique exprimé en (W/cm^2), n_r est l'indice de réfraction $(\epsilon_R = n_r^2\epsilon_0)$, c est la vitesse de la lumière dans l'espace libre, et nous avons négligé les termes hors résonance en l'équation 2.19. Un facteur de 2 a été ajouté dans l'équation 2.17 pour l'orthogonalité de spin entre les états initial et final.

2.2.1 *Absorptions optiques intersubband des linéaires et non linéaires d'un puits quantum a semi-conducteur à champ electrique appliqué*

Moment dipolaire:

On considére ici un puits quantique infini de largeur L en présence d'un champ électrique F constant le long z de la direction positive du puits nous choisissons l'origine pour être au centre du puits. Dans l'approximation électronique indépendants, les fonction d'onde pour l'état initial ψ_a et l'état final ψ_b dans la bande de conduction peuvent s'écrire [22]

$$\psi_a\left(\overrightarrow{r}\right) = \left\langle \overrightarrow{r} \mid a \right\rangle$$

$$= A^{-1/2} U_c\left(\overrightarrow{r}\right) \exp\left(i\overrightarrow{k_t}\cdot\overrightarrow{r_t}\right)\phi_1(z), |z| < L/2 \tag{2.41}$$

$$\psi_b\left(\overrightarrow{r}\right) = \left\langle \overrightarrow{r} \mid b \right\rangle$$

$$= A^{-1/2} U_c'\left(\overrightarrow{r}\right) \exp\left(i\overrightarrow{k_t}\cdot\overrightarrow{r_t}\right)\phi_2(z), |z| < L/2 \tag{2.42}$$

où A est l'aire de la section transversale du puits, $\overrightarrow{r_t}$ est le vecteur de position dans le plan xy, et U_c et$U_c{}'$ sont les fonction périodiques dans l'extrémité de la bande de conduction. Dans l'approximation de masse effective, les fonctions d'enveloppe $\phi_1$et ϕ_2 satisfont l'équation de Schrödinger suivante [19], [23], [24]

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}\phi(z) + |e|Fz\phi(z) = E\phi(z), |z| < L/2 \tag{2.43}$$

et sont donnés par la combinaison linéaire de deux fonctions Airy indépendantes $Ai(\eta)$

et $Bi(\eta)$, où η est défini par

$$\eta = -\left[\frac{2m^*}{(e\hbar F)^2}\right]^{1/3}(E - |e|Fz). \tag{2.44}$$

Dans 2.21 et 2.22, m^* et e désignent respectivement la masse effective et la charge de l'électron. Pour les transitions inter-sous-bandes, seuls les champ optiques se propageant le long du puits avec polarisation le long de la direction du puits z ont des éléments matriciels non nuls [19].Les éléments de la matrice dipolaire peuvent être approximés par [25]

$$M_{ba} = \langle b \mid |e| z \mid a \rangle$$

$$\cong \int_{-L/2}^{L/2} \phi_2^*(z) |e| z \ \phi_1(z) \ dz \ \delta_{\vec{k}_t \vec{k}_{t'}}, \tag{2.45}$$

$$M_{bb} = \langle b \mid |e| z \mid b \rangle$$

$$\cong \int_{-L/2}^{L/2} \phi_2^*(z) |e| z \ \phi_2(z) \ dz \ \delta_{\vec{k}_t \vec{k}_{t'}}, \tag{2.46}$$

et

$$M_{aa} = \langle a \mid |e| z \mid a \rangle$$

$$\cong \int_{-L/2}^{L/2} \phi_1^*(z) |e| z \ \phi_1(z) \ dz \ \delta_{\vec{k}_t \vec{k}_{t'}}, \tag{2.47}$$

si la polarisation du champ électrique fait un angle θ avec l'axe z, un facteur constant supplémentaire $\cos\theta$ devraitθ apparaître dans $[2.23 - 2.25]$.

2.2.2 *Absorption intersubband linéaire et non linéaire avec un champ électrique appliqué*

Nous considérons transition intersubband optique d'un puits quantique GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$. Pour simplifier, nous supposons que $\tau_a = \tau_b = \tau_{in}$, le temps de relaxation intra-sous-bande. À partir de $2.14, 2.17$ et 2.23,nous obtenons le coefficient d'absorption linéaire a $\alpha^{(1)}(\omega)$,

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega\sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} |M_{21}|^2 \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}_t} \frac{(f_a - f_b)(\hbar/\tau_{in})}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \tag{2.48}$$

où M_{21} est donné par

$$M_{21} = \int_{-L/2}^{+L/2} \phi_2^* (z) \, |e| \, z \, \phi_1 (z) \; dz. \tag{2.49}$$

Nous supposons également que τ_{in} est une constante. L'intégration bidimensionnelle dans [2.26] peut se faire facilement, on obtient :

$$\frac{2}{V} \sum_{\overrightarrow{k}_t} (f_a - f_b) = \frac{m^* K_B T}{L \pi \hbar^2} \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left[(E_F - E_1) / K_B T \right]}{1 + \exp \left[(E_F - E_2) / K_B T \right]} \right\}, \tag{2.50}$$

et

$$\alpha^{(1)} (\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \, |M_{21}|^2 \left(\frac{m^* K_B T}{L \pi \hbar^2} \right) \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left[(E_F - E_1) / K_B T \right]}{1 + \exp \left[(E_F - E_2) / K_B T \right]} \right\}$$

$$\times \frac{\hbar / \tau_{in}}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2}. \tag{2.51}$$

Le résultat ci-dessus pour le coefficient d'absorption linéaire a été également dérivé en utilisant la régle d'or de Fermi [19]. On peut facilement voire que le coefficient d'absorption maximal se produit à $\hbar\omega = E_2 - E_1$, à partir de l'équation 2.29. Puisque $E_2 - E_1$ augmente avec un champ électrique appliqué l'énergie Le pick d'absorption est également décalée plus haut. L'amplitude du coefficient d'absorption optique de pointe dépend:

1) de l'élément de matrice dipolaire $|M_{21}|$, qui diminue légèrement avec le champ électrique.

2) du facteur de largeur de ligne $\hbar / \tau_{in}$, qui est supposé constante ici. En fait, la largeur de ligne peut être élargie par le champ électrique, comme cela sera discuté plus loin. Nous calculons maintenant le coefficient d'absorption inter-sous-bande non linéaire du troisième ordre $\alpha^{(3)} (\omega, I)$ où I l'intensité optique. En utilisant $2.19, 2.23 - 2.25$ et 2.28,nous obtenons $\alpha^{(3)} (\omega, I)$

$$\alpha^{(3)} (\omega, I) = -\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \left(\frac{I}{2 \epsilon_0 n_r c} \right) \frac{m^* K_B T}{L \pi \hbar^2} \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left[(E_F - E_1) / K_B T \right]}{1 + \exp \left[(E_F - E_2) / K_B T \right]} \right\}$$

$$\times \frac{|M_{21}|^2 \, \hbar / \tau_{in}}{\left[(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2 \right]^2}$$

$$\times \left[4 |M_{21}|^2 - \frac{|M_{22} - M_{11}|^2 \left\{ (E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 - (\hbar / \tau_{in})^2 + 2 (E_2 - E_1) (E_2 - E_1 - \hbar\omega) \right\}}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} \right] \tag{2.52}$$

où M_{11}et M_{22} sont définis respectivement par :

$$M_{11} = \int_{-L/2}^{L/2} |e|\, z\, |\phi_1(z)|^2 \; dz \tag{2.53}$$

et

$$M_{22} = \int_{-L/2}^{L/2} |e|\, z\, |\phi_2(z)|^2 \; dz. \tag{2.54}$$

Ainsi, les effets du champ électrique statique appliqué F sur l'absorption optique non linéaire, similaires au coefficient d'absorption linéaire, comprennent

1) l'élément de matrice $|M_{21}|$ diminue légèrement avec F,

2) le pic d'absorption en $E_2 - E_1$, augmente avec F grossièrement, et

3) les termes diagonaux M_{22} et M_{11} ne sont pas nuls lorsque $F \neq 0$. Nous revenons maintenant au coefficient d'absorption total a $\alpha(\omega, I)$ de la transition inter-sous-bande. À partir de 2.29 et 2.30, le coefficient d'absorption total a $\alpha(\omega, I)$ est donné par

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I). \tag{2.55}$$

Note que lorsque $F = 0$, les éléments diagonaux M_{11}et M_{22} deviennent nuls en raison de la propriété de symétrie et $\alpha(\omega, I)$

2.2.3 *Susceptibilité de la deuxième génération d'harmonique de formalisme de la matrice de densité*

Ici, nous présentons un formalisme compact pour la dérivation des non-linéarités du second ordre dans les puits quantiques asymétriques. La formule de la génération du second harmonique est déduite en système à 2 et 3 niveaux .On applique sur ce système un champ éléctrique intense ce la forme suivante:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t) = \breve{E}(t)\, e^{i\omega t} + \breve{E}^*(t)\, e^{-i\omega t}.$$

l'évolution de la matrice de densité est donnée par la différence en fonction du temps équation initiale, [26], [27], [28]

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[H_0 - qzE(t), \rho\right]_{ij} - \Gamma_{ij} - \left(\rho - \rho^0\right)_{ij}. \tag{2.56}$$

H_0 est l'hamiltonien du système en l'absence champ d'électromagnétique, q est la charge électronique, Γ_{ij} est la relaxation rate, et $\rho(0)$ est la matrice de densité non perturbée, avec i et j désignant l'indice de la matrice. Pour simplifier, nous supposons dans le suivant une

seule valeur du temps de relaxation [29] $\Gamma_{ij} = \Gamma_0$. L'equation 2.1 peut être résolue en utilisant la méthode itérative, [27], [28]

$$\rho(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho^{(n)}(t), \tag{2.57}$$

avec

$$\frac{\partial \rho_{ij}^{n+1}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left\{\left[H_0, \rho^{n+1}\right]_{ij} - i\hbar\Gamma_{ij}\rho_{ij}^{n+1}\right\} - \frac{1}{i\hbar}\left[qz, \rho^{(n)}\right]_{ij} E(t).$$

il faut noté que

$$\left[H_0, \rho^{n+1}\right]_{ij} = \hbar\omega_{ij}\rho_{ij}^{(n+1)},$$

$$\frac{\partial \rho_{ij}^{n+1}}{\partial t} = i(n+1)\omega\rho_{ij}^{n+1}, \tag{2.58}$$

et

$$[z, \rho^n]_{ij} = \sum_{k=0}^{\infty} z_{ik}\rho_{kj}^n - \sum_{k=0}^{\infty} z_{kj}\rho_{ik}^n,$$

où ω_{lm} est la fréquence de transition entre le l th et le m th sous-bandes, $z_{lm} = \langle l|z|m\rangle$ est l'élément de matrice dipôle, et ω est la fréquence des photons incidents. Remplacer Eq 2.3 dans l'Eq 2.2, l'évolution de la densité matrice à $(n+1)$ ordre peut être écrit comme:

$$\rho_{ij}^{n+1} = \frac{\frac{qE(t)}{\hbar}}{(n+1)\omega + \omega_{ij} - i\Gamma_{ij}}\left\{\sum_{k=0}^{\infty} z_{kj}\rho_{ik}^n\right\}. \tag{2.59}$$

L'application de l'Eq. 2.4 conduit à

(i) Premier ordre $(n = 0)$

$$\rho_{ij}^{(1)} = \frac{\frac{qE(t)}{\hbar} z_{ij}\left(\rho_j - \rho_i\right)}{\omega + \omega_{ij} - i\Gamma_{ij}}, \tag{2.60}$$

où $\rho_{lm}^0 = \rho_l\gamma_{lm}$.

(ii) Deuxième ordre $(n = 1)$

$$\rho_{ij}^{(2)} = \frac{\frac{qE(t)}{\hbar}}{2\omega + \omega_{ij} - i\Gamma_{ij}}\left\{\sum_{k=0}^{\infty} z_{ik}\frac{\frac{qE(t)}{\hbar} z_{kj}\left(\rho_j - \rho_k\right)}{\omega + \omega_{kj} - i\Gamma_{kj}} - \sum_{k=0}^{\infty} z_{kj}\frac{\frac{qE(t)}{\hbar} z_{ik}\left(\rho_k - \rho_i\right)}{\omega + \omega_{ik} - i\Gamma_{ik}}\right\}. \tag{2.61}$$

Négliger le terme de rectification optique, la polarisation éléctronique de la QW sera une

extension en série comme Eq 2.6 et se limiter à les deux premiére commandes,

$$P(t) = \varepsilon_0 \chi^{(1)}(\omega) \breve{E} e^{i\omega t} + \varepsilon_0 \chi^{(2)}(2\omega) \breve{E}^2 e^{2i\omega t} + cc, \tag{2.62}$$

où $\chi^{(1)}$et $\chi^{(2)}(2\omega)$ désignent le linéaire et le second harmonique génération, respectivement. La polarisation électronique du niéme ordre est donnée par [26]

$$P^{(n)}(t) = \frac{1}{S} Tr\left(\rho^{(n)} qz\right) \tag{2.63}$$

où S est la surface d'interaction. Utilisation des équation.$2.6 - 2.8$ pour l'expression de $\chi^{(2)}(2\omega)$, on trouve:

$$\chi^{(2)}(2\omega) = \frac{q^3}{\varepsilon_0 \hbar^2} \left[\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{2\omega + \omega_{ij} - i\Gamma_{ij}}\right]$$

$$\times \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z_{ik} z_{kj} z_{ji} (N_j - N_k)}{\omega + \omega_{kj} - i\Gamma_{kj}} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z_{kj} z_{ik} z_{ji} (N_k - N_i)}{\omega + \omega_{ik} - i\Gamma_{ik}} \right\}, \tag{2.64}$$

où N_l est la densité volumique dans le sous-bande. Nous traitons le génération de deuxième harmonique dans les systèmes à deux et trois niveaux.

2.3 *Méthode de shooting*

Comme point de départ, nous considérons une forme générale et simple (masse constante) pour l'équation de Schrödinger indépendante de temps, tant que l'énergie dans le plan est faible par rapport à la hauteur de la barrière, cette approximation n'introduira pas trop de différence. Par conséquent, nous arrivons à l'équation de Schrödinger unidimensionnelle (1D) dans une structure à puits quantique:

$$\left[-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V(z)\right] \psi_n(z) = E_n \psi_n(z) \tag{2.65}$$

Méthode de prise de vue présente brièvement la méthode ST basée sur l'explication détaillée dans [30]. La méthode Shooing est une approche numérique de la solution de 1D Schrödinger équation représentée par Eq:

$$\left[-\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V(z)\right] \psi_n(z) = E_n \psi_n(z) \tag{2.66}$$

Cette méthode est capable de trouver l'énergie propre et fonction d'onde propre en même

temps pour tous les états stationnaires d'un QCL structure de bande, étant donné compte tenu du profil de potentiel bien défini et la masse efficace en tant que fonction de z le long de la direction de croissance. Eq. 2.65 peut être organisé en:

$$\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m^*(z)}\frac{\partial}{\partial z}\psi(z) = \frac{2}{2\hbar^2}\left[V(z) - E_n\right]\psi(z) \tag{2.67}$$

Rappelant l'expansion des différences finies centrée pour la deuxième et la première dérivées, c.-à-d.

$$A(z)\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}\mid_{z=z_i} \rightarrow \frac{\partial}{\partial z}\left(A(z)\frac{\partial g}{\partial z}\right)\mid_{z=z_i}$$

$$\approx \frac{A(z_{i+1}) + A(z_i)}{2(\Delta z)^2}g(z_{i+1}) - \frac{A(z_{i+1}) + 2A(z_i) + A(z_{i-1})}{2(\Delta z)^2}g(z_i) + \frac{A(z_i) + A(z_{i-1})}{2(\Delta z)^2}g(z_{i-1}) \tag{2.68}$$

$$B(z)\frac{\partial g}{\partial z}\mid_{z=z_i} \rightarrow \frac{1}{2}\left(B(z)\frac{\partial g}{\partial z} + \frac{\partial(Bg)}{\partial z}\right)\mid_{z=z_i}$$

$$\approx \frac{B(z_{i+1}) + B(z_i)}{4\Delta z}g(z_{i+1}) - \frac{B(z_i) + B(z_{i-1})}{4\Delta z}g(z_{i-1}) \tag{2.69}$$

Après remplacement ces dernières équations 2.69 dans l'équation de Schrödinger 2.65 on obtient:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{\frac{1}{m(z_{i+1})} + \frac{1}{m(z_i)}}{2(\Delta z)^2}\right)\psi(z_{i+1}) - \left(\frac{\frac{1}{m(z_{i+1})} + 2\frac{1}{m(z_i)} + \frac{1}{m(z_{i-1})}}{2(\Delta z)^2}\right)\psi(z_i) + \left(\frac{\frac{1}{m(z_i)} + \frac{1}{m(z_{i-1})}}{2(\Delta z)^2}\right)\psi(z_{i-1})\right] + (V(z) - E)\psi(z_i) = 0 \tag{2.70}$$

$$\left(\frac{\frac{1}{m(z_{i+1})} + \frac{1}{m(z_i)}}{2(\Delta z)^2}\right)\psi(z_{i+1}) - \left(\frac{\frac{1}{m(z_{i+1})} + \frac{1}{m(z_i)} + \frac{1}{m(z_i)} + \frac{1}{m(z_{i-1})}}{2(\Delta z)^2}\right)\psi(z_i) + \left(\frac{\frac{1}{m(z_i)} + \frac{1}{m(z_{i-1})}}{2(\Delta z)^2}\right)\psi(z_{i-1}) - \frac{2}{\hbar^2}(V(z) - E)\psi(z_i) = 0 \tag{2.71}$$

Eq 2.71 peut être écrit comme :

$$\frac{1}{m\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}\psi\left(z_{i+1}\right)-\left(\frac{1}{m\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}+\frac{1}{m\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}\right)\psi\left(z_{i}\right)+\frac{1}{m\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}\psi\left(z_{i-1}\right)$$

$$-\frac{2\Delta z^{2}}{\hbar^{2}}\left(V\left(z\right)-E\right)\psi\left(z_{i}\right)=0 \tag{2.72}$$

$$\frac{1}{m\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}\psi\left(z_{i+1}\right)-\left(\frac{1}{m\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}+\frac{1}{m\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}+\frac{2\Delta z^{2}}{\hbar^{2}}\left(V\left(z\right)-E\right)\right)\psi\left(z_{i}\right)$$

$$+\frac{1}{m\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}\psi\left(z_{i-1}\right)=0 \tag{2.73}$$

En rassemblant les termes en (z) sur le côté droit, nous obtenons

$$\frac{\psi\left(z_{i+1}\right)}{m\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}=\left(\frac{1}{m\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}+\frac{1}{m\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}+\frac{2\Delta z^{2}}{\hbar^{2}}\left(V\left(z\right)-E\right)\right)\psi\left(z_{i}\right)-\frac{1}{m\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}\psi\left(z_{i-1}\right) \tag{2.74}$$

Les fonctions d'onde continues sont discrétisées dans la direction z par la longueur unitaire de δz où $z_i = i\delta z$. Avec les valeurs de la fonction d'onde des deux premiers points, toutes les valeurs restantes de la fonction d'onde peuvent être calculées à l'aide de l'Eq.2.74. Qu'il s'agisse une telle fonction d'onde est la solution propre dépend du choix de En et est jugé par les conditions aux limites. Si une fonction d'onde est conforme à la frontière condition, c'est la fonction d'onde propre et l'énergie correspondante est l'énergie propre de cette fonction d'onde. Les conditions aux limites sont:

$\psi(0) = \psi(\infty) = 0$

Les conditions initiales sont données par les deux premières valeurs de fonction d'onde come suites

$$\psi(0) = 0, \psi(\delta z) = 1 \tag{2.75}$$

Remarque:

Les fonctions d'onde obtenues à partir de cette méthode numérique ne sont pas normalisées, c'est-à-dire qu'elles ne satisfont pas:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(z)|^2 dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(z)\,\psi(z)\,dz = 1 \tag{2.76}$$

Dans ce chapitre on a étudié théoriquement les expressions analytiques de coefficients d'absorption linéaire ,non linéaire et totale à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger par une méthode numérique (méthode shooting) et l'utilisation de la matrice densité.

Chapitre 3

calculs numérique de coefficient d'absorption

Dans ce chapitre nous étudierons les propriétés optiques (la variation de coefficient d'absorption linéaire et non linéaire) d'une structure à puits quantique à base de GaAs/AlGaAs, qui a un potentiel gradué (voir la Fegure 3-1) en tenant compte des effets du masse dépendente de position(MDP) et ses paramètres de structure ($l_{b1} = 150, l_{\omega 1} = 80, l_{\omega 2} = 60, l_{\omega 3} = 80, l_{b2} = 150)(\mathring{A})$. Il faut noter que la polarisation de l'incident le rayonnement et le potentiel de confinement sont orientés dans la direction z correspondant à la direction de croissancede l'hétérostructure. La méthode utilisée pour calculer les fonctions d'onde et les niveaux d'énergie du système est basé sur la méthode numérique de shooting. On a déja expliqué en détaille dans le chapitre précident comment utiliser la méthode shooting pour résoudre l'équation de Schrödingre.

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'équation de Schrödinger de masse dépendante de la position peut être donnée par :

$$-\left[\frac{\hbar^2}{2m\left(z\right)}\right]\frac{d^2\psi\left(z\right)}{d^2z}+v\left(z\right)\psi\left(z\right)=E\psi\left(z\right) \tag{3.1}$$

où v(z) designe la hauteur des puits de potentiels, tandis que $m\left(z\right)$ est l'exprssion de la masse effective dépendante de position est donnée par:

$$m\left(z\right)=m^*\sec h^2\left(\frac{\pi z}{d}\right) \tag{3.2}$$

où $\sec h$ est une relation thrégonométrique définié par $1/\cos^2$ et d le paramètre qui définit la longueur effective de la distribution de masse variant spatialement la distribution de masse effective est appropriée pour représenter un profil solitonique trouvé dans la matière

condensée et la physique nucléaire à basse énergie.[31],[32],[33].

Après calcule que les énergies et les fonctions d'onde corspondantes pour les sous-bandes de la structure à puits quantique pour différentes forme liées à la variation de la composition x_j , en calculant le coefficient d'absorption linéaire, non linéaire et total pour l'intersubband transition dans la band de conduction par le formalisme de matrice de densité (ce formalisme est plus détaillé dans le chapitre 2) qui ses expressions sont données respectivement comme suit:

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega\sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}}\left|M_{21}\right|^2\left(\frac{m^* K_B T}{L\pi\hbar^2}\right)\ln\left\{\frac{1+\exp\left[\left(E_F-E_1\right)/K_B T\right]}{1+\exp\left[\left(E_F-E_2\right)/K_B T\right]}\right\}$$

$$\times\frac{\hbar/\tau_{in}}{\left(E_2-E_1-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar/\tau_{in}\right)^2}. \tag{3.3}$$

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -\omega\sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}}\left(\frac{I}{2\epsilon_0 n_r c}\right)\frac{m^* K_B T}{L\pi\hbar^2}\ln\left\{\frac{1+\exp\left[\left(E_F-E_1\right)/K_B T\right]}{1+\exp\left[\left(E_F-E_2\right)/K_B T\right]}\right\}$$

$$\times\frac{\left|M_{21}\right|^2\hbar/\tau_{in}}{\left[\left(E_2-E_1-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar/\tau_{in}\right)^2\right]^2}$$

$$\times\left[4\left|M_{21}\right|^2-\frac{\left|M_{22}-M_{11}\right|^2\left\{\left(E_2-E_1-\hbar\omega\right)^2-\left(\hbar/\tau_{in}\right)^2+2\left(E_2-E_1\right)\left(E_2-E_1-\hbar\omega\right)\right\}}{\left(E_2-E_1-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar/\tau_{in}\right)^2}\right] \tag{3.4}$$

la somme $\alpha^{(1)}(\omega)$ et $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ donne l'éxpresstion d'absorption totale :

$$\alpha^{(t)}(\omega) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I)$$

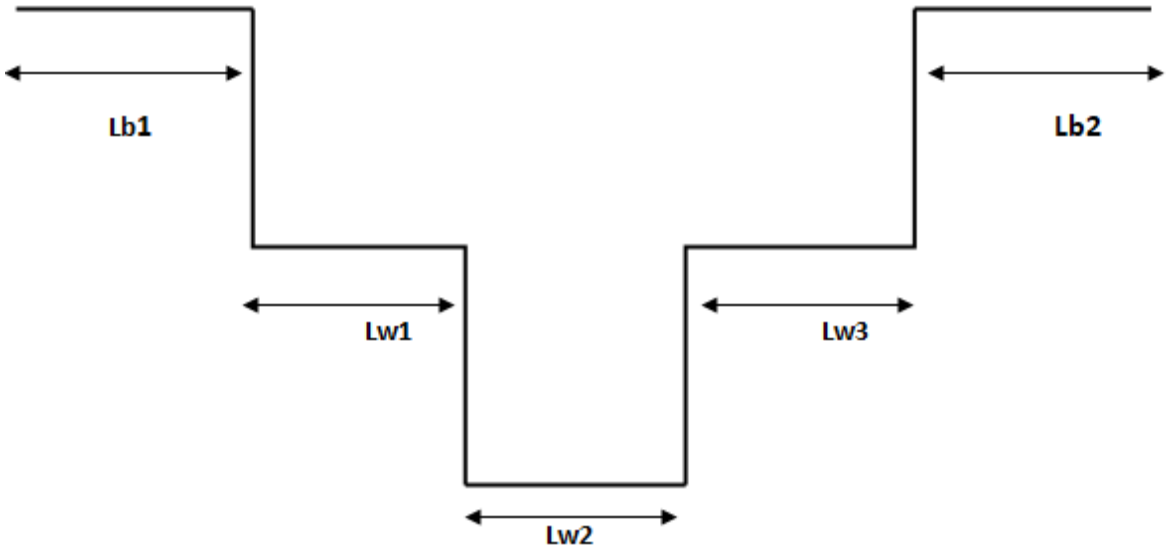


Figure 3-1: la variation de coefficient d'absorption linéaire et non linéaire d'une structure à puits quantique à base de GaAs/AlGaAs.

3.1 Résultats et discutions

Dans cette section, nous présentons nos résultats numériques pour les effets de plusieurs paramètres physiques sur le coefficient d'absorption. Les paramètres numériques utilisé dans la présente étude sont

$\varepsilon_0 = 12.58, m^* = 0.067 m_0 (m_0 = 9,10 \times 10^{-34} Kg), n_r = 3.2,$

$\tau_{12} = 0.14 ps, \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} Hm^{-1}$.

Où ces paramètres sont couramment utilisés pour les matériaux GaAs / Ga (1-x) AlxAs.

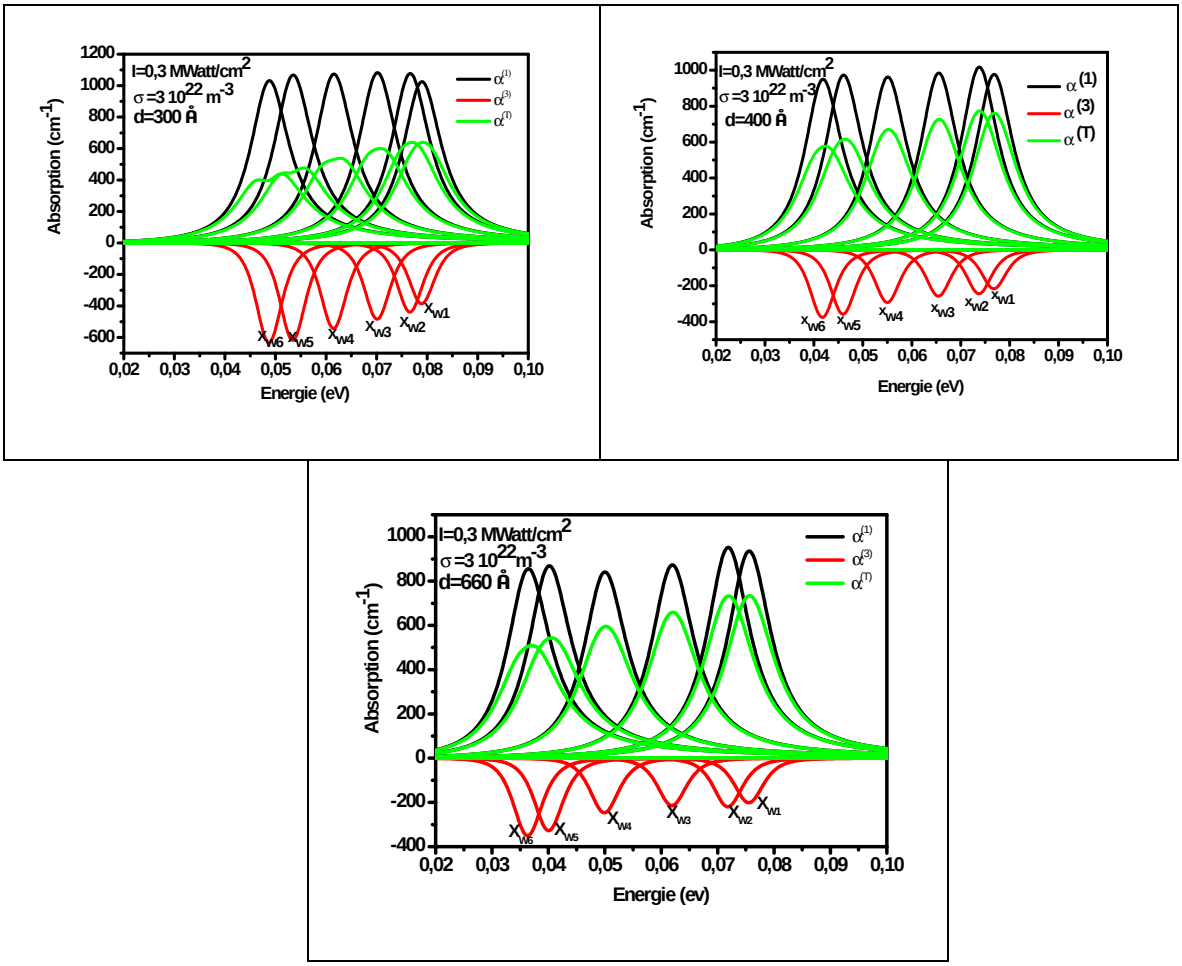


Figure 3-2: Représente la variation d'absorption (linéaire, non linéaire et totale) en fonction de rayonnement incidente si la composition est (AlGaAs/GaAs).

la Fegure 3-2 démontre la variation de coefficient d'absorption en fonction d'énergies de photon incident pour déférentes valeurs de paramètre $d(300, 400, 660(\mathring{A}))$, où on fixe l'intensité lummineuse des photons ($I = 0.3\ Mwatt/cm^2$) et la densité des porteurs (électrons) dans le système, et sa valeurs est $\sigma = 3 \times 10^{22} m^{-3}$.

A partir des graphes de la Fegure 3-2 on voit que lorsque on augmente la composition d'aluminium x_j les positions des pics d'absorption linéaire moves vers basse énergies et également ont un comportement non-uniforme, tandis que les amplitudes des graphes de coefficient d'absorption non linéaire et totale ont un comportement uniforme. Egalement on observe quand le paramètre d augmente l'amplitude des pics des coefficients d'absorption linéaire prèsque reste la même dans tous les graphes.

Comme on voit que l'amplitude des pics d'absorption non linéaire va diminuée et la demi-largeur spectrale des pics augmente.

On voit clairement aussi que l'amplitude de coefficient d'absorption totale est proportionnelle avec l'énergie de photon et la composition.

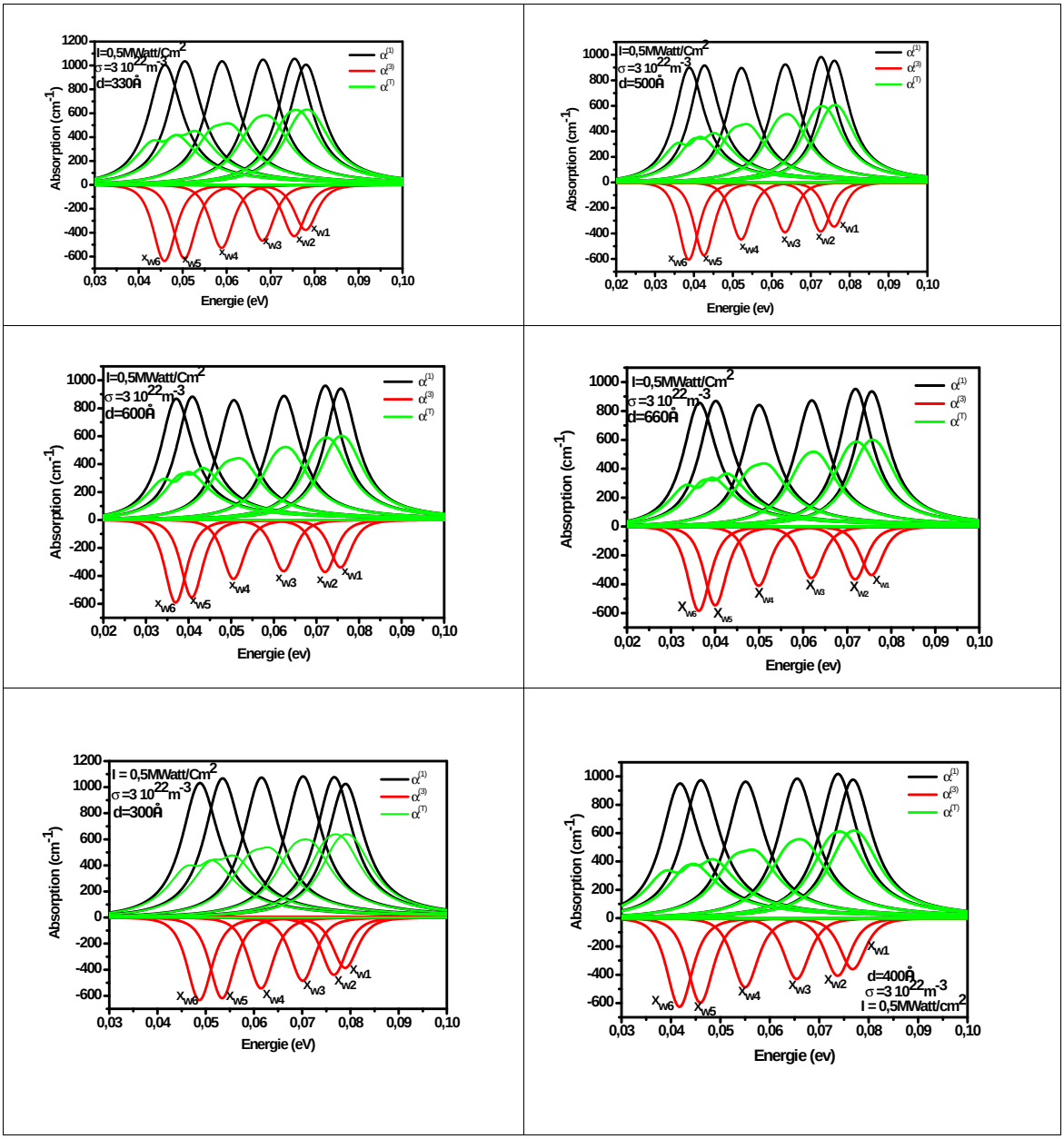


Figure 3-3: La variation d'absorption (linéaire, non linéaire et totale) en fonction de l'énergie de rayonnement incidente.

La Fegure 3-3 représente la variation de coefficient d'absorption en fonction d'énergie de photon pour déférentes valeur $d(300, 330, 400, 500, 600, 660(\mathring{A}))$, mais cette fois on fixe l'intensité lumineuse de photon à la valeur $I = 0.5\ Mwatt/cm^2$, et on garde la valeur de la densité de porteurs à $\sigma = 3 \times 10^{22} m^{-3}$.

En plus la Fegure 3-3 représente la variation linéaire, non linéaire et totale du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons dans un puits quantique gradué avec une masse efficace dépendante de la position voir l'équation (3.1), nous constatons particulièrement que le coefficient d'absorption non linéaire correspond de chaque valeur de la composition x_j augmentent par contre le coefficient d'absorption total diminué. D'autre part on observe que les pics de coefficient d'absorption optique total incrément lorsque l'énergie de photon décale vers les hautes valeurs d'autre coté les pics de coefficient d'absorption linéaire presque reste constant lorsque on change la composition x_j.

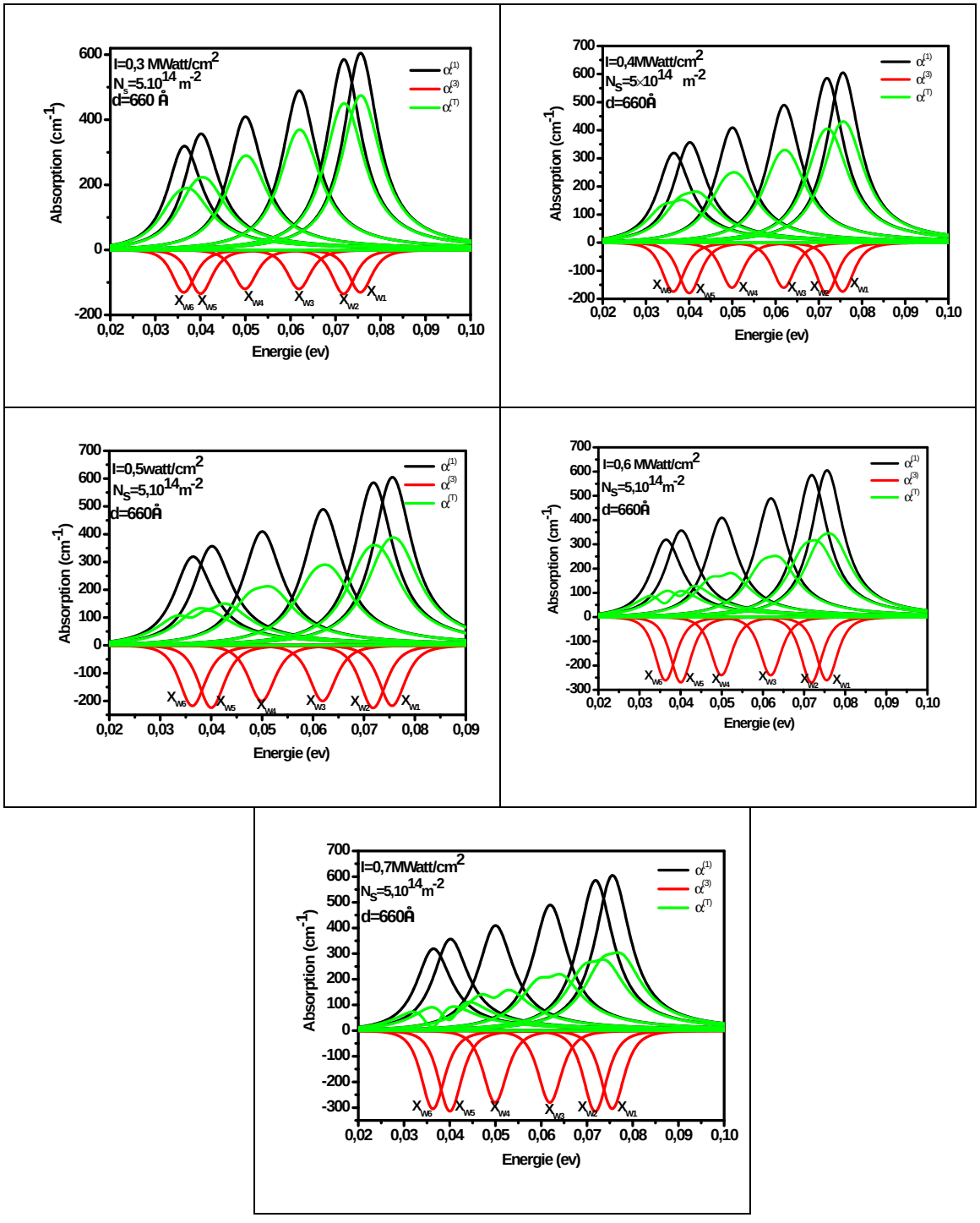


Figure 3-4: la variation d'absorption (linéaire, non linéaire et totale) en fonction de l'énergie de rayonnement incidente avec le dopage $N_s = 5.10^{14} m^{-2}$.

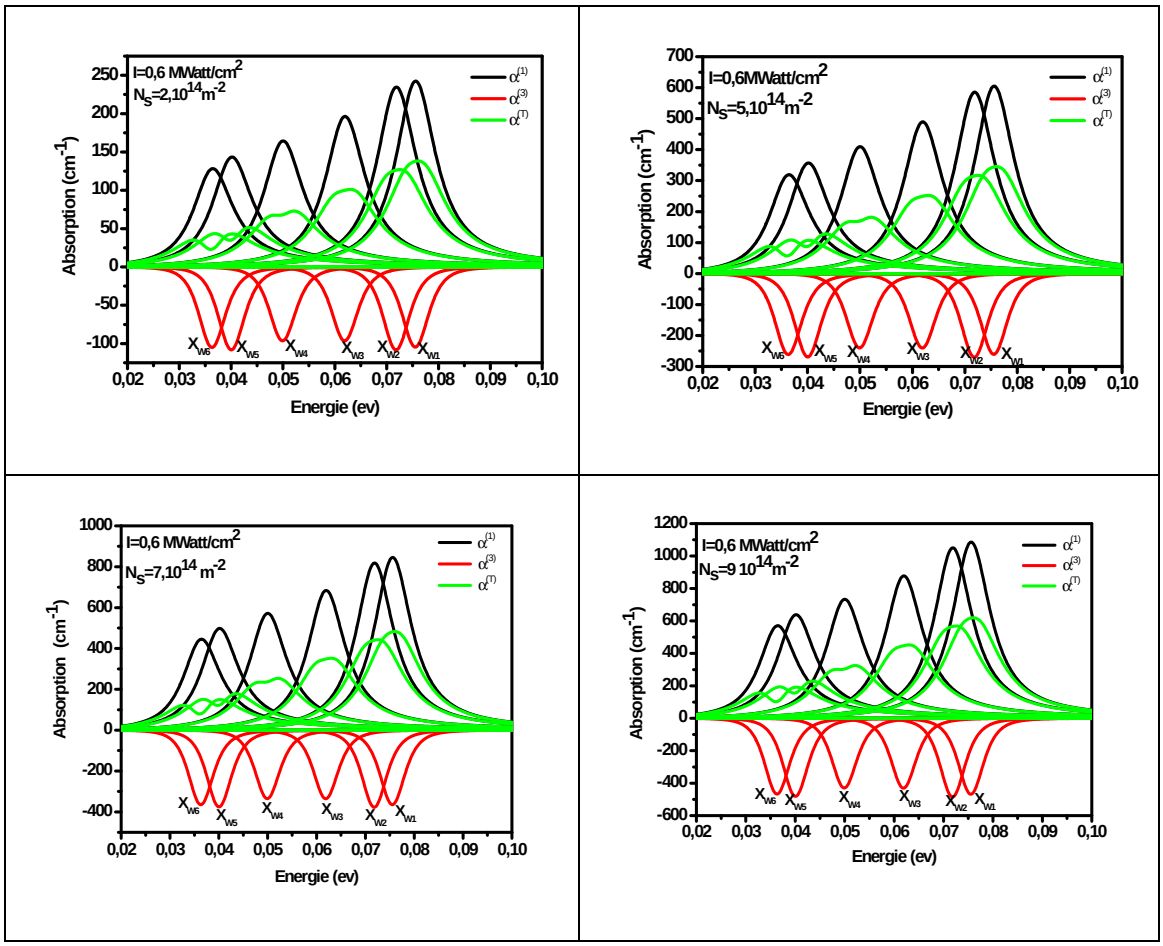


Figure 3-5: la variation d'absorption (linéaire, non linéaire et totale) en fonction de dopage avec l'intesité $I = 0.6MWatt/cm^2$.

Dans la Fegure 3-4 Nous calculons le coefficient d'absorption inter-sous-bande linéaire, non linéaire et total et le changement en fonction de l'intensité optique incidente avec en fixant le paramètre $d = 660\ A$ et la concentration de dopage $N_s = 5 \times 10^{14} cm^{-2}$ pour différentes valeurs de la composions x_j.

On remarque quand l'on augmente la composition x_j les pics d'absorptions linéaire diminués et ont un comportement uniforme et également on voit que les amplitudes d'absorption non linéaire ont un comportement non uniforme et les pics des coefficients d'absorption total et linéaire sont inversement proportionnels avec les composition et x_j, par contre ces dernières coefficients sont proportionnels avec l'énergie de photon incident.

Enfin, sur la Fegure 3-5, nous avons tracé le coefficient d'absorption linaire, non linaire et total en fonction de l'énergie de photon incident pour différentes valeurs de la composition xj et de la concentration de dopage Ns avec on fixe le paramètre d à la valeur $d = 660A$ et l'intensité lumineuse à $I = 0.6\ Mwatt/cm^2$. On constate que les pics de spectre de coefficient d'absorption optique linaire et total sont proportionnels avec l'énergie de photon et inversement proportionnels avec la composition x_j, par contre les pics de spectre de coefficient d'absorption optique non linaire ont un comprtement non uniforme avcec l'énrgié du photon incident et la composition x_j respictivement. A partir des graphes de la Fegure 3-4 on observe que l'amplitude des pics d'absorption augmente lorsque on augmente les valeurs de la densité de dopage.

Dans ce chapitre, nous avons traité de l'étude numérique des changements d'absorption linéaire, non linéaire et totale en fonction de l'énergie sous l'influence de divers facteurs comme le paramètre d, l'intensité et concentration de dopage.

Conclusion

Comme principale conclusion de ce travail, nous avons basé sur l'étude théorique et numérique de coefficients d'absorption optique linéaire non-linéaire inter-sous-bandes correspond de tranansition electronique entre les niveaux 1 et 2 dans un puits quantiques gradué a base AlGaAs/GaAs .Les calculs numériques sont effectués pour résoudre l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode de shooting prend en compte l'effet de masse effective dépendante de position (PDM). Les résultats sont utilisés pour étudier les coefficients d'absorption optique linéaires et non linéaires .Le changement de coefficient d'absorption (linéaire, non linéaire et totale) contribue au comportement optiques comme nous avons montré dans les Figures (3-2,3-3,3-4 et 3-5). Lorsque la fonction de la position la masse effective est prise en compte l'élément de matrice densité. Par conséquence on obtient que la masse effective dépendante de la position joue un rôle important dans les propriétés optiques.

Bibliographie

[1] S. Baskoutas, E. Paspalakis, A.F. Terzis, J. Phys. Condens. Matter 19 (2007) 395024.

[2] I. Karabulut, Ü. Atav, H. Şafak, M. Tomak, Eur. Phys. J. B 55 (2007) 283.

[3] I. Karabulut, S. Baskoutas, J. Appl. Phys. 103 (2008) 073512.

[4] Reed MA: Quantum dots. Sci Am 1993, 268:118

[5] Loss D, DiVicenzo DP: Quantum computation with quantum dots. Phys Rev A 1998, 57:120.

[6] Jean Hladik - Michel Chrysos Introduction à la Mécanique quantique, Dunod, Paris, 2000.

[7] Frédéric Mila. Physique Quantique I et II (Notes de cours), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2010.

[8] B. Diu et F. Laloë C. Cohen-Tannoudji.Mécanique Quantique. Hermann, 1997.

[9] J. J. Sakurai.Modern Quantum Mechanics, Revised Edition. Addison Wesley, 1994.

[10] Jean-Louis Basdevant, Jean Dalibard, "Mécanique Quantique", (accompagné d'un CD-Rom réalisé par Manuel Joffre), Editions de l'Ecole Polytechnique.

[11] E. Schrödinger, "The non relativistic équation of the de Broglie waves," Ann. Physik 79(1926)361.

[12] Feynman, Leighton, Sands, cours de physique de FEYNMAN, Paris, 1986.

[13] Jean Hladike, Michel Chryson Pierre, Emmanuel Haldik Lorenz Ugon Ancarani.Mécanique.

[14] Introduction à la mécanique quantique Alice Sinatra septembre 2008 .

[15] Physique Statistique I. Notes de cours 2007/2008.D. Ivanov(rédigé par Maher Younan et Benoît Crouzy)September, 2009.

[16] Introductory Quantum Mechanics II Spring 2009.

[17] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe¨, Quantum Mechanics,Wiley, New York (1992).

[18] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, The Feynman Lectures on Physics, Vol III: Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966).

[19] D. Ahn and S. L. Chuang, "Intersubband optical absorption in a quantum well with an applied electric field," Phys. Rev. B, vol. 35,pp. 4149-4151, 1987.

[20] E. V. Demidov and Yu. A. Romanov, "Nonlinear susceptibility of nonsymmetric quantum systems," Zzv. Vyssh, Uchebn uved., Radiofiz vol. 28, pp. 43-50, 1985.

[21] N. Bloembergen, Nonlinear Optics. New York: Benjamin

[22] C. Kittel, Quanrum Theory ofsofids. New York: Wiley, 1963, pp.286-290.

[23] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegman, T. H. Wood, and C. A. Burms, "Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures," Phys. Rev. B, vol. 32, pp. 1043-1060, 1985.

[24] D. Ahn and S. L. Chuang, "Exact calculations of quasibound states of an isolated quantum well with uniform electric field: Quantum-well Stark resonance," Phys. Rev. B, vol. 34, pp. 9034-9037, 1986.

[25] D. D. Coon and R. P. G. Karunasiri, "New mode of IR detection using quantum wells," Appl. Phys. Letr., vol. 45, pp. 649-651, 1984.

[26] E. Rosencher and Ph. Bois, Phys. Rev. B 44, 11315 (1991).

[27] Saidi, L. Bouzaïene, H. Mejri, and H. Maaref, J. Appl. Phys. 101, 094506 (2007).

[28] B. Chen, K.-X. Guo, Z.-L. Liu, R.-Z. Wang, Y.-B. Zheng, and B. Li, J. Phys. Condens. Matter 20, 255214 (2008).

[29] L. Zhang and H.-J. Xie, Phys. Rev. B 68, 235315 (2003).

[30] P. Harrison. Quantum wells, wires and dots. John Wiley & Sons, 2nd edition,2005.

[31] M.S. Cunha, H.R. Christiansen, Analytic results in the position-dependent mass Schrodinger problem, Commun. Theor. Phys. 60 (2013) 642–650.

[32] H. Panahi, Z. Bakhshi, Solvable potentials with position-dependent effective mass and constant mass Schr¨odinger equation, Acta Phys. Pol. B 41 (2010) 11–21.

[33] B. Bagchi, P. Gorain, C. Quesne, R. Roychoudhury, A general scheme for the effective-mass Schr¨odinger equation and the generation of the associated potentials, Mod. Phys. Lett. A 19 (2004) 2765–2775.