

Propriétés mathématiques et analyse numérique de modèles de Bloch pour les boîtes quantiques

Kole KEITA, Université de Grenoble

Brigitte BIDEGARAY-FESQUET, Université de Grenoble

Mots-clés : Modèle quantique, splitting, interaction de Coulomb

Les boîtes quantiques sont des nanostructures de matériaux semi-conducteurs qui modifient à l'échelle microscopique les propriétés du milieu sous-jacent. Elles possèdent des propriétés quantiques très intéressantes grâce au confinement des électrons dans les trois directions de l'espace.

Les modèles de Bloch sont habituellement utilisés pour décrire les propriétés quantiques de matériaux comme les gaz d'électrons, les cristaux [1, 3, 5] et aussi les puits quantiques [8]. La variable de ces modèles est la matrice densité. Pour étendre le modèle de Bloch aux boîtes quantiques, il faut considérer un modèle à plusieurs espèces [4] et prendre en compte l'interaction de Coulomb (interactions mutuelles entre les électrons de la boîte). Les modèles de Bloch alors obtenus sont non linéaires [6].

Dans un premier temps, nous présentons une étude mathématique des propriétés qualitatives et quantitatives du modèle : la conservation de la trace, l'hermiticité et la positivité de la matrice densité au cours du temps.

Puis nous traitons la résolution numérique des modèles de Bloch non linéaires. Nous utilisons une méthode de splitting et des méthodes simples pour approcher les solutions explicites des sous-équations. Cette discrétisation soigneuse permet d'assurer un ordre deux en temps du schéma.

Des simulations de type interaction laser-matière sont ensuite mises en œuvre, en couplant le modèle de Bloch avec les équations de Maxwell [2]. Le cas test réalisé est la transparence auto-induite qui permet une inversion totale du système quantique, grâce à l'interaction avec un paquet d'onde approprié. Ce cas test permet de montrer les différences de comportement entre les modèles avec et sans interaction de Coulomb et d'invalider certaines simplifications du modèle présentes dans la littérature [7].

Références

- [1] C. BESSE, B. BIDEGARAY-FESQUET, A. BOURGEADE, P. DEGOND ET O. SAUT, *A Maxwell–Bloch model with discrete symmetries for wave propagation in nonlinear crystals: an application to KDP*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 38(2):321–344, 2004.
- [2] B. BIDEGARAY, *Time Discretizations for Maxwell–Bloch Equations*, Numerical Methods for Partial Differential Equations, 19(3):284–300, 2003.
- [3] B. BIDEGARAY-FESQUET, *Hiérarchie de modèles en optique quantique. De Maxwell–Bloch à Schrödinger non-linéaire*, Mathématiques et applications, volume 49, Springer, 2006.
- [4] B. BIDEGARAY-FESQUET, *Positiveness and Pauli exception principle in raw Bloch equations for quantum boxes*, Annals of Physics, 325(10):2090–2102, 2010.
- [5] B. BIDEGARAY, A. BOURGEADE ET D. REIGNIER, *Introducing Physical Relaxation Terms in Bloch Equations*, Journal of Computational Physics, 170(2):603–613, 2001.
- [6] B. BIDEGARAY-FESQUET ET K. KEITA, *A nonlinear Bloch model for Coulomb interaction in quantum dots*, hal-00738063, 2013.
- [7] E. GEHRIG ET O. HESS, *Mesoscopic spatiotemporal theory for quantum-dot lasers*, Physical Review A, 65(033804):1–16, 2002.
- [8] H. HAUG ET S.W. KOCH, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors, Fifth edition*, World Scientific, 2009.

Kole KEITA, Laboratoire Jean Kuntzmann, BP 53, 38041 Grenoble Cedex, France
kole.keita@imag.fr

Brigitte BIDEGARAY-FESQUET, Laboratoire Jean Kuntzmann, CNRS, BP 53, 38041 Grenoble Cedex, France

Brigitte.Bidegaray@imag.fr