

# Un modèle de type Bloch pour modéliser l'interaction électron–phonon

Brigitte BIDÉGARAY-FESQUET, Laboratoire Jean Kuntzmann

Clément JOURDANA, Laboratoire Jean Kuntzmann

Kole KEITA, Univ. Jean Lorougnon Guédé

Nous étudions la prise en compte de l'interaction électron–phonon (e–ph) dans un modèle de boîtes quantiques de type Bloch.

Les boîtes quantiques sont habituellement décrites en utilisant des électrons et des trous. Pour les mêmes raisons concernant la structure des équations que dans [2], nous préférons ici une modélisation de type électrons de conduction et de valence, où ces derniers sont considérés comme une absence de trou. Les niveaux d'énergie associés aux deux espèces d'électron sont quantifiées en raison du confinement 3D dans les boîtes. Nous décrivons les occupations des niveaux ainsi que les transitions entre niveaux à travers une unique variable matricielle, la matrice densité  $\rho$ . L'évolution temporelle de  $\rho$  est décrite par l'équation de Bloch, une équation de type Liouville, qui prend en compte l'hamiltonien libre des électrons et un champ électromagnétique régi par les équations de Maxwell (voir [2] par exemple, pour plus de détails).

De même que pour la prise en compte de l'interaction de Coulomb [1], on part du formalisme de la seconde quantification du champ pour écrire l'hamiltonien d'interaction e–ph et on ne considère que le couplage polaire avec les phonons optiques, qui est classiquement décrit par le modèle de Frölich (voir [3] ou [4]). En explicitant les commutateurs mis en jeu dans l'hamiltonien e–ph et en fermant correctement le système obtenu, le modèle final consiste à coupler l'équation de Bloch pour  $\rho$  avec un ensemble d'équations de structure assez semblable pour des densités assistées par les phonons  $S_{\mathbf{q}}$ , un ensemble de matrices pour chaque mode de phonon  $\mathbf{q}$  considéré.

Après une description de la dérivation du modèle, nous discutons la manière de discrétiser efficacement ce couplage non linéaire en vue des simulations numériques. Nous utilisons des grilles décalées en temps pour la variable  $\rho$  et les  $S_{\mathbf{q}}$ , et chaque équation est en outre résolue en utilisant une méthode de splitting de type Strang. Ceci nous permet en particulier d'assurer la conservation de certaines quantités et propriétés physiques du modèle. Enfin nous présentons des simulations numériques pour une collection de boîtes quantiques alignées en dimension 1 et qui interagissent en elles *via* la propagation du champ électromagnétique.

## Références

- [1] B. BIDÉGARAY-FESQUET ET K. KEITA, *A nonlinear Bloch model for Coulomb interaction in quantum dots*, Journal of Mathematical Physics, **55**(2) 021501, 2014.
- [2] B. BIDÉGARAY-FESQUET, *Positiveness and Pauli exception principle in raw Bloch equations for quantum boxes*, Annals of Physics, **325**(10) 2090–2102, 2010.
- [3] H. HAUG ET S.W. KOCH, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors*, World Scientific, fifth edition, 2009.
- [4] E. GEHRIG AND O. HESS, *Mesoscopic spatiotemporal theory for quantum-dot lasers*, Phys. Rev. A, **65** 1-16, 2002.

Brigitte BIDÉGARAY-FESQUET, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LJK, 38000 Grenoble, France

Brigitte.Bidegaray@univ-grenoble-alpes.fr

Clément JOURDANA, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LJK, 38000 Grenoble, France

Clement.Jourdana@univ-grenoble-alpes.fr

Kole KEITA, Univ. Jean Lorougnon Guédé (UJLoG), 2BP V 25 Daloa 12, Côte d'Ivoire

Clement.Jourdana@univ-grenoble-alpes.fr