

Etude numérique d'un condensat de polaritons dans un gradient de température

Gabriel Mahuas



Résumé

L'objectif de ce stage est d'étudier numériquement l'évolution d'un condensat de polaritons excitoniques 1D dans un gradient de température dans une microcavité semiconductrice en ZnO.

Table des matières

1	Présentation du laboratoire	3
2	Présentation du sujet	4
2.1	Excitons	4
2.2	Photons de cavité	4
2.3	Polaritons excitoniques	5
2.3.1	Dispositif experimental et énergie des polaritons excitoniques	5
2.3.2	Equation de Gross-Pitaevskii pour les polaritons	5
3	Travail réalisé	6
3.1	Evolution des propriétés des polaritons avec la température	6
3.1.1	Energie minimum des polaritons	6
3.1.2	Temps de vie des polaritons	7
3.1.3	Masse effective des polaritons bas	7
3.2	Résolution numérique de l'EGP	7
4	Conclusion	8
5	Bibliographie	9

1 Présentation du laboratoire

J'ai effectué ce stage au laboratoire Kastler-Brossel (LKB), sur le site de l'UPMC. Ce laboratoire fut fondé en 1905 par Alfred Kastler et Jean Brossel et était alors nommé Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne de l'ENS, ce n'est qu'en 1967 que le site de l'UPMC a été créé. Les axes de recherche du LKB sont les gaz quantiques, l'information et l'optique quantique, les atomes et la lumière dans des milieux denses et complexes, la métrologie et les tests d'interactions fondamentales, et enfin l'axe transverse physique/biologie/médecine.

J'ai passé les cinq semaines de ce stage au sein de l'équipe Optique Quantique, dans le groupe Fluides Quantiques de Lumière. Ce groupe est constitué de deux permanents (Alberto Bramati et Quentin Glorieux), d'une chercheuse émérite (Elisabeth Giacobino), de deux doctorants et de trois postdoctorants. Les thématiques de recherche du LKB sont principalement expérimentales et on compte donc assez peu de théoriciens parmi les chercheurs du laboratoire. Simon Pigeon, mon maître de stage, est l'un d'eux. Il effectue ses recherches sur les fluides quantiques de polaritons excitoniques dans les cavités semiconductrices. Les fluides quantiques de polaritons excitoniques sont également le sujet de recherches expérimentales au LKB.

Concernant le financement du laboratoire, celui-ci fonctionne grâce aux fonds publics dédiés à la recherche. Le financement des travaux de recherche se fait après sélection par l'ANR (Agence Nationale de la Recherche) qui lance des appels à projets. Il existe aussi des appels à projets similaires, à l'échelle européenne. Chaque chercheur est libre de proposer un projet de recherche dans les limites de sa spécialité et de la spécialité du laboratoire.

Afin de mener ces recherches, de nombreuses organisations collaborent, les tutelles du LKB sont les suivantes :



Au 16 Juin 2017, il y a au LKB 56 permanents, 15 postdoctorants, 59 doctorants et 28 personnels techniques et administratifs répartis sur les trois sites du laboratoire : Département de physique de l'ENS Ulm, Collège de France et UPMC.

- Le LKB c'est aussi trois prix Nobel qui contribuent grandement à la renommée du laboratoire :
- Alfred Kastler (1966) «Pour la découverte et le développement de méthodes optiques pour l'étude des résonances Hertziennes dans les atomes»
 - Claude Cohen-Tannoudji (1997) : «Pour le développement de méthodes de refroidissement et de piégeage d'atomes par laser»
 - Serge Haroche (2012) : «Pour le développement de méthodes d'étude et de manipulation de systèmes quantiques individuels»

Je tiens à remercier les membres du LKB pour la qualité de l'accueil qu'ils réservent aux stagiaires et tout particulièrement mon encadrant, Simon Pigeon, pour sa patience, sa gentillesse et son aide précieuse.

2 Présentation du sujet

L'objet de ce stage est l'étude numérique d'un condensat de polaritons-excitoniques de microcavité semiconductrice dans un gradient de température. Il est donc nécessaire d'introduire quelques notions primordiales pour la compréhension du sujet : les polaritons-excitoniques et les entités qui les constituent.

2.1 Excitons

Les excitons sont des quasiparticules bosoniques générées dans les semiconducteurs lors du passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence, ce qui peut se produire par absorption d'un photon. Cette paire électron-trou se comportera de manière analogue à un atome d'hydrogène, l'interaction coulombienne entre le trou et l'électron stabilisant cette quasiparticule qui aura alors une énergie un peu inférieure au bandgap du matériau considéré (ici ZnO, semicondeur qui permet la condensation des polaritons à température ambiante).

On peut montrer en traitant les excitons de manière analogue à l'atome d'hydrogène que leur dispersion suit la relation suivante, démontrée dans la référence [1] :

$$E_X(\mathbf{k}, n) = E_{gap} - E_b(n) + \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2M} \quad n \in N^* \quad (1)$$

Où E_{gap} est l'énergie du gap et $E_b(n) = \frac{R_y^*}{n^2}$ avec $R_y^* = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2}$ le Rydberg excitonique, $M = m_e^* + m_h^*$ la masse du centre de masse et $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ celle de la particule réduite.

2.2 Photons de cavité

Dans le cas général, l'énergie d'un photon de pulsation ω et de vecteur d'onde \mathbf{k} , dans un milieu d'indice n , est donnée par :

$$E(\mathbf{k}) = \hbar\omega = \frac{\hbar c}{n} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \quad (2)$$

Or dans le cas présent, on confine les photons dans une microcavité de type Fabry-Pérot (dans laquelle se trouvent des puits quantiques confinant les excitons) réalisée à l'aide de miroirs de Bragg. C'est dans cette cavité qu'aura lieu l'interaction photon/exciton donnant lieu aux polaritons comme nous le verrons plus tard. Ce confinement implique une quantification de la projection du vecteur d'onde des photons sur la direction orthogonale aux parois de la cavité :

$$k_z = p \frac{\pi}{L} \quad p \in N^* \quad (3)$$

On en déduit, en posant $k_{||}^2 = k_x^2 + k_y^2$:

$$E_c(k_{||}, p) = \frac{\hbar c}{n} \sqrt{k_{||}^2 + \left(p \frac{\pi}{L}\right)^2} \quad p \in N^* \quad (4)$$

Au voisinage de $k_{||} = 0$ on a, dans le cadre de l'approximation parabolique :

$$E_c(k_{||}, p) = \frac{\hbar c k_z^p}{n} + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_c} \quad \text{avec} \quad k_z^p = p \frac{\pi}{L} \quad \text{et} \quad m_c = \frac{n \hbar k_z^p}{c} \quad (5)$$

2.3 Polaritons excitoniques

2.3.1 Dispositif expérimental et énergie des polaritons excitoniques

Les polaritons sont des quasiparticules issues de l'interaction forte entre une transition dipolaire électrique ou magnétique et un photon. Cette transition peut être de plusieurs natures mais nous nous intéresserons au cours de ce projet uniquement aux polaritons issus de l'interaction entre un exciton et un photon dans une microcavité semiconductrice. Les excitons étant des bosons composites et les photons étant des bosons, les polaritons sont eux aussi des bosons composites.

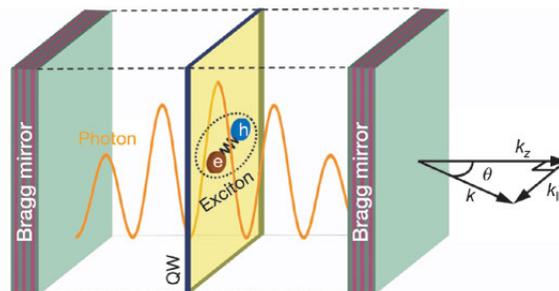


fig.1 Schéma d'un dispositif de production de polaritons excitoniques de microcavité extrait de la référence [2]

C'est dans ce type de cavité que l'on observe des polaritons excitoniques. On pompe la cavité à l'aide d'un laser de haute énergie, on forme ainsi des porteurs de charges chauds qui vont se refroidir par émission de phonons pour former un gaz d'excitons et à terme des polaritons par superposition avec les photons de cavité, après désexcitation ces polaritons peupleront le niveau fondamental (voir ref. [3]).

Dans le cas où l'on néglige les interactions entre excitons dans la cavité (faible densité d'excitons) et si l'on néglige les pertes dues à la cavité (cavité de grande finesse), d'après [1], le Hamiltonien du système est de la forme :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_c(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_x(k) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\Omega_R (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger) \quad (6)$$

L'opérateur \hat{a} (respectivement \hat{b}) est l'opérateur création d'un photon (respectivement d'une excitation dipolaire). Les conjugués hermitiques de ces opérateurs (notés †) sont les opérateurs annihilation associés, Ω_R est la pulsation de Rabi du couplage.

Si l'on diagonalise cet Hamiltonien on trouve de nouveaux états mixtes, les polaritons haut et bas, d'énergie (voir [1]) :

$$E_{UP/LP}(\mathbf{k}) = \frac{E_x(\mathbf{k}) + E_c(\mathbf{k})}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(E_x(\mathbf{k}) - E_c(\mathbf{k}))^2 + 4(\hbar\Omega_R)^2} \quad (7)$$

2.3.2 Equation de Gross-Pitaevskii pour les polaritons

Les polaritons étant des bosons composites, ils peuvent subir la condensation de Bose Einstein en dessous d'une température critique. Cette température dépend de la nature du semiconducteur dans lequel se trouvent les polaritons mais est en général bien supérieure aux températures de condensation des atomes froids. En effet la faible masse effective et la nature hors-équilibre des polaritons contribuent à augmenter leur température de condensation et fait

d'eux de bons candidats pour l'exploration des condensats de Bose-Einstein à température ambiante.

L'évolution de la fonction d'onde globale d'un condensat de polaritons peut être décrite par une équation de Gross-Pitaevskii (EGP) d'après les références [3] et [4] :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(E_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + i \frac{\hbar}{2} [P - \gamma_{LP}] + \hbar g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

Où E_0 est l'énergie minimale (càd à $\mathbf{k} = 0$) et m la masse du polariton bas, $g > 0$ quantifie la force d'interaction répulsive entre deux polaritons condensés (on a pris $\hbar g = 0.0015 \text{ meV} \cdot \mu\text{m}$ d'après la référence [4]). P caractérise le pompage non résonnant et γ_{LP} les pertes dues au temps de vie fini des polaritons dans la cavité.

3 Travail réalisé

L'objectif de mon stage fut d'étudier numériquement le comportement d'un condensat de polaritons dans un gradient de température obtenu en imposant une température différente de chaque côté de la cavité. Une première partie de mon travail a consisté à étudier la dépendance des différents paramètres de l'équation de Gross-Pitaevskii avec la température, j'ai ensuite procédé à la résolution numérique de cette équation.

3.1 Evolution des propriétés des polaritons avec la température

Trois paramètres varient avec la température : l'énergie minimum des polaritons, leur masse effective et leur temps de vie.

3.1.1 Energie minimum des polaritons

On a vu que l'énergie des polaritons s'exprime en fonction de celle des excitons et des photons de cavité, le minimum de l'énergie des polaritons sera donc cette énergie à $\mathbf{k} = 0$. En admettant que l'énergie des photons de cavité varie de manière négligeable avec la température, seule l'énergie des excitons est susceptible de varier fortement avec la température. Dans le cas présent la masse effective des excitons étant bien plus élevée que la masse effective des photons dans la cavité, on peut approximer l'énergie des excitons par la relation suivante, où E_{bind} a été prise dans la référence [5] :

$$E_x(\mathbf{k}, T) \approx E_{gap}(T) - E_{bind} \quad \text{avec} \quad E_{bind} = 80 \text{ meV} \quad (9)$$

L'évolution des propriétés de ZnO avec la température est l'objet de la publication [6]. J'ai fitté sur les points expérimentaux du bandgap de ZnO extraits de cette publication le modèle de Varshni couramment utilisé en physique des semiconducteurs :

$$E_{gap}(T) = E_{gap}(T = 0K) - a \frac{T^2}{T + b} \quad (10)$$

Avec $a = 0.7151$, $b = 551.2$, $E_{gap}(T = 0K) = 3.44 \text{ eV}$ et $R^2 = 0.9996$

On choisit ensuite une température (i.e. une position dans la cavité) telle que $E_c(k_{||} = 0) = E_x(T)$ et on en déduit immédiatement l'énergie minimum des polaritons grâce à la relation (7).

3.1.2 Temps de vie des polaritons

Le damping polaritonique s'exprime de la manière suivante (voir référence [1]) :

$$\gamma_{LP}(T) = |X_{\mathbf{k}}|^2 \gamma_X + |C_{\mathbf{k}}|^2 \gamma_C \quad (11)$$

Avec les fractions excitonique et photonique :

$$X_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\Omega_R}{\omega_{LP}(\mathbf{k}) - \omega_c(\mathbf{k})}\right)^2}} \quad C_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\omega_{LP}(\mathbf{k}) - \omega_c(\mathbf{k})}{\Omega_R}\right)^2}} \quad (12)$$

γ_X et γ_C sont les dampings des excitons et photons de cavité. Le damping des excitons dépend de la température et est obtenu directement grâce à la publication [6], le damping des photons de cavité est lui déterminé expérimentalement, d'après [5] : $\gamma_C = 11.2meV$. On considère que $\omega_c(\mathbf{k}_{||}) \approx \omega_c(\mathbf{k}_{||} = 0)$, ce qui est une hypothèse raisonnable car on se place dans ce projet au voisinage de $\mathbf{k}_{||} = 0$

3.1.3 Masse effective des polaritons bas

La masse effective des polaritons s'obtient en faisant l'approximation parabolique pour l'énergie des polaritons bas, au voisinage de $\mathbf{k}_{||} = 0$, il suffit pour l'obtenir de faire un développement limité au voisinage de $\mathbf{k}_{||} = 0$ de l'expression (7). Afin de vérifier les valeurs obtenues avec Mathematica pour le DL j'ai également écrit un code Matlab déterminant la masse effective des polaritons en faisant des fits successifs sur l'énergie en fonction de $\mathbf{k}_{||}$, en faisant évoluer la température.

On obtient la relation suivante :

$$m_{eff}^{LP}(T) = 2 \frac{m_c}{1 - \frac{\omega_c(\mathbf{k}_{||}=0) - \omega_x(T)}{\sqrt{\omega_c(\mathbf{k}_{||}=0)^2 + 4\Omega_R^2 - 2\omega_c(\mathbf{k}_{||}=0)\omega_x(T) + \omega_x(T)^2}}} \quad (13)$$

3.2 Résolution numérique de l'EGP

Après avoir étudié l'évolution des paramètres de l'EGP en fonction de la température, j'ai procédé à la résolution numérique de cette équation dans un gradient de température.

J'ai à chaque fois procédé par étape, en commençant d'abord par coder un algorithme de résolution d'une simple équation de schrodinger, puis d'une équation de schrodinger non linéaire et enfin de l'EGP en vérifiant la conservation de la norme du vecteur d'onde en l'absence de dissipation et de pompage afin de déterminer les incréments spatial et temporel à utiliser. J'ai commencé par essayer de résoudre l'EGP avec une simple méthode d'Euler, très lente, pour laquelle la convergence était extrêmement mauvaise. J'ai ensuite essayé une méthode de Crank Nicholson, qui bien que fournissant de bons résultats pour l'équation de Schrodinger ordinaire, s'est révélée étonnamment décevante pour l'EGP par rapport à la méthode de Runge-Kutta à l'ordre 4 que j'ai finalement retenue. Ayant commencé à coder en Matlab, je suis vite passé à Fortran pour réduire de manière assez conséquente le temps de calcul. Néanmoins, Matlab s'est révélé utile pour le traitement des données et notamment pour l'extraction du profil de vitesse des polaritons dans le condensat.

J'ai passé beaucoup de temps à essayer différents incréments spatial et temporel, différentes conditions aux limites, dans différents régimes de pompage et dans plusieurs gammes de température afin d'observer comment la variation de tous ces paramètres influence les résultats de

la simulation. Le code auquel j'ai aboutis à la fin de ce stage met plusieurs heures à s'exécuter et c'est une des raisons pour lesquelles l'optimisation (en particulier la réduction du bruit numérique) de la simulation fut difficile.

Voici un exemple de résultat obtenu :

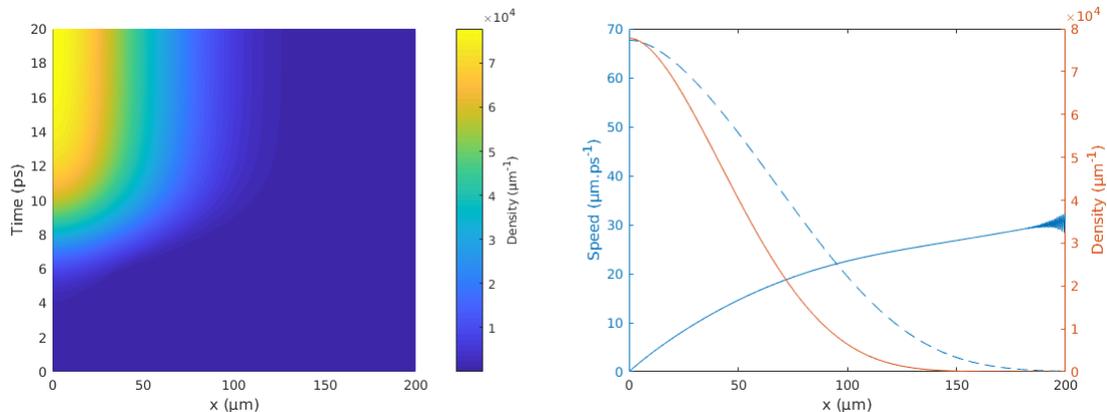


fig.2 A gauche : densité de polaritons en fonction de la position et du temps ; à droite : vitesse du son dans le condensat (tirets bleu), vitesse des polaritons (trait continu bleu) et profil de la densité (orange) en fonction de la position en régime stationnaire (à $t = 20ps$).

Paramètres de la simulation : $T = 20 ps$, $dt = 10^{-5} ps$, $l = 200 \mu m$, $dx = 0.008 \mu m$,
 $T(x = 0) = 273 K$, $T(x = l) = 323 K$, $P = \gamma_{LP}(x = 0.2l)$, $E_c(k_{||} = 0) = E_x(x = 0.2l)$ avec
les conditions aux limites : $\partial_x \Psi = 0$ aux bords

On peut voir que les polaritons diffusent vers les hautes températures et on remarque qu'il y a deux régimes d'écoulement des polaritons : en basse température leur vitesse est inférieure à celle du son, on a donc un superfluide de polaritons alors qu'aux hautes températures on observe un fluide supersonique de polaritons. Dans le cas où il n'y a ni pompage, ni pertes, pour les paramètres ci dessus, la norme du vecteur d'onde varie de moins de 1% sur les 20ps de la simulation, ce qui est tout à fait raisonnable.

4 Conclusion

Les résultats obtenus pour la simulation sont satisfaisants par leur qualité (pour peu que l'on choisisse correctement les paramètres de la simulation) et sont très instructifs : ils suggèrent que les polaritons d'un condensat situé dans un gradient de température diffusent avec une vitesse relativement importante vers les zones de hautes températures. Ce comportement est très intéressant car il permettrait d'étudier expérimentalement les fluides quantiques de polaritons condensés par pompage non résonant.

D'un point de vue plus pratique, ce stage m'a aussi permis de me familiariser avec Latex, Matlab et Mathematica.

Outre l'aspect simulation numérique, j'ai eu l'opportunité au cours de ce stage d'entrevoir la réalité du monde de la recherche, par delà les préjugés et les opinions préconstruits. L'ambiance au sein du laboratoire et la dynamique intellectuelle qui y règnent m'ont favorablement impressionnés et me confortent dans l'idée que c'est dans cet environnement que je souhaiterais évoluer. Je suis également séduit par l'indépendance dont bénéficient les chercheurs quant à leur organisation, bien que celle ci demande nécessairement beaucoup de rigueur et de discernement :

il faut garder son cap et éviter de se perdre dans l'incommensurable quantité de savoir accessible mais non nécessaire pour la poursuite d'un projet ; c'est là le prix de l'efficacité. Ce stage m'a également conforté dans l'idée que peut importe le domaine de la physique dans lequel je serai amené à continuer mes études, il m'y sera possible de m'épanouir tant la démarche scientifique stimule sans cesse la curiosité.

5 Bibliographie

1. S.Pigeon : Fluides Quantiques et Dispositifs à Polaritons (2011) thèse Université Paris 7
2. Advances in small lasers Martin T. Hill, Malte C. Gather Nature Photonics 8, 908-918 (2014)
3. M.Wouters and I.carusotto, Phys. Rev. Lett. 99, 140402 (2007)
4. M.Wouters, I.carusotto and C.Ciuti, Phys. Rev. B. 77, 115340 (2008)
5. T.Guillet et C.Brimont Polaritons condensates at room temperature C.R. Physique 17 (2016) 946-956
6. R.Hauschild et al., Phys. Stat. Sol. 3, No. 4, 976-979 (2006)