Schémas en temps pour le couplage des équations de Maxwell dans des milieux matériels complexes

Brigitte BIDÉGARAY-FESQUET, Laboratoire Jean Kuntzmann - Grenoble
Clément JOURDANA, Laboratoire Jean Kuntzmann - Grenoble

Nous nous intéressons à l'étude numérique de l'interaction laser-matière pour des microstructures quantiques insérées dans un milieu dispersif. L'objectif est double : déterminer en quoi les microstructures quantiques modifient les propriétés dispersives du matériau sous-jacent et notamment leurs fréquences de résonance, et aussi comprendre en quoi le matériau dispersif affecte l'évolution temporelle des états dans les microstructures quantiques. Les fréquences d'intérêt se trouvant modifiées, il est particulièrement utile dans ce cas là d'adopter une approche dans le domaine temporel, qui a l'avantage de ne pas présupposer les fréquences qui entrent en jeu dans l'interaction.

Pour cela, nous considérons un système de Maxwell dans le domaine temporel et dans lequel le champ de déplacement électrique contient la contribution de deux champs de polarisation, $\mathbf{P}_{\mathrm{md}}$ et $\mathbf{P}_{\mathrm{sq}}$, respectivement induits par le matériau dispersif et les structures quantiques. D'une part, la polarisation $\mathbf{P}_{\mathrm{md}}$ est exprimée *via* la susceptibilité électrique χ par

$$\mathbf{P}_{\mathrm{md}} = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{t} \chi(\mathbf{r}, t-t')\mathbf{E}(\mathbf{r}, t')\ dt'$$

en utilisant les modèles de Debye ou de Lorentz. D'autre part, la polarisation quantique $\mathbf{P}_{\mathrm{sq}}$ s'exprime comme

$$\mathbf{P}_{\mathrm{sq}}(\mathbf{r}_j, t) = N_a Tr(\mathbf{p}_j \rho_j(t)),$$

où la j-ième microstructure est située au point $\mathbf{r}_j$ et est décrite par son moment dipolaire $\mathbf{p}_j$ et sa matrice de densité ρ_j. Enfin, ρ_j est solution de l'équation de Bloch

$$i\hbar\partial_t\rho_j = [\mathcal{H}(\mathbf{r}_j, t), \rho_j(t)] + Q(\rho_j(t)),$$

où l'hamiltonien $\mathcal{H}$ dépend du champ électrique $\mathbf{E}$.

La discrétisation temporelle a été étudiée avec l'une ou l'autre polarisation [1, 2]. L'idée de ce travail est de considérer les deux ensemble. Nous considérons une discrétisation par différences finies dans le domaine temporel et définissons des grilles décalées appropriées dans l'espace et le temps pour gérer le couplage entre les trois modèles différents. Une question importante pour le couplage est de choisir entre discrétisation de la polarisation $\mathbf{P}$ ou de sa dérivée temporelle $\partial_t\mathbf{P}$. Les schémas que nous proposons ont l'avantage de préserver les propriétés de positivité de la matrice densité et de découpler les équations. En deux dimensions d'espace, on observe un couplage plus important des équations, ce qui a des répercutions sur le découplage optimal que l'on peut espérer dans la discrétisation en temps.

[1] B. Bidégaray. *Time discretizations for Maxwell–Bloch equations.* Numerical Methods for Partial Differential Equations, **19(3)**, 284–300, 2003.

[2] B. Bidégaray-Fesquet. *Stability of FD–TD schemes for Maxwell–Debye and Maxwell–Lorentz equations.* SIAM Journal on Numerical Analysis, **46(5)**, 2551–2566, 2008.

Contact : `Brigitte.Bidegaray@univ-grenoble-alpes.fr`