Physique Mésoscopique Bhasidne Mésoscopidne

Alexandre Blais

Département de Physique Université de Sherbrooke Hiver 2016

Table des matières

1	Concepts importants en physique mésoscopique		
	1.1	Introduction et grandeurs importantes	4
	1.2	Gaz électronique bidimensionnel (2DEG)	5
	1.3	Confinement latéral dans les 2DEGs	9
	1.4	Retour sur les grandeurs importantes	10
	1.5	Matrice densité et enchevêtrement	14
	1.6	Densité spectrale et fonction d'autocorrélation	19
		1.6.1 Théorème de Wiener-Khinchin	21
	1.7	Référentiel tournant et approximation séculaire	22
	1.8	Règle d'or de Fermi et représentation d'interaction	24
2	Trai	nsport balistique	27
	2.1	Motivation expérimentale	27
	2.2	Conducteurs mésoscopiques et contacts sans réflexion	27
	2.3	Formule de Landauer : approche simple	28
	2.4	Matrice de diffusion	29
		2.4.1 Définition de la matrice de diffusion	29
		2.4.2 Propriétés de la matrice de diffusion	31
	2.5	Formule de Landauer : Opérateur courant	32
		2.5.1 États diffusés et opérateurs de créations et d'annihilations fermioniques	32
		2.5.2 Opérateur courant	34
		2.5.3 Courant moyen : formule de Landauer	36
		2.5.4 Résistance de contacts	37
		2.5.5 Effet de la température et de la géométrie	38
		2.5.6 Point de contact quantique et détection de charge	38
		2.5.7 États de bords	38
		2.5.8 Généralisation à plusieurs contacts : formule de Landauer-Büttiker	38
		2.5.9 Effet Aharonov-Bohm	42
	2.6	Fluctuations de courant	43
		2.6.1 Bruit à l'équilibre	45
		2.6.2 Bruit de grenaille (Shot noise)	46
		2.6.3 Cas général avec $T_n(E) = T_n$	47
3	Bloc	cage de Coulomb	49
	3.1	Boîte à un électron, SET	49
		3.1.1 Boite à un électron	50
		3.1.2 SET	52
	3.2	Modèle orthodoxe	54
		3.2.1 Hamiltonien tunnel	54
		3.2.2 Effet tunnel séquentiel	56
		3.2.3 Équation maîtresse	61
4	Circ	cuits électriques et fluctuations quantiques	66
	4.1	Jonction Josephson	66

 6.2 Qubits supraconducteurs		77 77 78 79		
 6.2 Qubits supraconducteurs	· · · · ·	77 77 78		
6.2 Qubits supraconducteurs 6.2.1 Fluxonium	· · · · ·	77 77 77		
6.2 Qubits supraconducteurs		77		
		, ,		
6.1 Oubits de spin		77		
Qubits mésoscopiques				
5.5 Formalisme <i>input-output</i>		76		
5.4 Représentations d'espace de phase		76		
5.3 Formule de régression quantique		73		
5.2 Forme Lindbladienne de l'équation maîtresse		70		
5.1 Équation maîtresse de Born-Markov		68		
Équation maîtresse et éléments d'optique quantique				
4.3 Modèle de Caldeira-Leggett		66		
4.2 Théorie des circuits électriques		66		
5	 4.2 Théorie des circuits électriques	 4.2 Théorie des circuits électriques		

1.1 Introduction et grandeurs importantes

Selon la loi d'Ohm, la conductance dc $G = R^{-1}$ d'un conducteur est proportionnelle à son aire A et inversement proportionnelle à sa longueur L

$$G = \frac{\sigma A}{L},\tag{1.1}$$

où σ est la conductivité du matériel (une propriété indépendante des dimensions). Est-ce que ce résultat, qui provient de la mécanique classique, reste valide lorsque les dimensions A et L sont réduites ? Lorsque le système atteint la taille typique d'un atome, on s'attend évidemment à ce que la description classique ne s'applique plus. Mais qu'en est-il des dimensions intermédiaires ? On peut en fait s'attendre à ce que la quantification des niveaux d'énergie due au confinement et l'interférence quantique deviennent importantes et modifient le comportement du transport électronique et donc l'Éq. (1.1). Mais A et L doivent être petits par rapport à quelles grandeurs caractéristiques pour que ces effets quantiques soient importants ?

Répondre à ces questions occupera une partie de ce cours de physique mésoscopique. On verra qu'un conducteur n'a pas un comportement ohmique si ses dimensions sont *inférieures* à

- La longueur de de Broglie $\lambda = h/mv$, où *m* et *v* sont respectivement la masse et la vitesse des porteurs. En deçà de cette longueur caractéristique, les effets de confinement quantique deviennent importants.
- Le libre parcours moyen L_m , qui est la distance moyenne parcourue par un électron avant de voir son impulsion être changée par une collision. Si la longueur du conducteur est inférieure à cette longueur caractéristique, il traversera le conducteur de façon balistique, sans collision. Ceci est en opposition au régime diffusif $L > L_m$ qui caractérise l'Éq. (1.1).
- La longueur de déphasage L_{φ} , qui correspond à la distance moyenne parcourue par un porteur avant que sa phase initiale soit perdue.

Comme le résume le Tableau 1.1, ces trois longueurs varient grandement d'un matériau à l'autre. En raison de la très petite longueur de de Broglie dans les métaux, il est plus facile d'observer les effets de confinement dans les semi-conducteurs à très hautes mobilités et en particulier dans les gaz électroniques bidimensionnels (2DEG, pour *two dimensional electron gaz*). Un grand nombre

Dimensions	Grandeurs caractéristiques et systèmes
1 mm – 100 μm	L_m dans le régime Hall quantique
100 μm – 10 μm	L_m et L_{φ} dans les semi-conducteurs à grande mobilité (à $T \leq 4$ K)
100 nm – 10 nm	Taille des dispositifs semi-conducteurs commerciaux
100 nm – 10 nm	Longueur de de Broglie dans les semi-conducteurs (puisque $m^* \ll m_e$)
100 nm – 10 nm	L_m dans les films métalliques polycristallins
1 nm – 1 Å	Longueur de de Broglie dans les métaux (puisque $m^* \sim m_e$)
1 nm – 1 Å	Distance typique entre les atomes

TABLE 1.1: Grandeurs caractéristiques en physique méscopique. Adapté de Ref. [1].



FIGURE 1.1: a) Un 2DEG est formé près de l'interface entre une couche de AlGaAs et une couche de GaAs. b) Diagramme de bandes avant contact entre les couches. c) Diagramme de bandes après équilibration.

d'expériences en physique mésoscopique sont donc conduites sur des 2DEGs et on survolera leurs principales caractéristiques à la section suivante.

On verra au chapitre 2 que, en deçà de ces longueurs caractéristiques, les détails du transport ne dépendent plus de la composition atomique, ni même de la taille des structures. Dans les bonnes conditions, on verra donc des comportements similaires pour des structures ne comptant que quelques atomes, ou des milliards d'atomes. Dans certaines circonstances, le transport peut toutefois être grandement modifié dans les petites structures. En effet, une petite structure aura une petite capacité *C* et donc une grande énergie électrostatique $E_C = e^2/2C$. Lorsque le coût énergétique E_C à l'ajout d'un électron est grand, le transport peut être grandement modifié, jusqu'à être complètement bloqué. Il s'agit du blocage de Coulomb que l'on étudiera au chapitre 3.

1.2 Gaz électronique bidimensionnel (2DEG)

La plupart des expériences sur les semi-conducteurs en physique mésoscopique sont réalisées sur des hétérostructures de GaAs-AlGaAs, illustrées à la Fig. 1.1a). Dans ces structures, une couche essentiellement unidimensionnelle d'électrons est formée près de l'interface entre le GaAs et le AlGaAs. On comprend ceci en s'intéressant à la structure de bande de ces matériaux. La Fig. 1.1b) présente la situation avant transfert de charges entre les deux semi-conducteurs. Le gap du AlGaAs est plus grand que celui du GaAs. De même, on prendra le AlGaAs de type n et le GaAs de type p. L'énergie de Fermi du AlGaAs est donc près de la bande de conduction tandis que celui du GaAs est plus près de la bande de valance

Lorsque ces semi-conducteurs sont mis en contact, des électrons passeront donc du AlGaAs au GaAs, laissant une zone chargée positivement derrière eux. Cette région chargée positivement donne lieu à un potentiel électrostatique causant une courbure des bandes. À l'équilibre, l'énergie de Fermi est la même partout. Tel qu'illustré à la Fig. 1.1c, en raison de la courbure des bandes la densité d'électrons augmente rapidement près de l'interface et l'énergie de Fermi se trouve dans la bande de conduction dans une mince région de l'espace. Il se forme alors une couche essentiellement unidimensionnelle d'électrons, le 2DEG.

Mobilité Il y a plusieurs excellentes raisons qui font des 2DEGs l'un des systèmes de choix pour l'étude de la physique mésoscopique. Une d'entre elles est le très faible taux de diffusion dans ces structures ou, autrement dit, le libre parcours moyen L_m . À basse température, la *mobilité* est une mesure directe de l'effet des impuretés et des défauts sur le temps de relaxation de l'impulsion τ_m , relié à la L_m . En effet, à l'équilibre, les porteurs se déplacent aléatoirement, ne causant aucun courant net. En présence d'un champ électrique E, ceux-ci acquièrent une vitesse de dérive v_d dans la direction de la force -eE.

Afin de relier la vitesse de dérive au champ électrique, on note qu'à l'équilibre le taux auquel les électrons gagnent de l'impulsion due au champ électrique est égal au taux auquel ils perdent de l'impulsion due à la diffusion sur les impuretés

$$\left. \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \right|_{\text{Diffusion}} = \left. \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \right|_{\text{Champ } \boldsymbol{E}}.$$
(1.2)

Mais, dp/dt = -eE pour le champ électrique. Pour la diffusion, on prendra $p = mv_d$, avec v_d la vitesse de dérive, et τ_m le temps de relaxation de l'impulsion comme temps caractéristique. On peut alors écrire

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt}\Big|_{\text{Diffusion}} \sim \frac{m\boldsymbol{v}_d}{\tau_m} = -e\boldsymbol{E} \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{v}_d = -\frac{e\tau_m}{m}\boldsymbol{E}.$$
(1.3)

La mobilité est définie comme le ratio entre la vitesse de dérive et le champ électrique

$$\mu \equiv \left| \frac{\boldsymbol{v}_d}{\boldsymbol{E}} \right| = \frac{\boldsymbol{e}\tau_m}{m}.$$
(1.4)

Tel qu'illustré à la Fig. 1.2, dans les semi-conducteurs, τ_m et donc μ augmentent avec une diminution de la température pour éventuellement être dominés par les défauts. Ces défauts sont causés par les dopants qui causent un potentiel aléatoire pour les électrons et par les interfaces qui peuvent être imparfaites. Par exemple, dans un transistor typique fabriqué par Intel, la mobilité se trouve entre 10 et 100 cm²/Vs. Comme on peut le constater à la Fig. 1.2, les hétérostructures de AlGaAs/GaAs utilisées pour les expériences de physique mésoscopique ont toutefois des mobilités beaucoup plus grandes. Ceci est rendu possible par l'utilisation de l'épitaxie par jet moléculaire (MBE, pour Molecuar Beam Epitaxy), une technique qui permet de créer couche atomique par couche atomique des semi-conducteurs de très grandes qualités. Grâce à cette technique, l'interface entre le AlGaAs et le GaAs est presque atomiquement parfaite et contribue peu à la réduction de la mobilité. De même, plutôt que la structure simple de la Fig. 1.1a, ces hétérostructures sont fabriquées à l'aide de plusieurs couches de semi-conducteurs



FIGURE 1.2: Mobilité d'un 2DEG dans le GaAs obtenu par croissance MBE en fonction de la température et pour différentes années. Figure adaptée de la Réf. [2].

choisis de sorte que le 2DEG se trouve à être dans une région de GaAs non dopée. Les électrons sont donc éloignés du potentiel aléatoire des dopants, augmentant du coup la mobilité. En pratique, des mobilités d'environ 2×10^6 cm²/Vs sont obtenues commercialement. Quelques groupes se spécialisant en croissance par MBE sont capables d'atteindre des mobilités de l'ordre de 10^7 cm²/Vs. Pour ces échantillons, le libre parcours moyen L_m peut être aussi grand que ~ 100 μ m. Il est de même typique d'avoir $L_{\varphi} \sim 2L_m$, reflétant le fait qu'un changement d'impulsion n'affecte pas nécessairement la phase des électrons. Il est possible à l'aide des techniques de micro fabrication moderne de créer des structures qui sont de tailles inférieures à ces grandeurs caractéristiques plaçant du coup le système dans le régime balistique et dans une situation où la cohérence de phase est importante.

Fonctions d'onde du gaz d'électrons (*) Afin d'avoir une description simple des électrons dans le 2DEG, on commence par remarquer que la fonction d'onde dans ce système est découplée en z et r = (x, y), en d'autres mots $\Psi(r, z) = \chi(z)\psi(r)$. On supposer aaussi que toutes les grandeurs caractéristiques du problème sont plus grandes que la distance interatomique. On utilisera donc l'approximation de la masse effective, où la masse m^* des porteurs est reliée à la courbure des bandes $m^* = \hbar^2 (d^2 E / dk^2)^{-1}$.

Les électrons ne sont pas confinés dans le plan xy et $\psi(r)$ correspondent donc à une onde plane. Telle qu'illustrée à la Fig. 1.3, une bonne approximation pour le potentiel de confinement est un potentiel triangulaire selon l'axe z. On a donc comme potentiel

$$U(z) = \begin{cases} \beta z & z > 0\\ \infty & z \le 0, \end{cases}$$
(1.5)

L'équation aux valeurs propres de l'Hamilto- premières fonctions d'onde. nien dans la direction z s'écrit donc



FIGURE 1.3: Approximation triangulaire au potentiel où β est caractéristique de la pente du potentiel. de confinement du 2DEG et module carré des trois

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + U(z)\right)\chi(z) = E\chi(z) \quad \Rightarrow \quad \chi''(z) - \zeta\chi(z) = 0, \tag{1.6}$$

avec $\zeta = (z - E/\beta)/l_B^3$ où $l_B = (2m^*\beta/\hbar^2)^{-1/3}$ joue le rôle de grandeur caractéristique de localisation des électrons dans la direction z. La solution à cette équation est bien connue et prend la forme des fonctions de Airy $Ai(l_B^2\zeta)$. De même, puisque la fonction d'onde s'annule nécessairement en z = 0, on a que $Ai(l_B^2 \zeta|_{z=0}) = 0$. Les énergies propres E_n sont donc proportionnelles aux zéros ζ_n de $Ai(\zeta) : E_n = -E_0 \zeta_n$ avec $E_0 = (\hbar^2 \beta^2 / 2m^*)^{1/3}$. Le module carré des trois premières fonctions d'onde est illustré à la Fig. 1.3.

En tenant compte de l'énergie des ondes planes dans le plan xy, l'énergie d'un niveau prend donc la forme

$$E_{nk} = -E_0 \zeta_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},\tag{1.7}$$

avec $k^2 = k_x^2 + k_v^2$. Chacun des niveaux *n* correspond donc à une sous-bande, ayant une dépendance en k. Si la température est basse et densité électronique faible, seule la première sous-bande n = 1est occupée. Cette situation est difficile à réaliser dans les métaux où la densité électronique est grande et donc plusieurs sous-bandes occupées. Dans les 2DEGs toutefois, la densité est plus faible (et comme on le verra peut être modulée) de sorte qu'une seule sous-bande est pertinente. On laissera donc tomber l'indice n à partir de maintenant.

L'expression pour E_{nk} ne comporte pas toutes les contributions importantes à l'énergie. En effet, au potentiel U(z) de l'Éq. (1.6), on devrait introduire l'énergie du bas de la bande de conduction $E_c(z)$, ainsi que sa possible dépendance en z. Nous devrions aussi tenir compte du potentiel dû aux donneurs et de l'interaction entre électrons. Comme il sera discuté dans le cours de Physique du Solide, il est possible de traiter ces interactions comme une renormalisation du potentiel à un corps U(z). Ceci correspond à l'approximation de Hartree. Il est donc possible de tenir compte des interactions dans le présent formalisme. Nous pourrions aussi tenir

compte de la présence d'un champ magnétique externe et de la taille finie de l'échantillon dans le plan xy, correspondant essentiellement à un potentiel de confinement U(x, y) supplémentaire. On parlera de ces deux dernières contributions lorsque nous aborderons le concept d'états de bords en effet Hall quantique au prochain chapitre. De façon générale, mais négligeant ces deux dernières contributions, on peut écrire l'énergie de la première sous-bande comme $E = E_s + \hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)/2m^*$, avec E_s la somme des contributions autres que celle correspondant aux ondes planes. Une coupe de cette énergie est illustrée FIGURE 1.4: Diagramme d'énergie de la preà la Fig. 1.4. La sous-bande est remplie jusqu'au niveau mière sous-bande. de Fermi E_F .



On cherche maintenant à obtenir une expression simple pour la densité électronique dans le système. Pour ce faire, on débute par discuter de la densité d'états en 2D et de la distribution de Fermi.

Densité électronique et distribution de Fermi La densité d'états N(E) est définie comme

$$N(E) = 2\sum_{n,k_x,k_v} \delta(E - E_{nk})$$
(1.8)

avec E_{nk} donnée à l'Éq. (1.7). Avec cette définition, la quantité N(E)dE correspond au nombre d'états dans l'intervalle d'énergie [E, E + dE]. Le facteur 2 tient compte de la dégénérescence de spin. En profitant de la symétrie dans le plan xy, on passe d'une somme double à une intégrale sur *k* pour obtenir¹

$$N(E) = 2 \sum_{n} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y \delta\left(E - E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)$$

= $2 \sum_{n} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk \, k \, \delta\left(E - E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)$
= $\sum_{n} \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_n).$ (1.9)

^{1.} Pour obtenir ce résultat, on utile la propriété du delta de Dirac qui veut que $\delta(g(x)) = \sum_i \delta(x - x_i)/|g'(x_i)|$, où les x_i sont les racines de g(x).



FIGURE 1.5: a) Création d'une constriction à l'aide de grilles métalliques déposées en surface. Un champ électrique négatif appliqué sur les grilles repousse les électrons du 2DEG. b) Représentation schématique de la constriction dans le 2DEG. Les pointillés indiquent la position des grilles. Les zones grisées contiennent des électrons tandis que ceux-ci ont été expulsés des zones en blanc.

La densité d'électrons n_s est obtenue en intégrant ce dernier résultat avec la distribution de Fermi

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_BT} + 1}$$
(1.10)

qui spécifie essentiellement si les états sont remplis ou non. On a donc

$$n_s = \int_0^\infty dEN(E)f(E). \tag{1.11}$$

En principe, le potentiel chimique μ devrait prendre la place de E_F dans cette dernière expression. Toutefois, à basse température $\mu \approx E_F$. Les expériences de physique mésoscopique étant réalisées à basse température, c'est cette approximation que l'on utilisera toujours dans ce cours. De même, à basse température $f(E) \approx \theta(E_F - E)$ et la densité électronique en 2D devient

$$n_s \approx \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty dE \theta(E - E_s) \theta(E_F - E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} (E_F - E_s)$$
(1.12)

où l'on a considéré qu'une seule sous-bande est occupée. Notons que l'on parle de *gaz d'électrons dégénérés* pour cette situation à basse température. Dans un 2DEG typique, la densité typique de porteurs par centimètre carré est $2 \times 10^{11-12}$ /cm². Pour un métal, on a plutôt des densités de l'ordre de 10^{19} /cm² (ie 10^{29} /m³).

À basse température, la conduction est entièrement déterminée par les électrons d'énergie s'approchant de E_F . L'énergie de ces électrons est $E_F = E_s + \hbar^2 k_F^2/2m^*$, où l'on a introduit le vecteur d'onde de Fermi k_F . On peut réécrire cette dernière quantité sous la forme plus utile $k_F = \sqrt{2m^*(E_F - E_s)/\hbar^2} = \sqrt{2\pi n_s}$. De même, on peut écrire la vitesse de Fermi en terme de n_s comme $v_F = \hbar k_F/m^* = \hbar \sqrt{2\pi n_s}/m^*$.

1.3 Confinement latéral dans les 2DEGs

La densité électronique est choisie à la fabrication en ajustant la quantité de dopants. Il est aussi possible de moduler cette densité localement à l'aide de potentiels électrostatiques. La situation est illustrée schématiquement à la Fig. 1.5. Des grilles sur lesquelles est appliqué un voltage négatif



FIGURE 1.6: Vue de dessus des grilles formant un point quantique simple (a) et double (c) dans un 2DEG. Les cercles illustrent approximativement les régions où les électrons sont confinés dans toutes les directions. Figures gracieusetés de Michel Pioro-Ladrière et Julien Camirand.

sont déposées sur le AlGaAs. La Fig. 1.5b) montre une vue dessus du gaz électronique. Le gaz 2D d'électrons, initialement de densité constante (région grisée), peut voir sa densité être réduite à proximité des grilles qui sont illustrées par les traits pointillés. La zone en blanc sur cette figure illustre une région où la densité électronique est nulle.

De cette façon, il est possible de créer une région plus petite que les grandeurs caractéristiques discutées plus tôt, et ce dans toutes les directions de l'espace. Au chapitre 2, on s'intéressera au transport à travers une telle structure. Nous verrons alors que la conductance ne se comporte pas comme le prédit le résultat classique prédit par l'Éq. (1.1), mais montrera plutôt des plateaux en fonction de la largeur *W* du canal de conduction et donc, en pratique, en fonction du voltage négatif appliqué sur les grilles électrostatiques. Il est de même possible de choisir l'arrangement des grilles de façon à confiner les électrons dans toutes les directions de l'espace. Une telle structure 0D, connue sous le nom de point quantique, est illustrée à la Fig. 1.6. Comme on le verra aux chapitres 3 et 6, il est possible d'ajuster les grilles de ce dispositif de façon à ce qu'il n'y ait qu'un seul électron dans le point. Dans cette situation, le spin de l'électron peut jouer le rôle de qubit pour le calcul quantique.

1.4 Retour sur les grandeurs importantes

Longueur d'onde de *Broglie* λ À basse température, le transport est principalement dû aux électrons d'énergie $E \sim E_F$. La longueur d'onde pertinente est donc la longueur d'onde de Fermi

$$\lambda_F = 2\pi/k_F = \sqrt{2\pi/n_s},\tag{1.13}$$

avec n_s la densité électronique donnée à l'Éq. (1.12).

Libre parcours moyen L_m Dans un cristal idéal, la résistance est nulle. Un électron se déplaçant en effet comme dans le vide, mais avec une masse différente. En pratique, la présence d'impuretés, phonons et autres défauts conduit à des collisions changeant l'impulsion des électrons et les diffusant.

 L_m est relié à τ_m , le temps de relaxation de l'impulsion lui-même relié à la mobilité $\mu = e\tau_m/m^*$. On peut écrire τ_m sous la forme

$$\frac{1}{\tau_m} = \frac{\alpha_m}{\tau_c},\tag{1.14}$$

où τ_c est le temps typique entre les collisions et FIGURE 1.7: Collision changeant l'impulsion d'un por- $\alpha_m \in [0,1]$ est relié à l'efficacité des collisions à teur. changer l'impulsion des porteurs. Par exemple,

et tel qu'illustré à la Fig. 1.7, si les collisions sont telles que l'angle de la trajectoire des électrons n'est que peu perturbé, alors α_m s'approche de zéro.

Le libre parcours moyen est la distance qu'un électron parcourt avant que son impulsion initiale soit changée et, puisqu'entre chaque collision l'électron se déplace à la vitesse de Fermi v_F ,

$$L_m = v_F \tau_m. \tag{1.15}$$

Par exemple, pour $n_s \sim 5 \times 10^{11}$ /cm², on a

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} = \frac{\hbar}{m^*} \sqrt{2\pi n_s} \sim 3 \times 10^7 \text{ cm/s.}$$
 (1.16)

Pour un 2DEG de mobilité $\mu \sim 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ on trouve $\tau_m \sim 0.4 \text{ ns.}$ Étant donné que la masse effective dans le GaAs est $m^* = 0.067 m_e$, avec m_e la masse de l'électron libre, le libre parcours moyen parcours peut être aussi grand que $\sim 115 \mu \text{m}$. Avec les techniques de microfabrication, il est facile d'avoir des échantillons de cette taille et donc où des effets 'mésoscopiques' seront importants.

On pourrait penser que la résistance mesurée sur un échantillon de taille inférieure à L_m est nulle. On verra au prochain chapitre que ce n'est pas le cas. On montrera en effet que la résistance prend une valeur qui est un multiple entier de $R_K = h/2e^2$, le quantum de résistance.

Longueur de déphasage L_{φ} Avant de discuter de la longueur de déphasage L_{φ} , il est utile d'introduire le temps de déphasage τ_{φ} . On parlera aussi de façon équivalente de temps de décohérence. De la même façon que pour τ_m , on définit

$$\tau_{\varphi}^{-1} = \frac{\alpha_{\varphi}}{\tau_c},\tag{1.17}$$

où α_{φ} est l'efficacité des collisions à changer la phase.

On peut comprendre le concept de déphasage en considérant l'expérience des fentes de



Young, ou son analogue électronique étudié en physique mésoscopique et illustré à la Fig. 1.8. On injecte des électrons de la gauche et mesure le courant à la droite. Comme on le verra plus tard, la phase relative accumulée par les électrons lors du passage à travers l'interféromètre dépend du



flux magnétique à l'intérieur de la boucle. En raison de l'interférence constructive et destructive des ondes électroniques, le courant présente donc des franges d'interférence en fonction de ce flux.

En présence de collisions changeant la phase des électrons lors de leur passage à travers l'interféromètre, l'amplitude des franges d'interférence, aussi appelée visibilité, est réduite par un facteur $\exp(-t_t/\tau_{\varphi})$, où t_t est le temps de transit à l'intérieur de l'interféromètre. Mais quel type de diffuseurs peuvent causer une telle réduction, et donc avoir $\alpha_{\varphi} \neq 0$? On considère ici trois classes :

- A Défauts statiques dans les branches de l'interféromètre. Dans cette situation, les branches ne sont plus identiques et il n'y a pas nécessairement interférence constructive là où il en aurait sans défauts. Toutefois, puisqu'il existe une relation de phase stable entre les deux branches, il y a toujours un patron d'interférence, ce dernier n'étant que décalé par rapport à la situation sans défauts. Les défauts statiques ne causent donc pas de décohérence, $a_{\varphi}^{\text{statique}} = 0$.
- **B** Diffuseurs dynamiques. Un exemple est l'interaction électron-phonon. Dans cette situation, la relation de phase varie aléatoirement dans le temps. Puisque le patron d'interférence est en pratique la moyenne sur un grand nombre d'électrons ayant traversé la structure, ces fluctuations ont pour effet de diminuer l'amplitude des franges d'interférence. Évidemment, avant d'arriver à cette conclusion, on doit comparer l'échelle de temps caractéristique des fluctuations avec le temps pendant lequel la moyenne du courant se construit dans l'expérience. Notons que dans cette situation, une connaissance détaillée de ces diffuseurs dynamiques et de leur interaction avec les électrons nous permettrait de corriger cette accumulation de phase supplémentaire. La diminution de la visibilité n'est donc pas quelque chose de fondamental, mais une simple conséquence du moyennage expérimentalement requis.
- C Diffuseurs ayant un degré de liberté interne. Lors d'une collision, ce type de diffuseur peut changer d'état. Imaginons, par exemple, q'une impureté ayant un spin 1/2 étant initialement dans l'état |↑⟩ se retrouve dans l'état |↓⟩ suite à la collision avec un électron. Si cette impureté se trouve dans la branche du bas, ce changement d'état du système électron-impureté peut être exprimé comme

$$(|\#1\rangle + |\#2\rangle) \otimes |\uparrow\rangle \longrightarrow |\#1\rangle|\uparrow\rangle + |\#2\rangle|\downarrow\rangle, \tag{1.18}$$

où #1 (2) correspond à l'électron empruntant la branche du haut (bas) et où on a omis la normalisation. L'état final est un état enchevêtré. Ainsi, une mesure de l'état du spin nous informe sur le chemin emprunté par l'électron, détruisant nécessairement l'interférence. Même sans mesure du spin, on note que le terme d'interférence relié à $\langle #1|#2 \rangle$, se voit être modifié par un facteur $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0$ correspondant à une atténuation complète de la visibilité. En pratique, la visibilité peut être réduite sans complètement disparaitre si les états du spin après interaction avec l'électron ne sont pas orthogonaux. Nous formaliserons cette discussion à la prochaine section.

Ainsi, un diffuseur statique ne cause aucune réduction de la visibilité, seulement un déplacement du patron d'interférence. Un diffuseur dynamique cause une diminution de la visibilité en raison du moyennage. En principe, cette diminution peut être réduite en réduisant le temps de moyennage ou en obtenant plus d'information sur la dynamique du diffuseur. Finalement, un diffuseur s'enchevêtrant avec les électrons cause aussi une réduction de la visibilité. Cette réduction peut être comprise par le fait que, suite à l'interaction, une mesure de l'état du diffuseur nous informerait sur le chemin emprunté par l'électron. Un tel déphasage ne peut être renversé (à moins de pouvoir faire des manipulations complexes sur l'état du diffuseur). Ceci est un exemple du lien entre l'acquisition d'information et le déphasage. Nous reviendrons sur ceci plus loin.

Revenons maintenant à la longueur de déphasage L_{φ} . Dans la situation où le temps de relaxation de l'impulsion est plus grand que le temps de déphasage $\tau_m \ge \tau_{\varphi}$, la vitesse des porteurs entre chaque événement changeant la phase est v_F et par conséquent

$$L_{\varphi} = v_F \tau_{\varphi}. \tag{1.19}$$

Dans certaine situation, on peut toutefois avoir $\tau_{\varphi} \gg \tau_m$. Il peut donc y avoir plusieurs collisions à l'intérieur du temps de déphasage. Le transport n'étant pas balistique, la vitesse de Fermi n'est pas la bonne pour déterminer L_{φ} . En effet, après τ_m , la direction de propagation est complètement aléatoire et donc $\langle L_{\varphi} \rangle = 0$. Puisque cette valeur moyenne est nulle, on calcule plutôt la grandeur rms de L_{φ} . On détermine cette quantité en notant que, pendant un temps τ_{φ} , l'électron suit $\sim \tau_{\varphi}/\tau_m$ parcours chacun de distance $\sim \tau_m v_F$. Ces petits parcours ont une direction θ aléatoire. Si l'on s'intéresse à la distance parcourue selon la direction des *x*, on a donc

$$\langle L_{\varphi}^2 \rangle \sim \frac{\tau_{\varphi}}{\tau_m} \times (v_F \tau_m)^2 \langle \cos^2 \theta \rangle.$$
 (1.20)

Puisque

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos^2 \theta = 1/2, \qquad (1.21)$$

la valeur rms de L_{φ} dans ce cas diffusif est

$$L_{\varphi}^{\rm rms} = \sqrt{\langle L_{\varphi}^2 \rangle} \sim \sqrt{\frac{v_F^2 \tau_m}{2}} \tau_{\varphi} \equiv \sqrt{D \tau_{\varphi}}, \qquad (1.22)$$

où D est le coefficient de diffusion.

Cette discussion nous donne l'occasion de mettre l'emphase sur deux types de transport électronique. Comme illustré à la Fig. 1.9, on distinguera le transport balistique (a) du transport diffusif (b). Dans le premier cas, $L_m \gg$ L, W, où L et W sont respectivement les longueurs et largeurs de l'échantillon, tandis que dans le second cas $L_m \ll L$, W. On peut aussi avoir un cas intermédiaire quasi-ballistique où $W < L_m < L$. Notons aussi que la description en terme de sous-bande des 2DEGs donnée à la section 1.2 est valide si la taille typique de confinement des électrons du 2DEG est inférieurs à L_{φ} . En effet, dans la situation contraire, la cohérence de phase ne peut s'établir et il n'y aura pas quantification des niveaux d'énergie.



FIGURE 1.9: a) Régime balistique : $L_m \gg L$, W. À l'exception des bords de l'échantillon, il n'y a pas de collisions changeant l'impulsion des porteurs. b) Régime diffusif : $L_m \ll L$, W

1.5 Matrice densité et enchevêtrement

Nous avons vu, lors de la discussion concernant les diffuseurs ayant un degré de liberté interne, que l'enchevêtrement d'un système avec son environnement cause une diminution de la visibilité lors d'une expérience d'interférence. Nous avions alors écrit l'état après interaction entre le système et l'environnement sous la forme générique

$$|\Psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle |E_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle |E_2\rangle, \qquad (1.23)$$

où $|\psi_i\rangle$ est un état du système et $|E_i\rangle$ un état de l'environnement. En pratique, nous n'avons pas accès à l'état de l'environnement. Ne ne pouvons en effet que manipuler et mesurer le système. Si ce n'était pas le cas, ce que l'on appelle ici l'environnement devrait plutôt être considéré comme un autre système, lui-même en contact avec un environnement de sorte que l'on ne fait que repousser le problème. Puisqu'aucune prédiction ne peut être faite et vérifiée concernant l'environnement, la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ contient en quelque sorte trop d'information. De même, comme on le verra plus loin, l'environnement étant représenté par un espace d'Hilbert de taille infinie, l'inclure dans les simulations numériques est très difficile. On cherche donc ici à obtenir une description de l'état du système seul à partir de l'état complet $|\Psi\rangle$.

Pour ce faire, il est utile de considérer la mesure d'une observable $M_S \otimes I_E$ agissant seulement sur le système, avec I l'opérateur identité [3]. La valeur moyenne des résultats d'un ensemble de mesures de cette observable sur l'état $|\Psi\rangle$ est

$$\langle \Psi | M_S \otimes \mathbb{I}_E | \Psi \rangle = (c_1^* \langle \psi_1 | \langle E_1 | + c_2^* \langle \psi_2 | \langle E_2 | \rangle (M_S \otimes \mathbb{I}_E) (c_1 | \psi_1 \rangle | E_1 \rangle + c_2 | \psi_2 \rangle | E_2 \rangle)$$

= $|c_1|^2 \langle \psi_1 | M_S | \psi_1 \rangle + |c_2|^2 \langle \psi_2 | M_S | \psi_2 \rangle,$ (1.24)

où l'on a pris $\langle E_i | E_j \rangle = \delta_{ij}$. Il est intéressant de remarquer que cette dernière expression peut aussi s'écrire comme

$$\langle \Psi | M_S \otimes \mathbb{I}_E | \Psi \rangle = \operatorname{Tr}[\rho_S M_S] \tag{1.25}$$

où l'on a défini

$$\rho_{S} = |c_{1}|^{2} |\psi_{1}\rangle \langle \psi_{1}| + |c_{2}|^{2} |\psi_{2}\rangle \langle \psi_{2}|, \qquad (1.26)$$

la matrice densité du système. On peut donner une interprétation à ρ_S en remarquant que l'Éq. (1.24) correspond à ce que l'on obtiendrait comme valeur moyenne de M_S pour un système préparé dans l'état $|\psi_1\rangle$ avec probabilité $|c_1|^2$, et dans l'état $|\psi_2\rangle$ avec probabilité $|c_2|^2$. Puisque cette interprétation est la même peu importe l'observable M_S en jeux, on peut donc voir ρ_S comme décrivant un système quantique pour lequel, en plus de l'incertitude quantique usuelle reliée aux fonctions d'onde ψ_i , il y a une incertitude classique reliée à la préparation même de l'état. Nous ne savons que de façon probabiliste si le système a été préparé dans l'état $|\psi_1\rangle$ ou $|\psi_2\rangle$. L'état ρ_S décrit donc l'état d'un système quantique pour lequel nous avons une description incomplète. C'est en effet le cas puisque la description complète est donnée par $|\Psi\rangle$ et que nous avons ici omis d'inclure l'environnent avec lequel le système est pourtant enchevêtré. La matrice densité est donc un outil utile pour la description partielle d'un système enchevêtré.

Il existe aussi des situations plus simples où une matrice densité est nécessaire afin de décrire l'état d'un système. Imaginons par exemple la situation suivante impliquant un système à deux niveaux d'états notés à nouveau { $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ }. Considérons l'expérience de pensée suivante. Avec probabilité p_1 je prépare l'état $|\psi_1\rangle$, tandis qu'avec probabilité p_2 je prépare l'état $|\psi_2\rangle$. Si je ne vous donne p_1 et p_2 , mais que je ne vous dis pas lequel des états a été préparé, votre meilleure description de l'état de ce système est

$$\rho = p_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|, \qquad (1.27)$$

une matrice densité de la forme Éq. (1.26) et qui tiens compte de votre incertitude (classique) sur l'état qui a effectivement été préparé. Il s'agit de la bonne description du système puisque toutes prédictions que vous pourriez faire concernant la moyenne de mesures d'une observable M sur le système prendraient la forme Éq. (1.24), c'est-à-dire une somme pondérée de valeurs moyennes chacune calculée à l'aide de la formule quantique $\langle \psi_i | M | \psi_i \rangle$. C'est bien ce que nous obtenons à l'aide de l'expression pour ρ et de l'Éq. (1.25) qui prend ici la forme $\langle M \rangle = \text{Tr}[\rho M]$. Imaginons maintenant effectuer sur ce système une mesure dans la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$. Si le résultat est, par exemple, compatible avec $|\psi_1\rangle$, le postulat de mesure de von Neumann nous informe que suite à la mesure le système sera avec certitude dans l'état $|\psi_1\rangle$.

Il est instructif de reprendre cette discussion du point de vue de celui qui a préparé l'état. Pour ce dernier, il n'y avait aucune incertitude quant à l'état préparé dans une répétition donnée de l'expérience (disons $|\psi_1\rangle$ pour fixer les idées) et pour lui la description du système a toujours simplement été $|\psi_1\rangle$. La 'réduction du paquet d'ondes' qui survient lors de la mesure du point de vue de celui qui reçoit l'état ne fait que révéler ce que le préparateur savait déjà. Cet exemple illustre que deux observateurs peuvent avoir une description différente d'un même système quantique et donc y assigner des états différents. Il semble donc que le ket ou la matrice densité décrivant un état quantique ne soit pas une propriété objective du système, mais plutôt le reflet de notre connaissance (imparfaite) de l'état du système. De ce point de vue, la projection de la fonction d'onde lors de la mesure ne correspond qu'à un changement de notre connaissance de l'état du système suite à la mesure et n'est plus très mystérieuse [4].

Revenons à la matrice densité et à certaines de ces propriétés utiles. Pour ce faire, on considérera un exemple un peu plus général avec deux systèmes d'espace de Hilbert \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 de taille quelconque préparé dans un état arbitraire

$$|\psi_{12}\rangle = \sum_{ij} a_{ij} |i_1\rangle |j_2\rangle.$$
(1.28)

Comme ci-haut, la valeur moyenne d'une observable $M_1 \otimes \mathbb{I}_2$ agissant seulement sur le premier sous-système est

$$\langle M_1 \rangle = \langle \psi_{12} | M_1 \otimes \mathbb{I}_2 | \psi_{12} \rangle$$

$$= \sum_{ij} \sum_{i'j'} a_{ij}^* a_{i'j'} \langle i_1 | \langle j_2 | (M_1 \otimes \mathbb{I}_2) | i_1' \rangle | j_2' \rangle$$

$$= \sum_{ii'j} a_{ij}^* a_{i'j} \langle i_1 | M_1 | i_1' \rangle$$

$$= \operatorname{Tr}[\rho_1 M_1],$$

$$(1.29)$$

où

$$\rho_1 = \text{Tr}_2[|\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}|] = \sum_j \langle j_2|(|\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}|)|j_2\rangle = \sum_{ii'j} a_{ij}^* a_{i'j}|i_1'\rangle\langle i_1|$$
(1.30)

est la matrice densité du premier sous-système obtenue de l'état joint $|\psi_{12}\rangle$ à l'aide d'une *trace partielle*, Tr₂[·], sur le second sous-système.

Les propriétés des matrices densités s'obtiennent facilement à partir de la forme générale donnée par l'Éq. (1.30). En effet, on note que ρ_1 est hermétique, $\rho_1^{\dagger} = \rho_1$. De même, pour tout $|\psi\rangle$ dans \mathcal{E}_1 , on note que $\langle \psi | \rho_1 | \psi \rangle = \sum_j |\sum_i a_{ij} \langle \psi | i_1 \rangle|^2 \ge 0$. En d'autres mots, la matrice densité est définie positive. Ces deux propriétés impliquent que la matrice densité est diagonalisable et que ces valeurs propres sont réelles et non-négatives. Pour cette raison, et comme dans les exemples ci-haut, ces valeurs propres peuvent être interprétées comme des probabilités. Finalement, puisque la somme des probabilités doit être l'unité, on a que Tr $[\rho_1] = 1$. Cette dernière propriété correspond à la condition normalisation.

Puisque ρ_1 peut toujours être diagonalisée, on réécrit l'Éq. (1.30) sous sa forme diagonale, c'est-à-dire

$$\rho_1 = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|. \tag{1.31}$$

On remarque que si une seule valeur propre p_{α} est non nulle, alors nécessairement $\rho_1^2 = \rho_1$ et donc Tr $[\rho_1^2] = \text{Tr}[\rho_1] = 1$. Dans cette situation, il n'y a pas d'incertitude classique et on dira qu'il s'agit d'un état pur. Par contre, si plusieurs valeurs propres sont non-nulles on a que Tr $[\rho_1^2] = \sum_{\alpha} p_{\alpha}^2 < 1$ car $p_{\alpha}^2 \in [0, 1]$. On dira alors qu'il s'agit d'un état mixte. La *pureté* p d'un état ρ peut donc être caractérisée par la quantité $p = \text{Tr}[\rho^2]$. Alternativement, la pureté d'un état peut être caractérisée par l'entropie de von Neumann

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}[\rho \log_d \rho] \ge 0 \tag{1.32}$$

où l'égalité est atteinte pour un état pur. On note que le logarithme est pris en base *d* correspondant à la dimension de l'espace de Hilbert en jeux. En pratique, il utile d'exprimer la matrice densité dans la base où elle est diagonale auquel cas l'expression ci-haut prend la forme plus simple $S(\rho) = -\sum_{\alpha} p_{\alpha} \log_d p_{\alpha}$.

Il est intéressant de remarquer que la décomposition sous la forme Éq. (1.31) n'est pas unique. En fait, il existe un nombre infini de façons d'écrire un état mixte à l'aide d'une somme de projecteurs. Considérons par exemple un système à deux niveaux (un qubit) d'états { $|0\rangle$, $|1\rangle$ }. Le mélange statistique uniforme de ces deux états n'est pas distinguable du mélange statistique uniforme des états superposés $|\pm\rangle = (|0\rangle \pm |1\rangle)/\sqrt{2}$. En effet,

$$\rho = \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle \langle -|$$

$$= \frac{1}{2} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle 0| - \langle 1|}{\sqrt{2}}$$

$$= \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1|.$$
(1.33)

Nous nous sommes intéressés jusqu'à présent aux propriétés statiques de la matrice densité. Passons maintenant à la dynamique. L'évolution temporelle d'une matrice densité s'obtient facilement de la règle de chaine et de l'équation de Schrödinger. En effet, en supposant l'état $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ pur afin de simplifier la discussion, on a

$$\begin{split} \dot{\rho} &= |\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= -iH|\psi\rangle\langle\psi|/\hbar + i|\psi\rangle\langle\psi|H/\hbar \\ &= -\frac{i}{\hbar}[H,\rho], \end{split} \tag{1.34}$$

Cette expression, équivalente à l'équation de Schrödinger, est aussi connue sous le nom d'équation de von Neumann. Tout comme la solution de l'équation de Schrödinger peut s'exprimer à l'aide de l'opérateur d'évolution U(t) comme $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$, la solution de l'équation de von Neumann prend la forme $\rho(t) = U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t)$. On montrera au chapitre 5 comment cette équation peut être modifiée afin de tenir compte de la présence d'un environnement en contact avec le système étudié. On verra alors deux comportements typiques, soit la relaxation et le déphasage. Même si on réserve une description détaillée des ces phénomènes à plus tard, il est utile de les définir par des exemples simples dès maintenant.

La relaxation, aussi connue sous le nom d'émission spontanée, correspond au passage spontané du système de son état excité vers son état fondamental, soit $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ pour un système à deux niveaux d'états { $|0\rangle$, $|1\rangle$ }. Si l'on prépare par exemple un atome dans son état excité au temps t = 0, on le verra émettre un photon à un temps t ultérieur. On sait alors que l'atome est passé de l'état $|1\rangle$ à l'état $|0\rangle$. Si l'on répète un grand nombre de fois cette expérience, on verra que, en moyenne, la probabilité d'observer l'atome dans son état excité décroit dans le temps selon une loi exponentielle $\exp(-t/T_1)$, où $T_1 = 1/\gamma_1$ est nommée temps de relaxation et γ_1 le taux de relaxation.

Tel que discuté plus haut, le déphasage pour sa part correspond à la perte de cohérence de phase du système. Ceci peut être compris en considérant l'état pur $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ correspondant à la superposition cohérente des états de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$. La matrice densité associée à cet état pur est

$$\rho_{\rm coh} = |+\rangle\langle+| = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{1.35}$$

où le symbole := signifie qu'il s'agit de la représentation de l'opérateur densité dans une base particulière, ici la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Il est utile de contraster cet opérateur densité à celui correspondant au mélange incohérent des deux états de base :

$$\rho_{\rm incoh} = \frac{1}{2} |0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle\langle 1| := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(1.36)

On remarque que la différence entre la superposition cohérente ρ_{coh} et le mélange incohérent ρ_{incoh} est la présence des éléments hors-diagonaux dans le cas cohérent. Ces éléments, justement appelés cohérences, sont la signature de cohérence dans l'état. Sans eux, la visibilité sera nécessairement nulle dans une expérience d'interférence. En présence d'un environnement, on verra que les cohérences tendent vers zéro avec un temps caractéristique de déphasage $T_{\varphi} = 1/\gamma_{\varphi}$ où γ_{φ} est le taux de déphasage. En présence de relaxation T_1 , le taux de déphasage est modifié pour devenir $\gamma_2 = 1/T_2 = 1/2T_1 + 1/T_{\varphi}$. En l'absence de déphasage 'pur' T_{φ} , le T_2 prend sa valeur maximale $T_2 = 2T_1$. Tout comme L_{φ} peut être plus long que L_m , le temps de déphasage peut donc être plus long que le temps de relaxation.

Finalement, l'opérateur densité est utile afin de mieux comprendre, et de quantifié, le concept d'enchevêtrement. Considérons pour cela l'état pur à deux qubits $|\psi_{12}\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |11\rangle$. La matrice

densité associée à cet état est, dans la base $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$,

$$\begin{aligned} \rho_{12} &= |\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}| \\ &= (\alpha|00\rangle + \beta|11\rangle)(\langle00|\alpha^* + \langle11|\beta^*)) \\ &= |\alpha|^2|00\rangle\langle00| + \alpha\beta^*|00\rangle\langle11| + \alpha^*\beta|11\rangle\langle00| + |\beta|^2|11\rangle\langle11| \\ &:= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 & 0 & \alpha\beta^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha^*\beta & 0 & 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$
(1.37)

Comme nous l'avions vu lors de la discussion entourant l'Éq. (1.26), la matrice densité réduite pour le premier qubit prend alors la forme

$$\rho_1 = \operatorname{Tr}_2 \rho_{12} = \langle 0_2 | \rho_{12} | 0_2 \rangle + \langle 1_2 | \rho_{12} | 1_2 \rangle = |\alpha|^2 | 0 \rangle \langle 0 | + |\beta|^2 | 1 \rangle \langle 1 |$$
(1.38)

On vérifie facilement que la matrice densité réduite pour le second qubit, $\rho_2 = \text{Tr}_1\rho_{12}$, prend la même forme. Considérons d'abord le cas simple où $\alpha = 1 - \beta = 1$. Dans ce cas, l'état à deux qubits est $|\psi_{12}\rangle = |00\rangle$ et les états réduits sont $\rho_1 = \rho_2 = |0\rangle\langle 0|$. Les états réduits ne comptent qu'un terme et sont donc purs de sorte que leur entropie est minimale $S(\rho_1) = S(\rho_2) = 0$. Dans cette situation, il y a autant d'information dans la donnée de $|\psi_{12}\rangle$ que dans la donnée de $\{\rho_1, \rho_2\}$.

Considérons maintenant la situation plus intéressante où $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ correspondant à $|\psi_{12}\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. Dans ce cas la matrice densité réduite pour le premier qubit prend la forme

$$\rho_1 = \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1|$$
(1.39)

et il en est de même pour la matrice densité réduite du second qubit. Malgré que l'état joint soit une superposition cohérente, les états réduits correspondent à un mélange complet des états de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$ ou, en d'autres mots, à une ignorance complète de l'état individuel de chacun des qubits. Ces états réduits de puretés minimales sont caractérisés par une entropie de von Neumann maximale, $S(\rho_1) = S(\rho_2) = 1$. Il s'agit de la signature d'un état enchevêtré. Pour ces états, la donnée de $|\psi_{12}\rangle$ n'est pas équivalente à la donnée de $\{\rho_1, \rho_2\}$. En effet, $|\psi_{12}\rangle$ nous apprend qu'il y à une corrélation parfaite entre les qubits (ie, lors d'une mesure dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ on obtiendra nécessairement 00 ou 11) tandis que les états réduits $\{\rho_1, \rho_2\}$ ne nous apprennent strictement rien sur l'état des qubits. Dans un état enchevêtré, l'information est donc dans la somme des systèmes plutôt que dans les systèmes pris individuellement.

Deux commentaires sont de mise avant de terminer cette section. Premièrement, un état pur $|\psi_{12}\rangle$ à deux qubits pour lequel $S(\rho_1) = S(\rho_2) = 1$ sera dit d'enchevêtrement maximal. Les états tels que l'entropie est comprise entre 0 et 1 (sans rejoindre ces bornes) sont pour leur part enchevêtrés sans être 'maximalement' enchevêtrés. Finalement, il est possible pour un état mixte d'être enchevêtré. Le degré d'enchevêtrement ne peut toutefois pas être décrit par l'entropie de von Neumann qui est réservée aux états purs [5]. Malgré que la situation soit beaucoup plus complexe dans ce cas, il existe des mesures d'enchevêtrement pour certains états mixtes [6].

1.6 Densité spectrale et fonction d'autocorrélation

On introduit dans cette section un outil qui nous sera utile lorsque nous traiterons du bruit : la densité spectrale $S(\omega)$. Cette quantité nous informe sur l'intensité du bruit à la fréquence ω et, comme on le verra, est reliée à la fonction d'autocorrélation du bruit.²

On traite ici du cas classique, le cas quantique étant abordé au chapitre suivant. En guise d'exemple, considérons par exemple un voltage V(t) fluctuant dans le temps. Ce voltage est en partie caractérisé par sa moyenne que l'on prendra nulle $\langle V(t) \rangle = 0$ et sa fonction d'autocorrélation

$$G_{VV}(t,t') = \langle V(t)V(t') \rangle. \tag{1.40}$$

Le signe et la grandeur de $G_{VV}(t, t')$ nous indiquent si les fluctuations de voltage aux temps t et t' sont corrélés, anticorrélés ou statistiquement indépendantes. On supposera que le bruit est un processus stationnaire, c'est-à-dire que ses propriétés statistiques sont invariantes sous translation du temps. Dans cette situation, G_{VV} ne dépend que de la différence de temps $\tau = t - t'$. Ceci implique aussi qu'il s'agit d'une fonction symétrique. En effet,

$$G_{VV}(t,t') = \langle V(t)V(t') \rangle$$

= $\langle V(t-t')V(t'-t') \rangle$ (invariance sous translation)
= $\langle V(\tau)V(0) \rangle$ (1.41)
= $\langle V(0)V(-\tau) \rangle$ (invariance sous translation)
= $\langle V(-\tau)V(0) \rangle$ (variable classique, donc commutateur nul).

Les troisième et dernière lignes nous indiquant qu'il s'agit bien d'une fonction symétrique, $G_{VV}(\tau) = G_{VV}(-\tau)$. Il est utile de remarquer que cette propriété ne sera pas vérifiée dans le cas quantique si $\hat{V}(\tau)$ ne commute pas avec $\hat{V}(0)$.

On supposera ici que le bruit dans le voltage est dû aux fluctuations d'un grand nombre de charges de telle sorte que, selon le théorème de la limite centrale, V(t) prend des valeurs distribuées de façon gaussienne. Dans cette situation, les deux premiers moments de V(t), soit la valeur moyenne et l'autocorrélation, spécifies complètement ces propriétés statistiques. On supposera aussi G_{VV} décroit rapidement à zéro sur un temps caractéristique τ_c , nommé temps de corrélation.



La densité spectrale du bruit $S_{VV}(\omega)$, tel que mesuré par un analyseur de spectre, nous indique l'intensité du signal à différentes fréquences. Cette quantité est définie à l'aide de la transformée de Fourier sur une 'fenêtre' T

FIGURE 1.10: Fonction d'autocorrélation $G_{VV}(\tau)$ symétrique et décroissant sur le temps de corrélation τ_c .

$$V_T[\omega] = \frac{1}{\sqrt{T}} \int_{-T/2}^{+T/2} dt \, e^{i\omega t} V(t), \qquad (1.42)$$

où *T* est le temps d'échantillonnage. Dans la limite $T \gg \tau_c$, cette intégrale est la somme d'un grand nombre $N \approx T/\tau_c$ de quantités aléatoires et non corrélées. On peut donc voir la grandeur

^{2.} On suit ici de très près l'annexe A de la Réf. [7]

 $V_T[\omega]$ comme la fin d'une marche aléatoire dans le plan complexe. Puisque la distance rms parcourue augmente comme \sqrt{T} , le choix de normalisation implique que les propriétés statistiques de $V[\omega]$ sont indépendantes du temps d'échantillonnage T si ce dernier est suffisamment grand. On remarque aussi que $V_T[\omega]$ a les unités de volts $\sqrt{\text{secs}}$, que l'on écrit habituellement comme volts/ $\sqrt{\text{Hz}}$.

La densité spectrale du bruit est définie comme

$$\mathcal{S}_{VV}[\omega] \equiv \lim_{T \to \infty} \langle |V_T[\omega]|^2 \rangle = \lim_{T \to \infty} \langle V_T[\omega] V_T[-\omega] \rangle, \tag{1.43}$$

où le symbole $\langle \cdot \rangle$ correspond à une moyenne d'ensemble. La seconde égalité est valide puisque V(t) est réel. Le théorème de Wiener-Khinchin, que l'on démontrera plus bas, nous permet de réécrire la densité spectrale sous la forme d'une transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation

$$S_{VV}[\omega] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \, e^{i\omega t} G_{VV}(t). \tag{1.44}$$

La relation inverse prend la forme

$$G_{VV}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \mathcal{S}_{VV}[\omega].$$
(1.45)

Ces relations indiquent que si le temps d'autocorrélation τ_c est petit, et donc G_{VV} s'approche d'un delta de Dirac, le spectre est non-nul sur une large gamme de fréquences. Dans la limite du 'bruit blanc'

$$G_{VV}(t) = \sigma^2 \delta(t), \tag{1.46}$$

le spectre est complètement indépendant de la fréquence

$$S_{VV}[\omega] = \sigma^2. \tag{1.47}$$

Dans la limite opposée d'un long temps d'autocorrélation, le signal change lentement et il ne peut donc être que constitué d'une gamme étroite de fréquences, ces dernières n'étant pas nécessairement centrées à zéro. On remarque aussi que puisque $G_{VV}(t)$ est symétrique (dans le présent cas classique), le spectre est lui-même symétrique en fréquence.

$$S_{VV}[\omega] = S_{VV}[-\omega]. \tag{1.48}$$

On montre ceci facilement à l'aide de l'Éq. (1.45) en utilisant $G_{VV}(t) = G_{VV}(-t)$.

En guise d'exemple, considérons un oscillateur harmonique de masse M et de fréquence Ω

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2 x^2.$$
 (1.49)

On suppose que ce dernier est maintenu à l'équilibre thermique à la température *T* et cherche à déterminer le spectre $S_{xx}[\omega]$ des fluctuations de position.

On obtient cette quantité à l'aide des équations de Hamilton

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \qquad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$$
 (1.50)

qui ont comme solutions

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0)\cos(\Omega t) + p(0)\frac{1}{M\Omega}\sin(\Omega t) \\ p(t) &= p(0)\cos(\Omega t) - x(0)M\Omega\sin(\Omega t), \end{aligned} \tag{1.51}$$

où x(0) et p(0) sont les valeurs initiales pour la position et le moment conjugué. Ces valeurs sont sélectionnées aléatoirement à de la distribution de Boltzmann. La fonction d'autocorrélation position-position est donc

$$G_{xx}(t) = \langle x(t)x(0) \rangle$$

$$= \langle x(0)x(0) \rangle \cos(\Omega t) + \langle p(0)x(0) \rangle \frac{1}{M\Omega} \sin(\Omega t).$$
(1.52)

Le second terme est nul puisqu'à l'équilibre thermique il n'y a aucune corrélation entre la position et la coordonnée. À l'aide du théorème d'équipartition $\frac{1}{2}M\Omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}k_BT$ on obtient ainsi

$$G_{xx}(t) = \frac{k_{\rm B}T}{M\Omega^2}\cos(\Omega t).$$
(1.53)

Ce dernier résultat conduit à la densité spectrale

$$S_{xx}[\omega] = \pi \frac{k_{\rm B}T}{M\Omega^2} \left[\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega) \right]. \tag{1.54}$$

Comme il se doit, ce résultat est symétrique.

1.6.1 Théorème de Wiener-Khinchin

Des Éqs. (1.42-1.43), on a que

$$S_{VV}[\omega] = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T dt' e^{i\omega(t-t')} \langle V(t)V(t') \rangle$$

$$= \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-2B(t)}^{+2B(t)} d\tau e^{i\omega\tau} \langle V(t+\tau/2)V(t-\tau/2) \rangle,$$
 (1.55)

avec $\tau = t - t'$ et où

$$B(t) = \begin{cases} t & \text{si } t < T/2\\ T - t & \text{si } t > T/2. \end{cases}$$
(1.56)

Si $T \gg \tau_c$, on peut étendre les bornes $\pm 2B(t)$ dans la seconde intégrale à l'infinie. La fonction de corrélation n'étant non nulle seulement sur $\sim \tau_c$, l'erreur sur l'intégrale correspond aux quatre triangles foncés illustrés à la Fig. 1.11 et qui sont petits si le temps de corrélation τ_c est petit devant *T*. Utilisant l'invariance sous translation du temps, on obtient



FIGURE 1.11: Région d'intégration B(t).

$$S_{VV}[\omega] = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \, e^{i\omega\tau} \langle V(\tau)V(0) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \, e^{i\omega\tau} \langle V(\tau)V(0)\rangle, \qquad (1.57)$$

ce qui correspond au résultat énoncé à l'Éq. (1.44).

On considère finalement une autre forme du théorème qui reliera $\langle V[\omega]V^*[\omega']\rangle$ au spectre. Pour cela, il est utile de rappeler que $V^*[-\omega] = V[\omega]$ puisque V(t) est réel. On a donc

$$\langle V[\omega]V^*[\omega'] \rangle = \iint_{-\infty}^{\infty} dt dt' e^{i\omega t} e^{-i\omega't'} \langle V(t)V(t') \rangle$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega t} e^{-i\omega'(t-\tau)} \langle V(t)V(t-\tau) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega-\omega')t} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega'\tau} \langle V(t)V(t-\tau) \rangle.$$

$$(1.58)$$

La première de ces intégrales n'est que $2\pi\delta(\omega - \omega')$ tandis que $\langle V(t)V(t - \tau) \rangle = \langle V(\tau)V(0) \rangle$ en raison de l'invariance sous translation du temps. On obtient donc finalement la relation recherchée

$$\langle V[\omega]V^*[\omega']\rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega')\mathcal{S}_{VV}[\omega']. \tag{1.59}$$

1.7 Référentiel tournant et approximation séculaire

Il est très souvent utile de modifier un Hamiltonien H afin de le rendre plus simple pour les calculs. On peut par exemple appliquer une transformation sur l'Hamiltonien dans le but de le diagonaliser. Dans ce cas, la transformation U à appliquer sur H est une matrice unitaire dont les colonnes sont les vecteurs propres de H, en d'autres mots $UHU^{\dagger} = H_{\text{diag}}$. La transformation peut aussi être approximative, au sens où le résultat est approximativement diagonal avec des termes non diagonaux qui sont négligés. Si ces termes non diagonaux sont de faibles amplitudes, on dira que ce calcul est perturbatif et le résultat équivaut celui obtenu à l'aide de la théorie de perturbation sur les états, tel que vu dans les cours de mécaniques quantiques du premier cycle. Plusieurs autres types de transformation peuvent être utiles et on considérera ici la transformation vers un référentiel tournant.

Il est d'abord utile de regarder l'effet d'une transformation unitaire arbitraire *U* sur l'équation de Schrödinger. Imaginons par exemple un système d'Hamiltonien *H* et dont la dynamique est donc décrite par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar|\psi\rangle = H|\psi\rangle.$$
 (1.60)

On cherche à décrire la dynamique de ce système suite à l'application d'une transformation *U* sur les états

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle. \tag{1.61}$$

En utilisant cette égalité dans l'équation de Schrödinger, on obtient

$$\begin{split} i\hbar|\dot{\psi}\rangle &= H|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(U^{-1}|\psi'\rangle) = HU^{-1}|\psi'\rangle \\ &\Rightarrow \quad i\hbar\dot{U}^{-1}|\psi'\rangle + i\hbar U^{-1}|\dot{\psi'}\rangle = HU^{-1}|\psi'\rangle \\ &\Rightarrow \quad i\hbar|\dot{\psi'}\rangle = UHU^{-1}|\psi'\rangle - i\hbar U\dot{U}^{-1}|\psi'\rangle \\ &\Rightarrow \quad i\hbar|\dot{\psi'}\rangle = (UHU^{-1} - i\hbar U\dot{U}^{-1})|\psi'\rangle. \end{split}$$
(1.62)

Suite à cette transformation, l'équation de Schrödinger pour $|\psi'\rangle$ garde sa forme initiale, mais avec un nouvel Hamiltonien

$$H' = UHU^{-1} - i\hbar U\dot{U}^{-1}.$$
 (1.63)

En guise d'exemple, considérons un système à deux niveaux de fréquence de Larmor ω_{01} et entretenu par une perturbation externe d'amplitude Ω_R et de fréquence ω_d

$$H = \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_z + \hbar\Omega_R \cos(\omega_d t - \phi_d)\sigma_x.$$
(1.64)

Le second terme de cet Hamiltonien peut par exemple résulter de l'interaction dipolaire-électrique $-d \cdot E$ entre le dipôle $d \propto \sigma_x$ du système à deux niveaux et un champ électrique E oscillant à la fréquence ω_d et de phase ϕ_d .

Malgré qu'il soit en apparence simple, cet Hamiltonien n'admet pas de solution exacte. Nous ferons ici une transformation exacte suivie d'une approximation afin d'obtenir une solution simple et qui est généralement valide en pratique. On commence par réécrire l'Hamiltonien sous la forme

$$H = \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_{z} + \hbar\Omega_{R}\cos(\omega_{d}t - \phi_{d})\sigma_{x}$$

$$= \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_{z} + \hbar\Omega_{R}[\cos(\omega_{d}t)\cos(\phi_{d}) + \sin(\omega_{d}t)\sin(\phi_{d})]\sigma_{x}$$

$$= \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_{z} + \frac{\hbar\Omega_{R}}{2}\left[(e^{i\omega_{d}t} + e^{-i\omega_{d}t})\cos(\phi_{d}) + i(e^{i\omega_{d}t} - e^{-i\omega_{d}t})\sin(\phi_{d})\right](\sigma_{+} + \sigma_{-}).$$
(1.65)

où l'on a utilisé $\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$ à la dernière ligne. On introduit maintenant la transformation $U = \exp(i\theta\sigma_z/2)$ que l'on applique sur la fonction d'onde comme à l'Éq. (1.61). Puisque σ_z est le générateur de rotation selon l'axe *z*, cette transformation correspond à une rotation d'un angle θ de l'état du système à deux niveaux sur la sphère de Bloch.

Les transformations suivantes seront utiles afin d'obtenir H'

$$e^{i\theta\sigma_z/2}\sigma_+e^{-i\theta\sigma_z/2} = \sigma_+e^{\pm i\theta},\tag{1.66}$$

$$e^{i\theta\sigma_z/2}\sigma_z e^{-i\theta\sigma_z/2} = \sigma_z. \tag{1.67}$$

De même, on a que $-i\hbar U \dot{U}^{-1} = -\hbar \dot{\theta} \sigma_z/2$. Nous n'avons pas encore spécifié θ , variable dont la valeur est à notre discrétion. On prendra ici $\theta = \omega t$ ce qui correspond à tourner le vecteur de Bloch autour de l'axe z à la fréquence ω . On dira donc que la transformation U fait passer dans un *référentiel tournant* à la fréquence ω . Par exemple, pour $\Omega_R = 0$, l'Hamiltonien transformé prend la forme $H' = \hbar(\omega_{01} - \omega)\sigma_z/2$. Le choix $\omega = \omega_{01}$ conduit à H' = 0. Ainsi, l'Hamiltonien qui générait une rotation à la fréquence de Larmor ω_{01} autour de l'axe z devient un Hamiltonien statique dans un référentiel tournant à cette même fréquence. Ceci est l'équivalent quantique de la théorie de Hamilton-Jacobie en mécanique classique.

De façon plus générale, pour $\Omega_R \neq 0$, cette transformation conduit à

$$H' = \frac{\hbar}{2}(\omega_{01} - \omega)\sigma_{z} + \frac{\hbar\Omega_{R}}{2} \Big[(e^{i\omega_{d}t} + e^{-i\omega_{d}t})\cos(\phi_{d}) + i(e^{i\omega_{d}t} - e^{-i\omega_{d}t})\sin(\phi_{d}) \Big] (\sigma_{+}e^{i\omega_{t}} + \sigma_{-}e^{-i\omega_{t}}) \\ = \frac{\hbar}{2}(\omega_{01} - \omega)\sigma_{z} + \frac{\hbar\Omega_{R}}{2} \Big(e^{-i\Delta t}e^{-i\phi_{d}}\sigma_{+} + e^{i\Delta t}e^{i\phi_{d}}\sigma_{-} \Big) + \frac{\hbar\Omega_{R}}{2} \Big(e^{i\Sigma t}e^{i\phi_{d}}\sigma_{+} + e^{-i\Sigma t}e^{-i\phi_{d}}\sigma_{-} \Big)$$

$$(1.68)$$

En distribuant les exponentielles comme à la dernière ligne de l'Éq. (1.68), on remarque que cet H' comporte un terme de fréquence nulle (le premier) et des termes de fréquence $\Delta = (\omega_d - \omega)$ et $\Sigma = (\omega_d + \omega)$. Il est utile de choisir $\Delta = 0$, de sorte que l'Hamiltonien ne comporte que des termes de fréquence nulle et de fréquence $\Sigma = 2\omega_d$. Quel est l'effet de ces derniers termes ? Si Σ est grand, ces termes oscilleront rapidement. Cette fréquence doit être comparée au temps caractéristique d'évolution ~ $1/\Omega_R$ pendant lequel ces termes accumulent une phase ~ Σ/Ω_R . Si Σ/Ω_R est grand, ou encore Ω_R/Σ petit, cette phase est très grande. Cette contribution rapide doit être contrastée à l'évolution lente générée par les termes de fréquence nulle. Dans l'approximation séculaire (aussi connue



FIGURE 1.12: Évolution de la valeur moyenne de σ_z sous l'Hamiltonien H' avec (lignes pointillées rouges) et sans (lignes pleines bleues) la RWA. a) $\Omega_R/\Sigma = 0.2$ b) $\Omega_R/\Sigma = 2$.

sous le nom de RWA pour *rotating wave approximation*), on laisse tomber ces termes qui se moyennent rapidement à zéro au profit des termes de basses fréquences [8]. La Fig. 1.12 montre la solution numérique de l'Éq. (1.68) avec (rouge) et sans (bleu) l'approximation séculaire. On a pris $\Omega_R/\Sigma = 0.2$ et $\Omega_R/\Sigma = 2$ dans les panneaux a) et b), respectivement. Tel qu'annoncé, l'approximation séculaire est très bonne lorsque Ω_R/Σ est petit et ce n'est plus le cas à Ω_R/Σ grand. Plutôt que de simplement laisser tomber les termes oscillants, il est possible d'en ternir compte perturbativement. Ces termes conduisent alors à un décalage de fréquence ~ Ω_R^2/Σ du qubit, connu sous le nom de décalage de Bloch-Siegert [9].

Dans cette approximation, et avec le choix $\Delta = 0$, on a

$$H' \approx \frac{\hbar}{2} (\omega_{01} - \omega_d) \sigma_z + \frac{\hbar \Omega_R}{2} [(\sigma_- + \sigma_+) \cos(\phi_d) + i(\sigma_- - \sigma_+) \sin(\phi_d)] = \frac{\hbar \delta}{2} \sigma_z + \frac{\hbar \Omega_R}{2} [\sigma_x \cos(\phi_d) + \sigma_y \sin(\phi_d)],$$
(1.69)

où l'on a utilisé $\sigma_y = i(\sigma_- - \sigma_+)$ et définie le décalage en fréquence $\delta = \omega_{01} - \omega_d$. Tel qu'annoncé en début de section, il est simple de diagonaliser cet Hamiltonien approximatif qui correspond à un système à deux niveaux de fréquence de transition δ et, selon le choix de phase ϕ_d , entretenu en rotation par rapport *x* ou *y*. À la résonance $\delta = 0$, Ω_R est connue sous le nom de fréquence de Rabi.

1.8 Règle d'or de Fermi et représentation d'interaction

Considérons un système d'Hamiltonien H_0 indépendant du temps soumit à une perturbation pouvant dépendre du temps V(t)

$$H(t) = H_0 + V(t). (1.70)$$

En général, on supposera que H_0 est simple ou, en d'autres mots, que nous savons comment le diagonaliser. On s'intéresse aux transitions entre les états propres de H_0 causées par la perturbation

V(t). Le taux de ces transitions est donné par la règle d'or de Fermi, que l'on obtient dans cette section.

Pour ce faire, il est utile de passer dans un référentiel tournant avec H_0 à l'aide de la transformation

$$|\psi'(t)\rangle = e^{+iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle, \qquad (1.71)$$

où $|\psi(t)\rangle$ est le ket dans le référentiel du laboratoire et $|\psi'(t)\rangle$ dans le référentiel tournant. Dans ce contexte de la théorie de perturbation, on dira que cette transformation correspond à un passage vers la *représentation d'interaction*. Selon l'Éq. (1.63), l'Hamiltonien dans ce référentiel prend la forme

$$V'(t) = e^{+iH_0t/\hbar} [H_0 + V(t)] e^{-iH_0t/\hbar} - H_0 = e^{+iH_0t/\hbar} V(t) e^{-iH_0t/\hbar}.$$
(1.72)

Ainsi, en représentation d'interaction le système évolue essentiellement suivant la perturbation, l'Hamiltonien transformé comportant toutefois les fréquences de Bohr de H_0 .

L'équation de Schrödinger dans cette représentation

$$i\hbar|\dot{\psi}'(t)\rangle = V'(t)|\psi'(t)\rangle \tag{1.73}$$

a comme solution formelle

$$|\psi'(t)\rangle = |\psi'(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V'(t_1) |\psi'(t_1)\rangle.$$
(1.74)

Cette solution pour $|\psi'(t)\rangle$ dépend de $|\psi'(t)\rangle$ et n'est donc pas très utile en soit. Elle peut toutefois être utilisée pour obtenir une solution perturbative. On obtient en effet la *série de Dyson* en substituant cette expression pour $|\psi'(t)\rangle$ dans le second terme de l'Éq. (1.74) et en itérant. Ceci conduit à

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= |\psi'(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V'(t_1) |\psi'(t_0)\rangle \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V'(t_1) V'(t_2) |\psi'(t_0)\rangle \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 V'(t_1) V'(t_2) V'(t_3) |\psi'(t_0)\rangle + \cdots \end{aligned}$$
(1.75)

La règle d'or de Fermi s'obtient en arrêtant à la première itération.

En guise d'exemple, considérons ici une perturbation ouverte de façon adiabatique [10]

$$V(t) = V e^{\eta t} \tag{1.76}$$

avec η petit et positif. On notera les états et énergies propres de H_0 comme

$$H_0|j\rangle = \hbar\omega_j|j\rangle \tag{1.77}$$

et $|j'(t)\rangle = e^{+iH_0t/\hbar}|j\rangle$ les états propres en représentation d'interaction.

On suppose le système initialement dans l'état propre $|i\rangle$ et cherche le taux de transition vers l'état propre $|f\rangle$. Avec $|\psi(t_0)\rangle = |i\rangle$ l'amplitude de probabilité de transition au premier ordre de la série de Dyson est

$$\langle f'(t)|\psi'(t)\rangle = \langle f'(t)|i'(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle f'(t)|V'(t_1)|i'(t_0)\rangle$$

$$= \langle f|e^{-iH_0t/\hbar}e^{+iH_0t_0/\hbar}|i\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle f'(t)|e^{+iH_0t_1/\hbar}(Ve^{\eta t_1})e^{-iH_0t_1/\hbar}|i'(t_0)\rangle,$$

$$(1.78)$$

où le premier terme s'annule puisque $\langle f | i \rangle = 0$. On a donc

$$\langle f'(t)|\psi'(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle f'(t)|e^{+i\omega_f t_1} (Ve^{\eta t_1})e^{-i\omega_i t_1}|i'(t_0)\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle f'(t)|V|i'(t_0)\rangle \int_{t_0}^t dt_1 e^{+i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t_1}$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle f'(t)|V|i'(t_0)\rangle \frac{e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t} - e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t_0}}{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)}.$$

$$(1.79)$$

On suppose maintenant que la perturbation a été ouverte arbitrairement loin dans le passé, on prend donc la limite $t_0 \rightarrow -\infty$, ce qui conduit à $e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t_0} \rightarrow 0$ puisque $\eta > 0$. L'amplitude de transition prend donc la forme simplifiée

$$\langle f'(t)|\psi'(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle f'(t)|V|i'(t_0)\rangle \frac{e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t}}{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)}.$$
(1.80)

La probabilité de transition s'obtient en prenant le module carré de cette dernière expression, ce qui conduit immédiatement à

$$P_{fi}(t) = |\langle f'(t)|\psi'(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{(\omega_f - \omega_i)^2 + \eta^2}.$$
(1.81)

En prenant le carré, on a pu laisser tomber tous les facteurs de phases et donc retourner au référentiel du laboratoire pour l'élément de matrice de la perturbation *V*. Le taux de transition est finalement donné par

$$\Gamma_{fi} = \frac{d}{dt} P_{fi}(t) = \frac{2}{\hbar^2} |\langle f | V | i \rangle|^2 e^{2\eta t} \frac{\eta}{(\omega_f - \omega_i)^2 + \eta^2}.$$
(1.82)

Dans la limite $\eta \rightarrow 0$ où la perturbation est ouverte de façon arbitrairement lente, on peut utiliser

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{z^2 + \epsilon^2} = \pi \delta(z), \tag{1.83}$$

ce qui conduit à la règle d'or de Fermi

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle f|V|i \rangle|^2 \delta(\omega_f - \omega_i).$$
(1.84)

Ce résultat s'obtient aussi pour une perturbation ouverte de manière abrupte. Notons que s'il y a plusieurs états finaux équivalents, on remplace le delta $\delta(\omega_f - \omega_i)$ par la densité d'états

$$\rho(\omega_f) = \sum_f \delta(\omega_f - \omega_i). \tag{1.85}$$

En d'autres mots, on additionne de façon incohérente les différents taux de transition.

2 TRANSPORT BALISTIQUE

2.1 Motivation expérimentale

La Fig. 2.1 présente les résultats de la mesure de la conductance à travers une structure similaire à celle présentée à la Fig. 1.5 [12, 13], c'est-à-dire un 2DEG à haute mobilité formé près de l'interface d'une hétérostructure de AlGaAs-GaAs. Des grilles électrostatiques déposées en surface repoussent les électrons de façon à former un canal de conduction de largeur W et de longueur L. Dans ce système, W est comparable à la longueur d'onde de Fermi λ_F et toutes les dimensions sont beaucoup plus petites que L_m de sorte que le transport est balistique. Une telle structure est connue sous le nom de 'point de contact quantique'.

Aux voltages très négatifs, la constriction se referme ($W \rightarrow 0$) et la conductance s'annule alors. En ouvrant la constriction, la conductance présente des plateaux aux multiples entiers de $R_K^{-1} = 2e^2/h$, avec $R_k \sim 13 \text{ k}\Omega$ le quantum conductance. Ce résultat est a priori surprenant puisque, dans le régime balistique, il n'y a aucune collision. On pourrait alors s'attendre à voir une conductance infinie. L'explication de ce phénomène mésoscopique est due à Rolf Landauer [14]. On obtiendra dans ce chapitre la formule de Landauer pour la conductance.



FIGURE 2.1: Conductance d'un point de contact quantique mesurée pour différentes températures en fonction du voltage de grille. Adaptée de la Réf. [11].

2.2 Conducteurs mésoscopiques et contacts sans réflexion

Une contribution importante de Landauer est la compréhension que, lors d'une mesure de conductance, il n'y a pas que la région mésoscopique qui participe au transport. En effet, dans l'exemple ci-haut on doit injecter les électrons dans le point de contact quantique et les récupérer. Ceci se fait par des contacts. Tel qu'illustré schématiquement à la Fig. 2.2, en opposition à la région mésoscopique, les contacts sont de taille macroscopique.

Quel est le rôle de ces contacts? Un contact agit un peu comme le corps noir pour les photons : il les recycle. En effet,

FIGURE 2.2: Représentation schématique d'une région mésoscopique (jaune) et ces contacts (gris).

un photon qui entre en contact avec un corps noir est absorbé par ce dernier. Le corps noir réémet des photons distribués selon la distribution de Bose-Einstein pour laquelle la température est fixée. De la même façon, un électron qui arrive à un contact est absorbé par ce dernier. Le contact injecte des électrons dans la région mésoscopique non pas avec une distribution de Bose-Einstein mais plutôt de Fermi-Dirac où à la fois la température et le potentiel chimique sont fixés.

Une propriété cruciale des contacts et que l'on supposera toujours réalisée est qu'ils sont sans réflexion. En d'autres mots, un électron incident sur le contact sera nécessairement absorbé par celui-ci. Les contacts ne font donc qu'absorber et réémettre des électrons en fixant T et μ . Tel qu'illustré à la Fig. 2.3, afin que la réflexion soit négligeable, le rayon de courbure de l'interface entre un contact et la région mésoscopique doit être grand devant λ_F . Sinon, il y aura réflexion des ondes électroniques. Étant donné la faible taille de λ_F , ceci est facile à réaliser en pratique. Évidemment, un électron sortant d'un contact pourra subir de multiples réflexions. Ceci est sans conséquence pourvu que les électrons finalement émis respectent bien la distribution de Fermi-Dirac.

2.3 Formule de Landauer : approche simple

On obtiendra dans ce chapitre la formule de Landauer à l'aide de deux approches. Avant de s'intéressé à l'approche plus complexe mais aussi plus complète, on s'intéresse tout d'abord à un modèle simple qui a le mérite de mettre en valeur la physique importante. Tel qu'illustré à la Fig. 2.4, on s'intéresse donc à un conducteur balistique ($\lambda_f < L < L_m$) unidimensionnel entre deux contacts de potentiel chimique μ_j , avec j = L, R. Le réservoir j injecte des électrons de vecteur d'onde k et s'éloignant du réservoir d'origine dans le conducteur mésoscopique et ce jusqu'au potentiel chimique μ_j . Tel qu'illustré à la Fig. 2.4, le courant est donc dû aux états se trou-



FIGURE 2.4: Conducteur balistique 1D entre ces deux contacts sans réflexions. La différence de voltage entre les contacts est $V = (\mu_L - \mu_R)/e$ et fenêtre de transport (bleu).

vant dans la fenêtre de transport de largeur *eV*, seule région où cette injection d'électrons ne se compense pas.

Écrivant le courant comme I = nev, avec v la vitesse et n la densité de porteurs, il est clair que l'on doit distinguer les électrons originaires du réservoir de gauche de ceux originaires du réservoir de droite. La densité d'électrons $n_L(E)$ d'énergie E provenant du réservoir L et se déplaçant vers la droite est

$$n_L(E) = N_L(E)f(E - \mu_L)$$
 (2.1)

avec $N_L(E)$ la densité d'états pour les électrons se déplaçant vers la droite et $f(E - \mu_L)$ la distribution de Fermi-Dirac tandis que la densité d'électrons originaire du contact de droite et se déplaçant vers la gauche est

$$n_R(E) = N_R(E)f(E - \mu_R).$$
 (2.2)



FIGURE 2.3: Vue de dessus d'une région mésoscopique et de ces contacts. Le rayon de courbe est supposé grand devant λ_F de sorte que la réflexion des ondes électroniques est négligeable.

Dans le but de simplifier la discussion, on décrira maintenant la région mésoscopique simplement par la probabilité T(E) qu'un électron, arrivant de la gauche ou de la droite, traverse la région. Seuls les électrons traversant la barrière participent au courant *I*. On peut donc écrire

$$I(E) = eT[n_L(E)v_L(E) - n_R(E)v_R(E)]$$

= $eT[N_L(E)f(E - \mu_L)v_L(E) - N_R(E)f(E - \mu_R)v_R(E)],$ (2.3)

où l'on a pris T(E) = T afin de simplifier davantage la situation. On détermine maintenant $n_j(E)$ et v_j . Suivant la même approche qu'à l'Éq. (1.9), la densité d'états pour ce système 1D est

$$N(E) = 2\sum_{k} \delta(E - E_s - \hbar^2 k^2 / 2m) = 2 \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} \delta(E - E_s - \hbar^2 k^2 / 2m) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E - E_s}},$$
 (2.4)

où le facteur 2 tient compte du spin. La densité étant la même pour les électrons se déplaçant vers la gauche ou la droite, on écrit donc

$$N_L(E) = N_R(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E - E_s}}.$$
(2.5)

De même, on a

$$v_j(E) = \frac{\hbar k}{m} = \sqrt{\frac{2(E - E_s)}{m}}$$
(2.6)

de sorte que

$$I(E) = \frac{eT}{\pi\hbar} [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)].$$
 (2.7)

À basse température, $f(E - \mu_i) \approx \theta(\mu_i - E)$ et le courant se réduit à

$$I \approx \frac{eT}{\pi\hbar} \int_0^\infty dE \left[\theta(\mu_L - E) - \theta(\mu_R - E) \right] = \frac{eT}{\pi\hbar} (\mu_L - \mu_R) = \frac{2e^2}{h} TV, \qquad (2.8)$$

où l'on a pris $V = (\mu_L - \mu_R)/e$. On obtient finalement pour la conductance le résultat de Landauer

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h}T.$$
(2.9)

Pour T = 1, la conductance est finie et non pas infinie comme on pourrait s'y attendre pour un conducteur idéal. Cette dernière prend une valeur universelle, $R_k^{-1} = (2e^2/h)^{-1}$, soit celle observée dans l'expérience de la Fig. 2.1. Cette approche simple n'explique toutefois pas la présence des différents plateaux de conductance. On se tourne maintenant à une approche plus complète qui tiendra compte des différents modes du conducteur mésoscopique et qui nous permettra de reproduire les résultats expérimentaux. On donnera aussi une interprétation intuitive à cette résistance finie dans le régime balistique.

2.4 Matrice de diffusion

2.4.1 Définition de la matrice de diffusion

Tel qu'illustré à la Fig. 2.5, on s'intéresse à nouveau à un système mésoscopique connecté à deux réservoirs, que l'on notera par les indices $\alpha = L, R$. Ces réservoirs sont à l'équilibre à la température T_{α} et au potentiel chimique μ_{α} . Dans l'approche de Landauer, on considère que la région mésoscopique est connectée aux réservoirs par des fils 1D idéaux. On supposera que le mouvement transverse et longitudinal des électrons dans ces fils est séparable. Dans



FIGURE 2.5: Région mésoscopique connectée à deux fils 1D idéaux eux-mêmes connectés à des contacts sans réflexions de température $T_{L,R}$ et potentiel chimique $\mu_{L,R}$.

la direction longitudinale, les électrons sont décrits par des ondes planes d'énergie $E_l = \hbar^2 k^2 / 2m$. Dans la direction transverse, l'énergie est quantifiée et caractérisée par l'index discret *n*. L'énergie totale est donc $E = E_l + E_n$ dans le mode *n*. Le nombre de modes dans le fil α est N_{α} .

Un état propre $\psi_E(x, \mathbf{r}_{\perp})$ d'énergie *E* du système 'fils plus région mésoscopique' est une combinaison d'états dans les fils de gauche (*L*), de droite (*R*) et ainsi que dans la région mésoscopique (*M*). De façon générale, cet état prend la forme

$$\psi_{E}(x, \mathbf{r}_{\perp}) = \begin{cases} \sum_{n} a_{Ln} \phi_{nE}^{+}(x, \mathbf{r}_{\perp}) + \sum_{n} b_{Ln} \phi_{nE}^{-}(x, \mathbf{r}_{\perp}), & x \in L \\ \psi_{M,E}(x, \mathbf{r}_{\perp}), & x \in M \\ \sum_{n} b_{Rn} \phi_{nE}^{+}(x, \mathbf{r}_{\perp}) + \sum_{n} a_{Rn} \phi_{nE}^{-}(x, \mathbf{r}_{\perp}), & x \in R \end{cases}$$
(2.10)

avec

$$\phi_{nE}^{\pm}(x, \boldsymbol{r}_{\perp}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\nu_n(E)}}\chi_n(\boldsymbol{r}_{\perp})e^{\pm ik_n x}$$
(2.11)

où $v_n(E)$ est la vitesse à l'énergie E dans le mode n et $\chi_n(\mathbf{r}_{\perp})$ la fonction d'onde transverse. Il est utile d'ajouter la vitesse à la normalisation simplement pour obtenir une expression plus simple pour le courant. Dans cette expression, l'énergie E fixe le vecteur d'onde $k_n = \sqrt{2m(E - E_n)}/\hbar$. Les coefficients $a_{\alpha n}$ et $b_{\alpha n}$ sont à déterminer à l'aide des conditions de continuités de la fonction d'onde et de sa dérivée. Malheureusement, il peut être très difficile de résoudre ce système d'équations, d'autant plus que cela requiert la connaissance de $\psi_{M,E}(x, \mathbf{r}_{\perp})$ la fonction d'onde dans la région mésoscopique. Pour un système le moindrement complexe (c.-à-d. réaliste), cette fonction d'onde ne peut que s'obtenir numériquement. On doit toutefois se rappeler que notre objectif n'est pas de déterminer $\psi_E(x, \mathbf{r}_{\perp})$, mais plus simplement de déterminer le courant traversant le système. Il s'agit d'un problème plus simple qui ne demande pas nécessairement la résolution de ce système d'équations.

On détermine le courant en remarquant d'abord que les amplitudes $a_{\alpha n}$ et $b_{\alpha n}$ ne sont pas indépendantes : les coefficients $a_{\alpha n}$ correspondent aux amplitudes des fonctions d'onde venant des réservoirs tandis que les $b_{\alpha n}$ sont les amplitudes des ondes transmises ou réfléchies par la région mésoscopique. La relation entre ces amplitudes contient donc de l'information par rapport à la région mésoscopique. Cette dépendance peut s'écrire formellement comme

$$b_{\alpha n} = \sum_{\beta = L,R} \sum_{m} s_{\alpha n,\beta m} a_{\beta m}.$$
(2.12)

Le coefficient de proportionnalité peut s'écrire sous la forme d'une matrice de diffusion de taille



FIGURE 2.6: Représentation graphique de trois éléments de la matrice de diffusion.

 $(N_L + N_R)^2$ que l'on écrit comme

$$\boldsymbol{s} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{s}_{LL} & \boldsymbol{s}_{LR} \\ \boldsymbol{s}_{RL} & \boldsymbol{s}_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{r} & \boldsymbol{t}' \\ \boldsymbol{t} & \boldsymbol{r}' \end{pmatrix}.$$
 (2.13)

En général, s = s(E) mais on ne trainera pas l'index E afin d'alléger la notation et éventuellement pour simplifier les calculs. L'élément $t_{nn'}$ est l'amplitude de transmission d'une onde arrivant de la gauche dans le mode n' vers la droite dans le mode n. On pourrait donc écrire $t_{n \leftarrow n'}$ pour plus de clarté. De même, $t'_{nn'}$ est l'amplitude correspondante de la droite vers la gauche et $r_{nn'}$ l'amplitude de réflexion du mode n' vers le mode n, tous deux à gauche de la région mésoscopique.

2.4.2 Propriétés de la matrice de diffusion

La matrice de diffusion est unitaire $s^{\dagger}s = \mathbb{I}$ et, en l'absence de champ magnétique, symétrique $s = s^{T}$. L'unitarité est une simple conséquence de la conservation du courant, ou autrement dit que l'état du système doit toujours avoir une norme unitée. En effet, réécrivons la relation Éq. (2.12) de façon plus compacte comme b = sa, où b et a sont les vecteurs regroupant les amplitudes de probabilités $b_{\alpha n}$ et $a_{\alpha n}$. La conservation du courant implique que $|a|^{2} = |b|^{2}$. Utilisant la matrice de diffusion, on peut réécrire le membre de droite de cette égalité comme $|b|^{2} = b^{\dagger}b = a^{\dagger}s^{\dagger}sa$. On a donc immédiatement $a^{\dagger}a = a^{\dagger}s^{\dagger}sa$ ce qui implique $s^{\dagger}s = \mathbb{I}$. La matrice s est bien unitaire. À l'aide de l'Éq. (2.13), on vérifie facilement que cette propriété implique entre autre que $t^{\dagger}t + r^{\dagger}r = \mathbb{I}$. On utilisera cette identité lors du calcul du courant.

La symétrie de la matrice de diffusion est une conséquence de la symétrie sous renversement du temps. En effet, dans une structure symétrique comme celle illustrée à la Fig. 2.7, on s'attend à ce que la probabilité de transmission T_{31} du contact 1 vers 3 soit identique à la probabilité T_{13} de transmission de 3 vers 1. Est-ce que cette symétrie existe toujours en présence d'un champ magnétique ? Supposons par exemple que le champ entre dans la feuille. Dans ce cas, le mouvement des électrons est favorisé de 1 vers 3 par rapport à la direction contraire. Si l'on inverse la direction du champ, c'est plutôt le transport de 3 vers 1 qui est favorisé. Les pro-



FIGURE 2.7: Conducteur symétrique à trois contacts.

babilités de transmission entre ces deux situations sont reliées par $T_{31}^B = T_{13}^{-B}$. De façon générale, on a donc $s_{-B} = s_B^T$. L'application d'un champ magnétique brise la symétrie sous renversement du

temps et on doit donc ajuster la matrice de diffusion en conséquence.

2.5 Formule de Landauer : Opérateur courant

En raison de la conservation du courant, il n'est pas nécessaire de calculer le courant à l'intérieur de la région mésoscopique. On peut en effet le calculer à tous points du système et il est en pratique plus simple d'obtenir une expression pour le courant dans les fils 1D adjacents à la région mésoscopique. Une expression pour ce courant moyen s'obtient de la relation standard pour le courant de probabilité en mécanique quantique [15]

$$I(x) = \frac{\hbar e}{2im} \int d\mathbf{r}_{\perp} \left[\psi^*(x, \mathbf{r}_{\perp}) \partial_x \psi(x, \mathbf{r}_{\perp}) - \psi(x, \mathbf{r}_{\perp}) \partial_x \psi^*(x, \mathbf{r}_{\perp}) \right], \qquad (2.14)$$

où $\psi(x, \mathbf{r}_{\perp})$ est obtenue de l'Éq. (2.10) avec $x \in L$ ou R et en sommant sur toutes les énergies [16]. Plutôt que de suivre cette voie, on utilisera ici une approche plus versatile se basant sur la matrice de diffusion et qui nous permettra de calculer non seulement la moyenne du courant mais aussi la fonction de corrélation courant-courant. En d'autres mots, il nous sera possible d'évaluer le bruit dans le courant. On verra que ce bruit peut révéler beaucoup d'information par rapport au système.

2.5.1 États diffusés et opérateurs de créations et d'annihilations fermioniques

Afin d'utiliser la matrice de diffusion dans le calcul du courant, il est utile de définir les *états diffusés* : les états issus d'un réservoir sous la forme d'une onde plane et partiellement transmise et réfléchit par la région mésoscopique. L'état diffusé dans le fil de gauche et issu du réservoir de gauche dans le mode *n* prend la forme

$$\psi_{Ln}(x, \mathbf{r}_{\perp}) = \phi_{nE}^{+}(x, \mathbf{r}_{\perp}) + \sum_{n'} r_{n'n} \phi_{n'E}^{-}(x, \mathbf{r}_{\perp}).$$
(2.15)

Dans le fil de droite, ce même état prend plutôt la forme

$$\psi_{Rn}(x, \mathbf{r}_{\perp}) = \sum_{n'} t_{n'n} \phi_{n'E}^{+}(x, \mathbf{r}_{\perp}).$$
(2.16)

On définit de la même façon les états issus du réservoir de droite à l'aide de t' et r'.

On introduit maintenant les opérateurs de créations et d'annihilations pour ces états. On définit ainsi les opérateurs $a_{\alpha n}^{\dagger}(E)$ et $a_{\alpha n}(E)$ créant et annihilant des électrons originaire du réservoir α et incident sur la région mésoscopique dans le mode n et d'énergie totale E. L'opérateur $a_{Ln}^{\dagger}(E)$ crée donc à partir du vide un électron dans l'état diffusé $\psi_{Ln}(x, \mathbf{r}_{\perp})$. Malgré que ces derniers opérateurs soient suffisant pour la description du système, il est commode d'introduire les opérateurs $b_{\alpha n}^{\dagger}(E)$ et $b_{\alpha n}(E)$ qui créent et annihilent des électrons dans le fils α et s'éloignant de la région mésoscopique vers le réservoir α . Comme les amplitudes de la section §2.4.1, ces opérateurs ne sont pas indépendants et sont reliés par la matrice de diffusion s [17] :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_{L1} \\ \vdots \\ \mathbf{b}_{LN_L} \\ \mathbf{b}_{R1} \\ \vdots \\ \mathbf{b}_{RN_R} \end{pmatrix} = \mathbf{s} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{L1} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{LN_L} \\ \mathbf{a}_{R1} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{RN_R} \end{pmatrix},$$
(2.17)

où l'on a laissé tomber la dépendance en *E* pour alléger la notation. En composantes, ces expressions s'écrivent

$$\boldsymbol{b}_{\alpha n} = \sum_{\beta = L,R} \sum_{n'} s_{\alpha n,\beta n'} \boldsymbol{a}_{\beta n'}$$
$$\boldsymbol{b}_{\alpha n}^{\dagger} = \sum_{\beta = L,R} \sum_{n'} \boldsymbol{a}_{\beta n'}^{\dagger} \boldsymbol{s}_{\beta n',\alpha n}^{\ast}.$$
(2.18)

Puisque les opérateurs $a_{\alpha n}^{(\dagger)}$ et $b_{\alpha n}^{(\dagger)}$ créés et annihiles des électrons, qui sont des fermions, ceuxci n'obéissent donc évidemment pas à la règle de commutation des opérateurs de création et annihilation de l'oscillateur harmonique, qui s'applique aux bosons. En effet, le principe de Pauli nous apprend que, contrairement aux bosons, l'occupation $N_{\alpha n}$ d'un mode *n* du fil α ne peut être que $N_{\alpha n} = 0$ ou $N_{\alpha n} = 1$ (en ignorant le spin). Les relations suivantes nous assurent que le principe de Pauli est satisfait

$$\begin{aligned} a_{\alpha n}^{\dagger} a_{\alpha n} |\phi\rangle &= N_{\alpha n} |\phi\rangle \\ a_{\alpha n} a_{\alpha n}^{\dagger} |\phi\rangle &= (1 - N_{\alpha n}) |\phi\rangle, \end{aligned}$$
(2.19)

pour un état $|\phi\rangle = |N_{\alpha 1}, N_{\alpha 2}, \cdots\rangle$ arbitraire. La seconde égalité reflète bien le fait que si un état est déjà occupé $(N_{\alpha n} = 1)$, appliquer d'abord l'opérateur de création donne $a_{\alpha n}a^{\dagger}_{\alpha n}|\phi\rangle = 0$. En additionnant ces deux relations, on obtient la relation d'anticomutation des fermions dans pour un même état d'indices αn .

$$\{\boldsymbol{a}_{\alpha n}, \boldsymbol{a}_{\alpha n}^{\dagger}\} = 1. \tag{2.20}$$

De même, le principe de Pauli nous assure que $(a_{\alpha n})^2 |\phi\rangle = (a_{\alpha n}^{\dagger})^2 |\phi\rangle = 0$ pour tout $|\phi\rangle$. On conclut que

$$\{\boldsymbol{a}_{\alpha n}, \boldsymbol{a}_{\alpha n}\} = \{\boldsymbol{a}_{\alpha n}^{\dagger}, \boldsymbol{a}_{\alpha n}^{\dagger}\} = 0.$$
(2.21)

Généraliser ces relations à des modes différents demande un peu plus de travail. Cette généralisation est basée sur le constat simple que si l'on échange à deux reprises deux particules indistinguables, la fonction d'onde ne peut être modifiée. Ainsi, si l'on échange les particules une seule fois, la fonction d'onde peut acquérir une phase de ± 1 . Si cette phase est +1 on dira alors que l'on a affaire à des bosons et pour -1 à des fermions [8]. Combiné à ce que l'on a vu ci-haut, on en déduit pour les fermions que

$$\{\boldsymbol{a}_{\alpha n}(E), \boldsymbol{a}_{\alpha' n'}^{\mathsf{T}}(E')\} = \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{n, n'} \delta(E - E')$$
(2.22)

$$\{\boldsymbol{a}_{\alpha n}(E), \boldsymbol{a}_{\alpha' n'}(E')\} = 0 \tag{2.23}$$

$$\{a_{\alpha n}^{\dagger}(E), a_{\alpha' n'}^{\dagger}(E')\} = 0, \qquad (2.24)$$

où l'on a remis l'indice *E* explicitement. Les opérateurs $b_{\alpha n}$ respectent les mêmes règles d'anticommutation. Comme il se doit, on trouve bien à l'aide de ces relations que l'échange de deux fermions change le signe de la fonction d'onde. Considérons par exemple, l'état à deux particules $|\psi\rangle = a_{\alpha n}^{\dagger} a_{\alpha' n'}^{\dagger}|0\rangle$. Si l'on change les indices des opérateurs de création on obtient bien $|\psi\rangle \rightarrow -|\psi\rangle$ puisque $a_{\alpha n}^{\dagger} a_{\alpha' n'}^{\dagger} = -a_{\alpha' n'}^{\dagger} a_{\alpha n}^{\dagger}$. Une démonstration plus rigoureuse, due à Wigner et Jordan, se base sur l'observation que [18]

$$a_{\alpha n}^{\dagger} | N_{\alpha 1}, \cdots, N_{\alpha, n}, \cdots \rangle = (-1)^{\Sigma} (1 - N_{\alpha, n}) | N_{\alpha 1}, \cdots, N_{\alpha, n} + 1, \cdots \rangle$$

$$(2.25)$$

$$\boldsymbol{a}_{\alpha n}|N_{\alpha 1},\cdots,N_{\alpha,n},\cdots\rangle = (-1)^{\Sigma}N_{\alpha,n}|N_{\alpha 1},\cdots,N_{\alpha,n}-1,\cdots\rangle, \qquad (2.26)$$

avec

$$(-1)^{\Sigma} = (-1)^{N_{\alpha 1} + N_{\alpha 2} + \dots + N_{\alpha n-1}}.$$
(2.27)

Ce dernier terme correspond à un facteur de phase de -1 pour chaque particule (c.-à-d. chaque état occupé) à la gauche de l'état α , *n* dans la fonction d'onde.

2.5.2 Opérateur courant

On définit maintenant $\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r},t)$ et $\hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t)$ les opérateurs annihilant et créant un électron au point \mathbf{r} dans le fil α au temps t. Dans le fil de gauche, ces opérateurs prennent la forme

$$\hat{\boldsymbol{\Psi}}_{L}(\boldsymbol{r},t) = \int dE \, e^{-iEt/\hbar} \sum_{n} \left[\boldsymbol{a}_{Ln} \phi_{nE}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}_{\perp}) + \boldsymbol{b}_{Ln} \phi_{nE}^{-}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}_{\perp}) \right]$$
(2.28)

$$\hat{\Psi}_{L}^{\dagger}(\boldsymbol{r},t) = \int dE \, e^{+iEt/\hbar} \sum_{n} \Big[\boldsymbol{a}_{Ln}^{\dagger} \phi_{nE}^{+*}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}_{\perp}) + \boldsymbol{b}_{Ln}^{\dagger} \phi_{nE}^{-*}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}_{\perp}) \Big].$$
(2.29)

On utilisera le symbole $\hat{}$ afin de se souvenir qu'il s'agit d'opérateurs et non pas de fonctions d'onde. Appliquer ces opérateurs sur le vide $|0\rangle$ donne bien un état dont la fonction d'onde est donnée par l'Éq. (2.10) avec $x \in L$ et où l'on a intégré sur toutes les énergies et évolué jusqu'au temps t.

On obtient l'opérateur courant à partir de ces opérateurs de création et d'anhihiliation

$$\hat{I}(x,t) = \frac{\hbar e}{2im} \int d\mathbf{r}_{\perp} \left[\hat{\Psi}_{L}^{\dagger} \partial_{x} \hat{\Psi}_{L} - (\partial_{x} \hat{\Psi}_{L}^{\dagger}) \hat{\Psi}_{L} \right].$$
(2.30)

Il s'agit de l'opérateur dont la valeur moyenne est donnée par l'expression plus usuelle de l'Éq. (2.14). Le courant n'est évalué qu'à la gauche de la région mésoscopique mais, en raison de la conservation du courant, cela est suffisant (nous aurions pu de façon équivalente le déterminer à la droite). Notons aussi que $\hat{\Psi}_L$ contient l'information sur les ondes électroniques se propageant vers la droite et vers la gauche. Comme dans le calcul plus simple de la section §2.3, on tient donc compte de la contribution au courant des électrons se déplaçant en sens opposé.

On évalue maintenant $\hat{I}(x)$ à partir de la définition de $\hat{\Psi}_L(\mathbf{r},t)$. À l'aide de l'expression Éq. (2.11) pour les fonctions d'ondes $\phi_{nE}^{\pm}(x,\mathbf{r}_{\perp})$, on obtient d'abord pour la dérivée spatiale dans la direction longitudinale

$$\partial_x \hat{\Psi}_L = i \sum_{n'} \int dE' \frac{e^{-iE't/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar\nu_{n'}(E')}} \chi_{n'}(\boldsymbol{r}_\perp) k_{n'}(E') [\boldsymbol{a}_{n'L}(E')e^{ik_{n'}(E')x} - \boldsymbol{b}_{n'L}(E')e^{-ik_{n'}(E')x}]$$
(2.31)

et donc

$$\int d\mathbf{r}_{\perp} \hat{\Psi}_{L}^{\dagger} \partial_{x} \hat{\Psi}_{L} = i \sum_{n,n'} \iint dE dE' \int d\mathbf{r}_{\perp} \frac{e^{i(E-E')t/\hbar}}{2\pi\hbar\sqrt{v_{n}(E)v_{n}'(E')}} \chi_{n}(\mathbf{r}_{\perp})\chi_{n'}(\mathbf{r}_{\perp})k_{n'}(E')$$
(2.32)

$$\times [\mathbf{a}^{\dagger}_{\perp}(E)e^{-ik_{n}(E)x} + \mathbf{b}^{\dagger}_{\perp}(E)e^{ik_{n}(E)x}][\mathbf{a}_{\perp} u(E')e^{ik_{n'}(E')x} - \mathbf{b}_{\perp} u(E')e^{-ik_{n'}(E')x}]$$

$$\times [a_{nL}(E)e^{-i[k_{n}(E)-k_{n}(E')]x} - b_{nL}^{\dagger}(E)e^{-i[k_{n}(E)-k_{n}(E')]x} - b_{nL}^{\dagger}(E)b_{nL}(E')e^{+i[k_{n}(E)-k_{n}(E')]x} - a_{nL}^{\dagger}(E)b_{nL}(E')e^{-i[k_{n}(E)-k_{n}(E')]x} + b_{nL}^{\dagger}(E)a_{nL}(E')e^{+i[k_{n}(E)+k_{n}(E')]x}],$$

$$(2.33)$$

où l'on a utilisé l'orthonormalité des fonctions propres $\chi_n(\mathbf{r}_{\perp})$ dans la seconde égalité. En répétant le même calcul pour $(\partial_x \hat{\Psi}_L^{\dagger}) \hat{\Psi}_L$ et utilisant $k_n(E) = mv_n(E)/\hbar$, on obtient finalement

$$\hat{I}(x,t) = \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_{n} \iint dEdE' \frac{e^{i(E-E')t/\hbar}}{\sqrt{v_{n}(E)v_{n}(E')}} \times \left\{ \left[v_{n}(E) + v_{n}(E') \right] \left[e^{i[k_{n}(E') - k_{n}(E)]x} a_{Ln}^{\dagger}(E) a_{Ln}(E') - e^{i[k_{n}(E') - k_{n}(E')]x} b_{Ln}^{\dagger}(E) b_{Ln}(E') \right] + \left[v_{n}(E) - v_{n}(E') \right] \left[e^{-i[k_{n}(E') + k_{n}(E)]x} a_{Ln}^{\dagger}(E) b_{Ln}(E') - e^{i[k_{n}(E') + k_{n}(E')]x} b_{Ln}^{\dagger}(E) a_{Ln}(E') \right] \right\}.$$
(2.34)

On simplifie cette expression en se rappelant que seules les énergies autour de la fenêtre de transport sont importantes. C'est en effet ce que l'on avait trouvé pour le courant moyen dans l'approche simple de la section §2.3. De même, la vitesse $v_n(E)$ ne change que lentement avec l'énergie. Ainsi, en supposant que la fenêtre de transport est petite, on laisse tomber les dépendances en énergie de $v_n(E)$ et $k_n(E)$ pour obtenir

$$\hat{I}(x,t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{n} \iint dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} [a_{Ln}^{\dagger}(E)a_{Ln}(E') - b_{Ln}^{\dagger}(E)b_{Ln}(E')].$$
(2.35)

Si ce n'était de la présence d'énergies différentes E et E', l'expression pour l'opérateur courant ferait intervenir la différence entre les opérateurs de nombre d'occupation $n_{Ln}^+ = a_{Ln}^+(E)a_{Ln}(E)$ et $n_{Ln}^- = b_{Ln}^+(E)b_{Ln}(E)$ correspondant aux électrons se déplaçant vers la droite et la gauche respectivement. Un résultat qui semble raisonnable.

Afin d'obtenir notre expression finale pour l'opérateur courant, on profite maintenant du fait que les opérateurs $a_{\alpha n}(E)$ et $b_{\alpha n}(E)$ ne sont pas indépendants. On choisit ici d'exprimer $\hat{I}(x,t)$ à l'aide des opérateurs $a_{\alpha n}(E)$, c'est-à-dire en terme des électrons injectés par les contacts seulement. Ce choix est utile car ces électrons sont complètement caractérisés par la température et le potentiel chimique du réservoir dont ils sont issus. L'Éq. (2.18) nous permet d'écrire

$$\boldsymbol{b}_{Ln}^{\dagger}(E)\boldsymbol{b}_{Ln}(E') = \sum_{\alpha,\beta=L,R} \sum_{l,s} s_{\alpha l,Ln}^{*}(E) s_{Ln,\beta s}(E') \boldsymbol{a}_{\alpha l}^{\dagger}(E) \boldsymbol{a}_{\beta s}(E')$$
(2.36)

et donc d'exprimer $\hat{I}(x, t)$ sous la forme

$$\hat{I}(x,t) = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha,\beta=L,R} \sum_{n,l,s} \iint dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} A^{l,s}_{\alpha,\beta}(L,n;E,E') \boldsymbol{a}^{\dagger}_{\alpha l}(E) \boldsymbol{a}_{\beta s}(E'),$$
(2.37)

avec

$$A_{\alpha,\beta}^{l,s}(L,n;E,E') = \delta_{\alpha,L}\delta_{\beta,L}\delta_{l,n}\delta_{s,n} - s_{\alpha l,Ln}^*(E)s_{Ln,\beta s}(E').$$
(2.38)

2.5.3 Courant moyen : formule de Landauer

De l'opérateur courant, on obtient facilement l'expression pour le courant moyen. Supposant comme plus haut que les contacts sont à l'équilibre thermique, le calcul de cette valeur moyenne est simple en rappelant que

$$\langle \boldsymbol{a}_{\alpha l}^{\dagger}(E)\boldsymbol{a}_{\beta s}(E')\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ls}\delta(E-E')f_{\alpha}(E), \qquad (2.39)$$

avec $f_{\alpha}(E)$ la fonction de distribution de Fermi-Dirac. La valeur moyenne de l'opérateur courant prend donc la forme

$$\langle \hat{I}(x) \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha,\beta=L,R} \sum_{n,l,s} \iint dE dE' e^{i(E-E')t/\hbar} A^{l,s}_{\alpha,\beta}(L,n;E,E') \delta_{\alpha\beta} \delta_{ls} \delta(E-E') f_{\alpha}(E)$$

$$= \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha=L,R} \sum_{n,l} \int dE A^{l,l}_{\alpha,\alpha}(L,n;E,E) f_{\alpha}(E)$$

$$= \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha=L,R} \sum_{n,l} \int dE [\delta_{\alpha,L} \delta_{l,n} - s^{*}_{\alpha l,Ln}(E) s_{Ln,\alpha l}(E)] f_{\alpha}(E).$$

$$(2.40)$$

En sommant explicitement sur l'index de contact α , on a donc

$$\langle \hat{I}(x) \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{n,l} \int dE \left\{ [\delta_{L,L} \delta_{l,n} - s^*_{Ll,Ln}(E) s_{Ln,Ll}(E)] f_L(E) + [\delta_{R,L} \delta_{l,n} - s^*_{Rl,Ln}(E) s_{Ln,Rl}(E)] f_R(E) \right\}$$

$$= \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{n,l} \int dE \left\{ [\delta_{l,n} - s^*_{Ll,Ln}(E) s_{Ln,Ll}(E)] f_L(E) - s^*_{Rl,Ln}(E) s_{Ln,Rl}(E) f_R(E) \right\}.$$

$$(2.41)$$

Supposant qu'il n'y a pas de champ magnétique, nous utiliserons le fait que la matrice de diffusion est symétrique de sorte que $s_{\alpha n,\beta m}(E) = s_{\beta m,\alpha n}(E)$. Nous utiliserons aussi $s_{Ll,Ln}(E) = r_{ln}$ et $s_{Rl,Ln}(E) = t_{ln}$, avec r et t les sous-matrices définies à l'Éq. (2.13). On a donc

$$\langle \hat{I}(x) \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{n,l} \int dE \left\{ [\delta_{l,n} - r_{ln}^*(E)r_{ln}(E)]f_L(E) - t_{ln}^*(E)t_{ln}(E)f_R(E) \right\}$$

$$= \frac{e}{2\pi\hbar} \int dE \left\{ \left[N_L - \mathrm{Tr}[r^{\dagger}(E)r(E)] \right] f_L(E) - \mathrm{Tr}[t^{\dagger}(E)t(E)]f_R(E) \right\}$$

$$(2.42)$$

avec N_L le nombre de modes dans le fil de gauche. Dans la deuxième égalité, nous avons utilisé

$$\operatorname{Tr}[r^{\dagger}r] = \sum_{n} (r^{\dagger}r)_{nn} = \sum_{n,l} (r^{\dagger})_{nl}(r)_{ln} = \sum_{n,l} r_{ln}^{*} r_{ln}$$
(2.43)

afin d'écrire le résultat sous la forme d'une trace. En vertu de l'unitarité de la matrice de diffusion, on a $t^{\dagger}(E)t(E) + r^{\dagger}(E)r(E) = \mathbb{I}$ de sorte que

$$\langle \hat{I}(x) \rangle = \frac{e}{2\pi\hbar} \int dE \operatorname{Tr}[t^{\dagger}(E)t(E)] \{ f_L(E) - f_R(E) \}$$
(2.44)

puisque $Tr[I] = N_L$. Ce résultat a une forme qui s'approche de l'Éq. (2.8) que nous avions obtenu plus simplement.
On obtient le résultat standard de Landauer en ce plaçant à basse température, de sorte que $f_{\alpha}(E) \approx \theta(\mu_L - E)$, et en supposant à nouveau que le voltage appliqué $V = (\mu_L - \mu_R)/e$ est faible, de sorte que l'on puisse évaluer toutes les expressions à l'énergie de Fermi. On obtient

$$\langle \hat{I}(x) \rangle = 2 \times \frac{e^2}{2\pi\hbar} \operatorname{Tr}[t^{\dagger}(E_F)t(E_F)]V = \frac{2e^2}{h} \operatorname{Tr}[t^{\dagger}(E_F)t(E_F)]V, \qquad (2.45)$$

où l'on a ajouté un facteur 2 pour tenir compte du spin. Nous aurions pu ajouter des indices de spin σ dès le début du calcul pour en tenir compte. En divisant par le voltage V on obtient finalement

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[t^{\dagger}(E_F)t(E_F)],$$
 (2.46)

le résultat de Landauer. On peut aussi écrire ceci dans une forme légèrement différente en diagonalisant la matrice $t^{\dagger}(E)t(E)$. On notera les valeurs propres de cette matrice T_n . Ces dernières sont réelles, comprises entre 0 et 1, et représentent les probabilités de transmission des différents modes. On peut finalement écrire la conductance sous la forme

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n=1}^{N_L} T_n.$$
 (2.47)

La conductance est donc la somme sur la probabilité de transmission de chacun des modes, multipliée par le quantum de conductance $2e^2/h$.

2.5.4 Résistance de contacts

D'où provient cette résistance finie dans le régime balistique? Afin de répondre à cette question, considérons un échantillon supportant *M* modes tous de transmission unité. La formule de Landauer se réduit alors à

$$G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{M} \sim \frac{12.9 \,\mathrm{k}\Omega}{M}.$$
(2.48)

Cette résistance ne peut être due à la région mésoscopique puisque nous avons pris T = 1, en d'autres mots un conducteur parfait. Cette résistance provient en fait des contacts et c'est pour cette raison que l'indice *c* a été ajouté à la conductance *G* ci-haut.

Puisque les contacts sont toujours présents dans un système mésoscopique, cette résistance de contacts est aussi toujours présente. Prenons par exemple le cas d'un conducteur à un mode M = 1, mais de transmission non idéale T. On peut alors réécrire la formule de Landauer sous la forme

$$G^{-1} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{T} = \frac{h}{2e^2} + \frac{h}{2e^2} \frac{1-T}{T} \equiv G_c^{-1} + G_m^{-1}, \qquad (2.49)$$

avec $G_m^{-1} = (h/2e^2)(1-T)/T$ la partie de la résistance seulement due à la région mésoscopique. La résistance est donc l'addition en série de la contribution des contacts et de la région mésoscopique. La forme de G_m^{-1} semble raisonnable, car $G_m^{-1} \rightarrow 0$ pour $T \rightarrow 1$. La contribution de l'échantillon est nulle pour un conducteur parfait.

La résistance de contact provient des électrons entrant dans les contacts avec une distribution qui diffère de la distribution de Fermi-Dirac des contacts. En effet, les électrons arrivant au contact

de droite en provenance de celui de gauche sont injectés à des énergies plus grandes que μ_R . L'équilibration de ces électrons vers μ_R et T_R est un processus dissipatif qui cause une résistance. De la même façon, les électrons entrants injectés dans le réservoir de gauche en provenance de celui de droite le sont à une énergie où tous les états sont déjà occupés. Il doit donc y avoir diffusion afin qu'ils entrent dans le contact de gauche.

Mentionnons finalement que pour un conducteur macroscopique, le nombre de modes M est très grand et la résistance de contact négligeable. Ce n'est évidemment pas le cas de la plupart des systèmes mésoscopiques. On peut en fait estimer le nombre de modes d'un conducteur en se rappelant que l'espace entre les valeurs permises du vecteur d'onde transverse k sont $2\pi/W$ avec W la largeur de l'échantillon. Les électrons pertinents pour le transport se trouvent dans la gamme de vecteurs d'ondes $-k_F < k < k_F$ et le nombre de modes est donc

$$M = \left\lfloor \frac{2k_f}{2\pi/W} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{W}{\lambda_f/2} \right\rfloor$$
(2.50)

avec λ_f la longueur d'onde de Fermi et $\lfloor z \rfloor$ le plus grand entier plus petit que z. L'interprétation est simple : le nombre de modes correspond grossièrement aux nombres de longueurs d'onde de Fermi "entrant" dans l'échantillon.

2.5.5 Effet de la température et de la géométrie

À compléter [19]...

2.5.6 Point de contact quantique et détection de charge

À compléter...

2.5.7 États de bords

Voir Fig. 2.8 [20]. À compléter...

FIGURE 2.8: Les lignes pointillées verticales représentent les bords de l'échantillon.

2.5.8 Généralisation à plusieurs contacts : formule de Landauer-Büttiker

Le résultat obtenu jusqu'à présent s'applique à une situation à deux contacts, ou terminaux. En effet, on a imaginé appliquer un voltage entre deux contacts et mesurer le courant circulant entre ces deux mêmes terminaux. On s'intéresse toutefois souvent à une situation où un voltage est appliqué entre deux terminaux et un courant mesuré entre deux autres terminaux. On adaptera ici la formule de Landauer à cette situation plus générale. Cette généralisation est due à Markus Büttiker et le résultat connu sous le nom de formule de Landauer-Büttiker [21]. On ne considérera ici qu'un mode afin de simplifier la discussion.



Dans le cas à deux terminaux, on a déjà obtenu $I_1 = (2e^2/h)T_{21}V = (2e/h)T_{21}(\mu_1 - \mu_2)$. Le cas à plusieurs terminaux se généralise facilement à

$$I_{i} = \frac{2e}{h} \sum_{j \neq i} [T_{ji}\mu_{i} - T_{ij}\mu_{j}].$$
(2.51)

Considérons par exemple le courant dans le terminal #1 dans le circuit à trois terminaux illustré à la 1 2 3

FIGURE 2.9:

Fig. 2.9. La relation ci-haut nous donne le résultat auquel on est en droit de s'attendre, c'est-à-dire

$$I_1 = \frac{2e}{h}(T_{21} + T_{31})\mu_1 - \frac{2e}{h}(T_{12}\mu_2 + T_{13}\mu_3).$$
(2.52)

Ceci correspond aux porteurs sortant du terminal 1 avec le potentiel chimique μ_1 auquel on soustrait les porteurs sortant des terminaux 2 et 3, avec les potentiels chimiques μ_2 et μ_3 respectivement, et entrant dans le terminal 1. En l'absence de champ magnétique externe $T_{ij} = T_{ji}$ et l'Éq. (2.51) est le résultat que l'on obtiendrait en appliquant la loi de Kirchhoff à un réseau de conducteurs de conductance $G_{ij} = (2e^2/h)T_{ij}$. Cette conclusion ne s'applique toutefois pas en présence d'un champ magnétique puisque alors $T_{ij} \neq T_{ji}$. Notons toutefois que, même en présence d'un champ magnétique, la somme du courant dans chacun des contacts est nulle, $\sum_i I_i = 0$, en raison de la conservation du courant.

De même, si les potentiels chimiques sont égaux à tous les contacts, le courant net est nécessairement nul à chacun des contacts. On peut alors écrire

$$I_i = \sum_{j \neq i} \frac{2e}{h} [T_{ji} - T_{ij}] \mu = 0, \qquad (2.53)$$

ce qui implique que

$$\sum_{j\neq i} T_{ji} = \sum_{j\neq i} T_{ij}.$$
(2.54)

Cette règle de somme reste vraie même en présence d'un champ magnétique. Grâce à elle, on peut réécrire la formule de Landauer-Büttiker Eq. (2.51) sous la forme

$$I_{i} = \frac{2e}{h} \sum_{j} [T_{ji}\mu_{i} - T_{ij}\mu_{j}] = \frac{2e}{h} \sum_{j} T_{ji}\mu_{i} - \frac{2e}{h} \sum_{j} T_{ij}\mu_{j}$$

$$= \frac{2e}{h} \sum_{j} T_{ij}\mu_{i} - \frac{2e}{h} \sum_{j} T_{ij}\mu_{j} = \frac{2e}{h} \sum_{j \neq i} T_{ij}(\mu_{i} - \mu_{j}),$$
(2.55)

comme on est en droit de s'attendre.

Cas à 2 terminaux La conservation du courant implique que $I_1 + I_2 = 0$. En utilisant la forme Éq. (2.55) de l'équation de Landauer-Büttiker, on a donc

$$I_1 = \frac{2e}{h}T_{12}(\mu_1 - \mu_2) = -I_2 = -\frac{2e}{h}T_{21}(\mu_2 - \mu_1).$$
(2.56)

Ce résultat implique que $T_{12} = T_{21}$, et ce même en présence d'un champ magnétique. La matrice de diffusion est donc toujours symétrique s'il n'y a que deux terminaux. En particulier, dans une situation où le courant est dû aux états de bords, cette symétrie se comprend facilement. Un renversement du champ magnétique ne fera qu'inverser la direction de propagation des états de bords [c.-à-d. des flèches à la Fig. 2.10a)], sans pour autant changer la grandeur de la probabilité de transmission.





Cas à 3 terminaux En présence de plus de deux contacts, la symétrie mentionnée ci-haut est brisée. Considérons par exemple, le cas à trois terminaux illustré à la Fig. 2.10b). Dans ce système, la transmission T_{21} (flèche verte en trait plein) n'est en rien équivalente à la combinaison des transmissions T_{32} et T_{13} (flèches bleues pointillées). En particulier, puisque les contacts 'recyclent' les électrons, la cohérence de phase est perdue lorsque l'électron entre dans le contact #3 et qu'un autre électron est émis par ce même contact en direction du contact #1. On visualise toutefois bien que $T_{21}^B = T_{12}^{-B}$ même en présence d'un troisième contact puisque, sous inversion du champ magnétique, les états de bords changent simplement de direction de propagation (on ne fait qu'inverser l'orientation de la flèche verte correspondant à T_{21}).

Malgré que la symétrie des coefficients de transmission soit absente en présence d'un troisième contact, la résistance à deux terminaux reste elle-même symétrique si ce troisième contact est une sonde de voltage idéale. Pour montrer cela, on commence par écrire l'Éq. (2.51) sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \frac{2e}{h} \begin{pmatrix} T_{21} + T_{31} & -T_{12} & -T_{13} \\ -T_{21} & T_{12} + T_{32} & -T_{23} \\ -T_{31} & -T_{32} & T_{13} + T_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix}.$$
(2.57)

On supposera que le contact #3 est une sonde de voltage idéale, c'est-à-dire de résistance infinie et ce qui implique donc que $I_3 = 0$. En utilisant la dernière ligne de l'équation matricielle précédente, on trouve que le voltage mesuré au terminal #3 est par conséquent

$$\mu_3 = \frac{T_{31}\mu_1 + T_{32}\mu_2}{T_{13} + T_{23}} = \frac{T_{31}\mu_1 + T_{32}\mu_2}{T_{31} + T_{32}},$$
(2.58)

où l'on a utilisé la règle de somme Éq. (2.54) dans la seconde égalité. Notons aussi que, puisque la somme des courants dans les trois terminaux est nulle, on a nécessairement que $I \equiv I_1 = -I_2$.

Comme le montre bien la forme Éq. (2.55) de l'équation de Landauer-Büttiker, le courant ne dépend que de différences de voltage. On peut donc sans perte de généralité mettre un des voltages à zéro. On choisira ici $\mu_2 = 0$. Notons qu'il ne serait pas très utile de mettre μ_3 à zéro puisque l'on considère que ce terminal est une sonde de voltage. Dans ce cas et puisque l'on ne s'intéresse qu'à $I = I_1$, l'équation matricielle Éq. (2.57) se réduit à

$$\begin{pmatrix} I\\0 \end{pmatrix} = \frac{2e}{h} \begin{pmatrix} T_{21} + T_{31} & -T_{13}\\ -T_{31} & T_{13} + T_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1\\ \mu_3 \end{pmatrix}.$$
 (2.59)

À l'aide de cette expression, on cherche maintenant à déterminer la résistance à deux terminaux $R_{12,12} = (\mu_1 - \mu_2)/eI$. On comparera ensuite ce résultat à la valeur de $R_{12,12}$ que l'on obtient pour un système à deux terminaux. Ceci nous permettra de comprendre l'effet de la sonde de voltage. Pour cela, il est utile de commencer par déterminer la résistance $R_{12,13} = (\mu_1 - \mu_3)/eI$, correspondant au ratio du voltage entre les contacts 1 et 3 avec le courant circulant entre les contacts 1 et 2. Après un peu d'algèbre, on obtient

$$R_{12,13} = \frac{\mu_1 - \mu_3}{eI} = \frac{h}{2e^2} \frac{T_{13} + T_{23} - T_{31}}{D},$$
(2.60)

où $D = T_{13}T_{21} + T_{23}(T_{21} + T_{31})$. De la même façon, on obtient aussi

$$R_{12,32} = \frac{\mu_3 - \mu_2}{eI} = \frac{h}{2e^2} \frac{T_{31}}{D}.$$
 (2.61)

On obtient la résistance à deux terminaux $R_{12,12}$ en combinant ces deux résultats :

$$R_{12,12} = \frac{\mu_1 - \mu_2}{eI} = \frac{\mu_1 - \mu_3}{eI} + \frac{\mu_3 - \mu_2}{eI} = \frac{h}{2e^2} \frac{T_{13} + T_{23}}{D}.$$
 (2.62)

En utilisant à répétition la règle de somme Éq. (2.54), on vérifie que *D* est invariant sous inversion du champ magnétique. À nouveau à l'aide de la règle de somme, suivie de la propriété $s_{-B} = s_B^T$ de la matrice de diffusion, on vérifie qu'il en est de même pour $T_{13}^B + T_{23}^B = T_{31}^B + T_{32}^B = T_{13}^{-B} + T_{23}^{-B}$. On conclue donc que la résistance à deux terminaux $R_{12,12}^B = R_{12,12}^{-B}$ est elle-même invariante sous inversion de *B*. Nous avons déjà montré que cette symétrie est présente dans le cas à deux terminaux et on a ici vérifié qu'elle est préservée en présence d'une sonde de voltage.

Il est intéressant de remarquer que, dans la situation où la transmission vers et hors de la sonde de voltage est beaucoup plus faible que la transmission entre 1 et 2 ($T_{31} \ll T_{21}$), la résistance se réduit à $R_{12,12}^{-1} \sim (2e^2/h)T_{21}$. Ceci correspond au résultat à deux terminaux. Si l'on ne se place pas dans cette limite toutefois, $R_{12,12}$ en présence d'une sonde de voltage diffère du résultat obtenu en l'absence de cette sonde. Donc, la présence d'une sonde de voltage modifie le courant entre les terminaux 1 et 2 et ce même si le courant net I_3 dans cette sonde est nul. Il s'agit d'une illustration du fait qu'en mécanique quantique, toutes mesures à une rétroaction sur le système mesuré.

Une façon d'interpréter cette rétroaction a déjà été mentionnée plus haut : la sonde brise la cohérence de phase. En effet, puisqu'il n'y a aucun courant net dans la sonde, tous les électrons incidents sont réémis par la sonde. Ces derniers n'ont toutefois plus aucune relation de phase avec les électrons incidents. On peut confirmer cette intuition en réécrivant $D/(T_{13} + T_{23})$ entrant dans $R_{12,12}$ comme

$$\frac{D}{T_{13} + T_{23}} = T_{12} + \left(\frac{1}{T_{31}} + \frac{1}{T_{32}}\right)^{-1},$$
(2.63)

où l'on a supposé B = 0 pour simplifier la discussion. Le premier terme de cette expression correspond à la contribution cohérence entre 1 et 2, et le second terme à l'addition incohérente des transmissions reliées à la sonde. En effet, dans la situation où la transmission vers et hors de la sonde est nulle, seule la contribution cohérence T_{12} est présente. À l'opposé, dans la limite où T_{12} est petit devant l'effet de la sonde, la résistance prend la forme

$$R_{12,12} \approx \frac{h}{2e^2} \left(\frac{1}{T_{31}} + \frac{1}{T_{32}} \right).$$
(2.64)

Ceci correspond à l'addition en série de deux résistances, sans aucune cohérence entre elles.

2.5.9 Effet Aharonov-Bohm

On revient maintenant à la situation présentée à la Fig. 1.8 où on s'intéresse au courant dans un anneau de taille mésoscopique en présence d'un champ magnétique. Tel que discuté alors, on observe expérimentalement que ce courant est une fonction oscillante du flux dans l'anneau. On peut comprendre cette dépendance en réalisant que la probabilité pour un électron de traverser l'anneau est reliée à la somme cohérente des amplitudes de probabilité associées à chacune des branches :

$$T = |t_1 + t_2|^2 = |t_1|^2 + |t_2|^2 + 2\operatorname{Re}[t_1 t_2^*].$$
(2.65)

On montre maintenant qu'en présence d'un flux magnétique dans l'anneau, une phase distincte $\varphi_{i=1,2}$ est associée à ces deux parcours : $t_i \rightarrow t_i \exp(i\varphi_i)$.

Notre point de départ est l'Hamiltonien de couplage minimal pour une particule non relativiste de charge *e* et de masse *m* :

$$H = \frac{(P - eA)^2}{2m} + e\phi,$$
 (2.66)

où A = A(R, t) est l'opérateur potentiel vecteur et $\phi = \phi(R, t)$ l'opérateur potentiel électrique. Afin de comprendre l'effet du champ sur le transport, on commence par simplifier l'Hamiltonien en y éliminant ces deux potentiels. Ceci ce fait facilement en suivant l'approche de la Sec. 1.7, c'est-à-dire en définissant une transformation unitaire tel que le ket $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ évolue selon l'Hamiltonien transformé $H' = UHU^{-1} - i\hbar U\dot{U}^{-1}$ où les champs électromagnétiques n'apparaissent plus. Pour ce faire, on utilise la transformation

$$U = e^{ie\Upsilon(\mathbf{R},t)/\hbar},\tag{2.67}$$

avec $\Upsilon(\mathbf{R}, t)$ un opérateur à déterminer. Avec ce choix, on obtient immédiatement

$$H' = \frac{1}{2m} (UPU^{-1} - eA)^2 + e\phi - iU\dot{U}^{-1}.$$
 (2.68)

Le premier membre de droite de cette expression se simplifie en utilisant la formule de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^{A}Be^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots$$
 (2.69)

Dans la situation qui nous intéresse ici, cette transformation mène à

$$e^{ie\Upsilon(\mathbf{R},t)/\hbar}\mathbf{P}e^{-ie\Upsilon(\mathbf{R},t)/\hbar} = \mathbf{P} - e\nabla\Upsilon(\mathbf{R},t), \qquad (2.70)$$

où l'on a utilisé le fait que le commutateur d'une fonction arbitraire de *X* avec *P* est $[F(X), P] = i\hbar\partial F(X)/\partial X$. De même, pour le second terme du membre de droite, on a $-iU\dot{U}^{-1} = -e\partial_t \Upsilon/\hbar$ de sorte que l'Hamiltonien transformé est

$$H' = \frac{1}{2m} [\boldsymbol{P} - \boldsymbol{e}(\boldsymbol{A} + \nabla \boldsymbol{\Upsilon})]^2 + \boldsymbol{e}(\phi - \partial_t \boldsymbol{\Upsilon}/\hbar).$$
(2.71)

Avec le choix $\nabla \Upsilon = -\mathbf{A}$ et $\phi = \partial_t \Upsilon / \hbar$, H' se réduit à l'Hamiltonien d'une particule libre et dont la solution est une simple onde plane. Dans ce contexte, cette transformation unitaire est généralement connue sous le nom de transformation de jauge.

On revient au référentiel du laboratoire en appliquant la transformation inverse $|\psi\rangle = U^{-1}|\psi'\rangle$. Dans le cas où il n'y a pas de potentiel électrique, $\phi = \partial_t \Upsilon/\hbar = 0$ et $\Upsilon(\mathbf{R}) = \int \nabla \Upsilon \cdot d\mathbf{r} = -\int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$, de sorte que la transformation U^{-1} correspond à une phase $\varphi = (e/\hbar) \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$. Puisqu'une phase globale n'est pas importante en mécanique quantique, on pourrait penser que la présence de φ ne change pas les prédictions physiques. Cette phase n'est toutefois pas globale, mais plutôt locale, car elle dépend de la position et donc en principe du parcours de la charge dans l'espace. Cependant, puisque cette phase peut s'exprimer comme l'intégrale d'un gradient, elle ne dépend pas des détails du parcours mais seulement des points initiaux et finaux. Ainsi, il semble que cette phase sera toujours nulle si l'on s'intéresse à un parcours fermé. On peut comprendre cela par le fait que, puisque seuls les points initiaux et finaux comptent, il toujours possible de déformer un parcours d'intégration fermé de façon à le réduire à un parcours infinitésimal pour lequel la contribution à la phase est nulle.

La situation est plus intéressante dans un espace de topologie non triviale comme celle de l'interféromètre de la Fig. 1.8. En effet, le centre de l'anneau agit essentiellement comme un 'trou' dans l'espace, un endroit que l'électron ne peut occuper. Dans cette situation, il n'est plus possible de déformer une trajectoire entourant l'anneau vers une trajectoire triviale de sorte que la phase pourra être non nulle. On peut voir ceci plus explicitement en calculant la phase relative accumulée par un électron parcourant simultanément les deux branches de l'interféromètre. Cette phase est en effet

$$\delta \varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = \frac{e}{\hbar} \int_1 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \frac{e}{\hbar} \int_2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$$

$$= \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{e}{\hbar} \int_S \mathbf{B} dS = \frac{e}{\hbar} \Phi,$$
 (2.72)

où *B* est le champ magnétique, *S* la surface de l'anneau et donc $\Phi = BS$ le flux magnétique dans l'anneau. Contrairement à la situation typique en mécanique quantique, cette phase ne dépend pas de l'énergie et du temps mais plutôt de l'aire, et donc de la géométrique du parcours de l'électron. Il s'agit d'un exemple de phase dite géométrique en mécanique quantique. Il est aussi intéressant de remarquer que cette phase dépend du flux présent dans le 'trou' de l'interféromètre, un endroit qui n'est jamais visité par les électrons !

En utilisant ce résultat, et tel qu'annoncé en début de section, on trouve que la transmission, et donc la conductance, est une fonction oscillante du flux magnétique

$$G = \frac{2e^2}{h}T = \frac{2e^2}{h}\left(|t_1|^2 + |t_2|^2 + 2\operatorname{Re}[t_1t_2^*]\right) = G_1 + G_2 + \frac{2e^2}{h}4|t_1||t_2|\cos(e\Phi/\hbar),$$
(2.73)

où $G_i = (2e^2/h)|t_i|^2$. La première vérification expérimentale de cette dépendance dans un anneau métallique est due à Webb *et al* [22]. Cet effet a depuis été étudié dans des 2DEGs et avec plusieurs raffinements [23]

2.6 Fluctuations de courant

On s'intéresse dans cette section aux fluctuations du courant par rapport à la moyenne. Il est donc utile de définir l'opérateur $\Delta I(t) = I(t) - \langle I \rangle$. La fonction de corrélation courant-courant prend

la forme [17]

$$G_{II}(t) = \langle \Delta \mathbf{I}(t) \Delta \mathbf{I}(0) \rangle. \tag{2.74}$$

On s'intéressera au spectre des fluctuations de courant, c'est-à-dire à

$$S_{II}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{+i\omega t} G_{II}(t).$$
(2.75)

On commence par déterminer $G_{II}(t)$ qui se simplifie pour s'écrire sous la forme

$$G_{II}(t) = \langle [\mathbf{I}(t) - \langle \mathbf{I} \rangle] [\mathbf{I}(0) - \langle \mathbf{I} \rangle] \rangle$$

= $\langle \mathbf{I}(t)\mathbf{I}(0) \rangle - \langle \mathbf{I}(t) + \mathbf{I}(0) \rangle \langle \mathbf{I} \rangle + \langle \mathbf{I} \rangle^{2}$
= $\langle \mathbf{I}(t)\mathbf{I}(0) \rangle - \langle \mathbf{I} \rangle^{2},$ (2.76)

où on a profité du fait que la valeur moyenne ne dépend pas du temps, $\langle I(t) \rangle = \langle I \rangle$. Nous avons déjà l'expression pour le courant moyen, Éq. (2.44), il ne reste donc qu'a déterminer le corrélateur $\langle I(t)I(0) \rangle$. Pour ce calcul, on utilise directement l'Éq. (2.37) de l'opérateur courant que l'on multiplie par deux pour tenir compte du spin. On a donc

$$\langle \mathbf{I}(t)\mathbf{I}(0) \rangle = \left(\frac{e}{\pi\hbar}\right)^{2} \sum_{\substack{\alpha,\beta \\ \alpha',\beta'}} \sum_{\substack{n,l,s \\ n',l',s'}} \iiint dE_{1}dE_{2}dE_{3}dE_{4}e^{i(E_{1}-E_{2})t/\hbar} \\ \times A_{\alpha,\beta}^{l,s}(L,n;E_{1},E_{2})A_{\alpha',\beta'}^{l',s'}(L,n';E_{3},E_{4})\langle \mathbf{a}_{\alpha l}^{\dagger}(E_{1})\mathbf{a}_{\beta s}(E_{2})\mathbf{a}_{\alpha' l'}^{\dagger}(E_{3})\mathbf{a}_{\beta' s'}(E_{4}) \rangle.$$

$$(2.77)$$

On utilise le théorème de Wick afin d'évaluer la valeur moyenne des quatre opérateurs de création et d'annihilation. Ce théorème nous apprend que la moyenne d'un produit de *n* opérateurs de création avec *n* opérateurs d'annihilation est égale à la somme de toutes les contractions possibles, chacune prise avec le signe de la permutation nécessaire pour amener tous les opérateurs immédiatement à côté de leur partenaire en contraction [10, 18]. On a donc

$$\langle a_1^{\dagger} a_2 a_3^{\dagger} a_4 \rangle = \langle a_1^{\dagger} a_2 \rangle \langle a_3^{\dagger} a_4 \rangle + \langle a_1^{\dagger} a_4 \rangle \langle a_2 a_3^{\dagger} \rangle$$
(2.78)

où l'on a laissé tomber toutes les contractions n'ayant pas le même nombre d'opérateurs de création et d'annihilation (ie $\langle a_i \rangle$, $\langle a_i a_j \rangle$...) car celles-ci s'annulent dans l'état thermique. En raison de l'anticommutation des opérateurs fermioniques

$$\langle \boldsymbol{a}_2 \boldsymbol{a}_3^{\dagger} \rangle = \delta_{23} - \langle \boldsymbol{a}_3^{\dagger} \boldsymbol{a}_2 \rangle, \tag{2.79}$$

et on peut écrire

$$\langle a_1^{\dagger} a_2 a_3^{\dagger} a_4 \rangle = \langle a_1^{\dagger} a_2 \rangle \langle a_3^{\dagger} a_4 \rangle + \langle a_1^{\dagger} a_4 \rangle (\delta_{23} - \langle a_3^{\dagger} a_2 \rangle).$$

$$(2.80)$$

On a donc pour la valeur moyenne des quatre opérateurs fermioniques

$$\langle \boldsymbol{a}_{\alpha l}^{\dagger}(E_1)\boldsymbol{a}_{\beta s}(E_2)\boldsymbol{a}_{\alpha' l'}^{\dagger}(E_3)\boldsymbol{a}_{\beta' s'}(E_4) \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha'\beta'}\delta_{ls}\delta_{l's'}\delta(E_1 - E_2)\delta(E_3 - E_4)f_{\alpha}(E_1)f_{\alpha'}(E_3) + \delta_{\alpha\beta'}\delta_{\alpha'\beta}\delta_{ls'}\delta_{l's}\delta(E_1 - E_4)\delta(E_2 - E_3)f_{\alpha}(E_1)[1 - f_{\beta}(E_2)],$$

$$(2.81)$$

où l'on a utilisé l'Éq. (2.39) pour $\langle a_i^{\dagger}a_j \rangle$. Le premier terme de cette expression résultera en $\langle I \rangle^2$ qui vient annuler le $-\langle I \rangle^2$ déja présent à l'Éq. (2.76). Il ne reste donc plus qu'à évaluer la contribution du dernier terme. On obtient

$$G_{II}(t) = \left(\frac{e}{\pi\hbar}\right)^2 \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\substack{n,n'\\l,s}} \iint dE_1 dE_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} A^{l,s}_{\alpha,\beta}(L,n;E_1,E_2) A^{s,l}_{\beta,\alpha}(L,n';E_2,E_1) f_\alpha(E_1) [1 - f_\beta(E_2)]$$
(2.82)

On prend maintenant la transformée de Fourier de cette expression pour obtenir le spectre. Pour cela, on profite du fait que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i\omega t} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} = 2\pi\hbar\delta(E_1 - E_2 + \hbar\omega) \tag{2.83}$$

afin d'obtenir pour le spectre en fréquence

$$\mathcal{S}_{II}(\omega) = \frac{2e^2}{\pi\hbar} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\substack{n,n'\\l,s}} \int dE A^{l,s}_{\alpha,\beta}(L,n;E,E+\hbar\omega) A^{s,l}_{\beta,\alpha}(L,n';E+\hbar\omega,E) f_{\alpha}(E) [1 - f_{\beta}(E+\hbar\omega)].$$
(2.84)

Il faut maintenant injecter dans cette expression compacte la définition (2.38) des coefficients $A_{\alpha,\beta}^{l,s}$. Le calcul devient rapidement passablement lourd mais suit essentiellement celui de l'Éq. (2.40) où les propriétés d'unitarité et de symétrie de la matrice *S* sont utilisées. Afin de simplifier la discussion, on se concentre ici sur le résultat à fréquence nulle, pour lequel on obtient

$$S_{II}(0) = 2\frac{2e^2}{h} \sum_{n} \int dE \left(T_n(E) \left[f_L(E) [1 - f_L(E)] + f_R(E) [1 - f_R(E)] \right] + T_n(E) [1 - T_n(E)] [f_L(E) - f_R(E)]^2 \right),$$
(2.85)

où comme précédemment $T_n(E)$ est une valeur propre de la matrice $t^{\dagger}(E)t(E)$. Considérons quelques cas limites de cette expression enfin de mieux la comprendre.

2.6.1 Bruit à l'équilibre

On commence par s'intéresser à la situation s'approchant de l'équilibre, soit très petite fenêtre de transport, et à la température arbitraire *T*. Dans cette situation, $f_L(E) \approx f_R(E) \equiv f(E)$. Le second terme de $S_{II}(0)$ étant au second ordre en $f_L - f_R$, nous le négligerons ici. Utilisant la relation $f[1-f] = -k_B T \partial f / \partial E$, on a donc

$$S_{II}(0) = -4k_B T \frac{2e^2}{h} \sum_n \int dE \, T_n(E) \frac{\partial f}{\partial E}.$$
(2.86)

Cette expression est reliée simplement à la conductance à température finie. En effet, nous avions à l'Éq. (2.44)

$$\langle \hat{I}(x) \rangle = 2 \times \frac{e}{2\pi\hbar} \int dE \operatorname{Tr}[t^{\dagger}(E)t(E)] \{ f_L(E) - f_R(E) \}, \qquad (2.87)$$

où l'on a ajouté ici le facteur 2 dû au spin. Prenons le potentiel chimique du réservoir de droite comme $\mu_R = \mu_L - eV$ et développons f_R autour de μ_R en supposant à nouveau que la fenêtre de transport eV est petite

$$f_R(E) \approx f_L(E) + \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} eV.$$
 (2.88)

On a donc

$$\langle \hat{I}(x) \rangle \approx -\frac{e^2}{\pi\hbar} V \int dE \operatorname{Tr}[t^{\dagger}(E)t(E)] \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} = -\frac{2e^2}{h} V \sum_n \int dE \, T_n(E) \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \equiv VG \tag{2.89}$$

de sorte que

$$\mathcal{S}_{II}(0) = 4k_B T G. \tag{2.90}$$

Ce résultat n'est nul autre que le théorème de fluctuation-dissipation qui relie les fluctuations $S_{II}(0)$ à la dissipation G. Sous cette forme, $S_{II}(0)$ est aussi connue comme étant le bruit de Johnson-Nyquist. Notons que puisque G est positif, le spectre des fluctuations à fréquence nulle est aussi positif.

2.6.2 Bruit de grenaille (Shot noise)

On se placera maintenant à température nulle dans une situation hors équilibre. À température nulle, f[1-f] = 0 et les termes qui ont contribué dans le calcul précédent sont maintenant nuls. On a donc

$$S_{II}(0) \approx 2 \frac{2e^2}{h} \sum_n \int dE T_n(E) [1 - T_n(E)] [f_L(E) - f_R(E)]^2$$

$$\approx 2 \frac{2e^2}{h} \sum_n \int dE T_n(E) [1 - T_n(E)] [\theta(\mu_L - E) - \theta(\mu_R - E)]^2$$

$$= 2 \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(E_F) [1 - T_n(E_F)] (\mu_L - \mu_R)$$

$$= 2 \frac{2e^3}{h} V \sum_n T_n(E_F) [1 - T_n(E_F)],$$
(2.91)

où l'on évalue les valeurs propres T_n à l'énergie de Fermi. Ce bruit est dû au fait que les électrons sont des particules indivisibles. Tel qu'illustré à la Fig. 2.11 et simplifiant la discussion à un seul mode, chaque électron à une probabilité T de traverser la barrière de potentiel et une probabilité R = 1 - Td'être réfléchie correspondant au facteur T(1 - T)dans le bruit. Il est intéressant de mentionner que le résultat est le même pour des photons arrivant sur



FIGURE 2.11: La réflexion R = 1 - T et la transmission T de particules indivisibles à une barrière causent le bruit de grenaille.

une lame semi-transparente. Ainsi, pour ce résultat, la statistique fermionique ou bosonique n'a pas d'importance. Ce résultat provient du caractère indivisible des particules en jeux.

Dans la limite de faible transparence $T_n \ll 1$, on obtient

$$S_{II}(0) = 2\frac{2e^3}{h}V\sum_n T_n = 2e\langle \boldsymbol{I}\rangle, \qquad (2.92)$$

un résultat connu sous le nom de formule de Schottky. Ce résultat s'obtient aussi en considérant des événements indépendants, donc suivant une distribution de Poisson. En effet, considérons des électrons arrivant à un appareil de mesure à un taux κ et doncavec un courant moyen $\langle I \rangle = e\kappa$. On peut écrire cette expression à l'aide du nombre moyen d'électrons arrivant pendant un temps τ au détecteur, $\langle n \rangle = \kappa \tau$, comme $\langle I \rangle = e \langle n \rangle / \tau$. En supposant que les électrons sont indépendants et donc leur arrivé régit par un processus de Poisson, on vérifie facilement que la variance de *n* est égale à sa valeur moyenne

$$\langle n - \langle n \rangle \rangle^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$$

= $\langle n \rangle^2 + \langle n \rangle - \langle n \rangle^2$ (2.93)
= $\langle n \rangle$,

où l'on a simplement utilisé la distribution de Poisson $P(n) = e^{-\kappa t} (\kappa t)^n / n!$ pour la seconde égalité. On obtient donc pour les fluctuations de courant

$$\langle \Delta I^2 \rangle = \langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2 = (e/\tau)^2 \langle n \rangle = (e/\tau) \langle I \rangle.$$
(2.94)

De ce résultat on obtient bien l'expression Eq. (2.92) pour le spectre de fluctuations du courant à basse fréquence : $S_{II}(0) = \lim_{\tau \to \infty} \int_{-\tau}^{\tau} dt \langle \Delta I^2 \rangle = 2e \langle I \rangle$.

Nous avons supposé jusqu'à présent que les porteurs sont des électrons et donc de charge *e*. Le calcul peut toutefois être répété pour des porteurs de charge arbitraires *q* et le résultat est évidemment le simple remplacement $e \rightarrow q$ dans toutes les expressions précédentes. Dans un supraconducteur par exemple, on s'attend donc à avoir $S_{II}(0) = 4e\langle I \rangle$, une prédiction qui est confirmée expérimentalement [24]. De même dans l'effet Hall fractionnaire, la théorie de Laughlin prédit que le transport est dû à des quasiparticules de charge fractionnaire. Au remplissage $\nu = 1/3$, Laughlin prédit q = e/3. Cette prédiction a été confirmée par deux groupes expérimentaux en 1997 [25, 26].

2.6.3 Cas général avec $T_n(E) = T_n$

On s'intéresse maintenant au cas général, mais négligerons la dépendance en énergie des probabilités de transmission, $T_n(E) = T_n$ où il est entendu que T_n est évalué à l'énergie de Fermi. Ce cas général est simple à traiter en prenant $\mu_R = \mu_L - eV$ et remarquant que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ f_L(E) [1 - f_L(E)] + f_R(E) [1 - f_R(E)] \right\} = 2k_B T$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \left[f_L(E) - f_R(E) \right]^2 = -2k_B T + eV \coth\left(\frac{eV}{2k_B T}\right).$$
(2.95)



FIGURE 2.12: Bruit à fréquence nulle vs voltage. $T_{n=1} = 0.01, T_{n\neq 1} = 0.$

On obtient donc pour le spectre à fréquence nulle

$$S_{II}(0) = 2\frac{2e^2}{h} \sum_{n} \left(2k_B T T_n + \left[-2k_B T + eV \coth\left(\frac{eV}{2k_B T}\right) \right] T_n [1 - T_n] \right)$$

$$= 2\frac{2e^2}{h} \left[2k_B T \sum_{n} T_n^2 + eV \coth\left(\frac{eV}{2k_B T}\right) \sum_{n} T_n (1 - T_n) \right]$$
(2.96)

Le cas général n'est pas une simple addition du bruit à l'équilibre et du bruit de grenaille. Tel qu'illustré à la Fig. 2.12, il montre en fait une intéressante dépendance en température et sur les probabilités de transmission.

3 Blocage de Coulomb

On s'est intéressé dans les chapitres précédents au transport dans les conducteurs mésoscopiques préservant la cohérence de phase. On avait alors négligé toute interaction entre les porteurs.

Il est toutefois possible de fabriquer des jonctions métalliques ayant des capacités de l'ordre de $C \sim 10^{-15}F$. Dans ce cas, l'énergie de charge associée à un seul électron est :

$$E_c = \frac{e^2}{2C} \sim 10^{-4} \text{eV}$$
(3.1)

$$\Rightarrow E_c/h \sim 24 \text{GHz}$$
$$E_c/k_B \sim 1.2 \text{K}$$

Donc à basse température ($T \le 1$ K), le transport sera affecté par les effets de charge.

On a le même phénomène par exemple dans les points quantiques définis dans les 2-deg :

FIGURE !!

Dans ces situations on doit tenir compte de l'interaction coulombienne entre les électrons. Comme on le verra, la présence ou l'absence d'un seul électron dans une région du circuit peut influencer le transport.

3.1 Boîte à un électron, SET

On s'intéresse ici à des circuits mésoscopiques formé avec des jonctions tunnels. On représentera une telle jonction par le symbole :



En pratique une telle jonction à l'air de :

Note : On traite ici de jonctions normales. On traitera des jonctions supra plus loin.

Il est possible de faire des jonctions d'aire

$$A \sim (100 \text{nm})^2$$
 (3.2)

et d'épaisseur

$$d \sim 10 \mathring{A} \tag{3.3}$$



avec une constante diélectrique $\varepsilon \sim 10$, on a alors

$$C = \frac{\varepsilon A}{4\pi d} \sim 10^{-15} \mathrm{F} \tag{3.4}$$

et donc

$$E_c = \frac{e^2}{2C} \sim 10^{-4} \text{eV}$$

$$\sim 1 \text{K}$$
(3.5)

tel que mentionné plus haut.

3.1.1 Boite à un électron

Considérons maintenant la boîte à un électron :



Pour $V_g = 0$, l'état de plus basse énergie est l'état neutre. Il y a alors n = 0 électron en surplus sur l'île.

Avec $V_g \neq 0,$ le nombre d'électrons en surplus sur l'île peu changer par un nombre entier :

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$
 (3.6)

Avec *n* électrons, l'énergie électrostatique de l'île est

$$\frac{(ne)^2}{2C_{\Sigma}} \tag{3.7}$$

avec $C_{\Sigma} = C_g + C_J$, la capacité totale.

Avec $V_g \neq 0$, la capacité de grille est chargée :



avec $q = C_g V_g$ la charge de grille. Évidemment, $q \in \mathbb{R}$, i.e. q n'est pas discret mais continue. Donc la charge totale de l'île incluant le nombre d'électrons en excès et la charge de polarisation est :

$$ne - q \equiv e(n - n_g) \tag{3.8}$$

avec $n_g \equiv C_g V_g / e$ la charge de grille.

L'énergie électrostatique est alors

$$E_{el}(n, n_g) = \frac{e^2}{2C_{\Sigma}}(n - n_g)^2 = E_c(n - n_g)^2$$
(3.9)

On trace cette énergie pour différentes valeurs de *n* :



Il y a dégénérescence pour n_g demi-entier. Classiquement, la charge moyenne sur l'île est

$$\langle n(n_g) \rangle = \frac{1}{Z_{el}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} n e^{\frac{-E_{el}(n,ng)}{k_b T}}$$
(3.10)

où Z_{el} est la normalisation.



Cette figure illustre bien le fait que l'énergie de charge doit être plus grande que k_BT afin que les fluctuations thermiques soient négligeables et le nombre d'électrons sur l'île bien défini. En plus des fluctuations thermiques, on doit s'assurer que les fluctuations quantiques aussi soient petites. On peut comprendre l'importance de ces fluctuations à l'aide de la relation d'incertitude $\Delta E\Delta t \ge \hbar/2$. Afin que les fluctuations quantiques soient négligeables, l'énergie de charge doit être supérieur à l'énergie associée au temps caractéristique de résidence de la charge sur l'île : $\Delta E \sim \hbar/2\Delta t$. Sinon, la charge n'est jamais bien localisée sur l'île. Ce temps peut être estimé par le temps de décharge $\Delta t \sim R_T C$ où R_T est la résistance tunnel de la jonction. On obtient :

$$E_C = \frac{e^2}{2C} \gg \frac{\hbar}{2R_T C} \quad \Rightarrow \quad R_T \gg \frac{\hbar}{2e^2} \sim R_K. \tag{3.11}$$

La résistance tunnel doit excéder le quantum de résistance. Il est intéressant de remarquer que la capacité de la jonction n'intervient pas.

On verra plus loin que, dans des situations bien particulières, cette valeur moyenne classique ne tient plus. On aura alors des superpositions d'états de charges à n_g demi-entier.

3.1.2 SET

Considérons un second exemple où nous pourrons maintenant nous intéresser au transport : le SET.

Le voltage de transport est $V = V_L - V_R$.



L'île à un nombre *n* d'électrons en excès et est connectée au voltage de grille V_g par C_g . On a donc encore l'énergie de charge

$$E_{el} = E_C (n - n_g)^2$$
(3.12)

avec ici $E_C = \frac{e^2}{2C_{\Sigma}}$; $C_{\Sigma} = C_g + C_L + C_R$ et donc $n_g = (C_g V_g + C_L V_L + C_R V_R)/e$. Considérons le processus : qui fait passer l'île de *n* à *n* + 1. Ce processus fait augmenter l'énergie de



charge de :

$$\Delta E_{el} = E_{el}(n+1, n_g) - E_{el}(n, n_g) = 2E_C(n - n_g + \frac{1}{2})$$
(3.13)

On a donc :

Les énergies de l'île sont équidistantes et peuvent être ajustées avec V_g .

On suppose ici que $V_L > V_R$, on s'intéresse donc au transport de la L vers la R.

À basse température, on aura

Seulement si l'énergie EV_L est suffisante pour compenser le coût en énergie électrostatique de l'île :

$$eV_L > E_{el}(n+1, n_g) - E_{el}(n, n_g)$$
 (3.14)



De même, pour avoir

L'énergie eV_R doit être telle que

$$E_{el}(n+1, n_g) - E_{el}(n, n_g) > eV_R$$
(3.15)

Pour avoir transport, ces deux conditions doivent être satisfaites simultanément. $\Rightarrow eV = e(V_L - V_R)$ petit, on aura transport ou non. Selon la valeur de V_g

3.2 Modèle orthodoxe

Dans cette section, on s'intéresse au transport dans un SET. On considèrera le modèle dit orthodoxe qui est valide lorsque les jonctions ne sont pas très transparentes. Ce modèle est dû à Averin et Likharev.

3.2.1 Hamiltonien tunnel

On considère l'hamiltonien total suivant :

left lead
$$\leftarrow$$
 right lead
 $H = H_L + H_R + H_I + H_T$ (3.16)
island \leftarrow island \leftarrow island for tunnel Hamiltonien



 $(n \rightarrow n+1)$

En deuxième quantification, on écrit l'hamiltonien des leads comme :

$$H_{L} = \sum_{k_{L},\sigma} \varepsilon_{k_{L}} c^{\dagger}_{k_{L}\sigma} c_{k_{L}\sigma}$$

$$H_{R} = \sum_{k_{R},\sigma} \varepsilon_{k_{R}} c^{\dagger}_{k_{R}\sigma} c_{k_{R}\sigma}$$
(3.17)

On laisse tomber ici l'indice de spin σ , simplement pour simplifier la notation. L'hamiltonien de l'île est alors :

$$H_I = H_{\rm Io} + H_{\rm int} \tag{3.18}$$

avec

$$H_{\rm Io} = \sum_{q} \varepsilon_q c_q^{\dagger} c_q \tag{3.19}$$

l'hamiltonien sans interaction.

En principe, il y a plusieurs choix pour l'hamiltonien d'interaction. Par exemple,

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q_1, q_2, q_3, q_4} v_{q_1, q_2, q_3, q_4} c^{\dagger}_{q_1} c_{q_1} c^{\dagger}_{q_2} c_{q_2}$$
(3.20)

Ici on considère plus particulièrement l'énergie de charge, on a donc

$$H_{\text{int}} = E_C \sum_{q_1, q_2} c_{q_1}^{\dagger} c_{q_1} c_{q_2}^{\dagger} c_{q_2}$$

= $E_C \sum_{q_1, q_2} \hat{n}_{q_1} \hat{n}_{q_2}$
= $E_C \left(\sum_q \hat{n}_q \right)^2 = E_C \hat{n}^2$ (3.21)

avec $\hat{n} = \sum_{q} \hat{n}_{q}$ la charge additionnelle totale.

En tenant compte de la charge de grille, on a donc comme précédemment :

$$H_{\rm int} = H_{el} = E_C (\hat{n} - n_g)^2 \tag{3.22}$$



Note : On devrait vraiment prendre :

$$\hat{n} = \sum_{q,\sigma} c_{q\sigma}^{\dagger} c_{q\sigma} - N_{\dagger}$$
(3.23)

où N_{t} est le nombre d'ions positifs sur l'île de sorte que \hat{n} est l'opérateur de charge en excès.

Finalement l'hamiltonien tunnel s'écrit sous la forme :

$$H_T = H_{TL} + H_{TR} \tag{3.24}$$



avec

$$H_{TL} = \sum_{k_{L},q} \{ t_{L_{k_{l}q}} c_{k_{L}}^{\dagger} c_{q} + \{ t_{L_{k_{l}q}}^{\dagger} c_{q}^{\dagger} c_{k_{L}} \}$$
(3.25)

3.2.2 Effet tunnel séquentiel

On suppose ici que la 'résistance tunnel' est suffisamment grande, ce qui implique que le temps que passe un électron sur l'île est beaucoup plus grand que le temps entre l'effet tunnel \Rightarrow on a un processus séquentiel.

- 1. Le temps entre deux «évènements» tunnels est supposé être le plus grand temps du problème. Plus grand que le temps de déphasage.
- 2. Il n'y a pas de cohérence quantique dans le problème.
- On peut donc traiter le système comme ayant une distribution P(n, t) de probabilité classique d'avoir n électrons sur l'île au temps t. Dans le cas quantique on aurait plutôt une matrice densité :

$$\rho(t) = \sum_{n,m} p_{nm}(t) |n\rangle \langle m|$$
(3.26)

le cas classique est $p_{nm}(t) \rightarrow p_{nm}(t)\delta_{nn}$.

À l'équilibre, P(n) est une distribution de Boltzman. On s'intéresse à un voltage de transport $V = V_L - V_R$ non nul et donc à une situation hors-équilibre. On doit donc déterminer P(n, t).

À grande résistance tunnel, on peut estimer les taux de transitions $n \rightarrow n \pm 1$ à l'aide de la règle d'or de Fermi :



Calculons maintenant ce taux $\Gamma_{n+1,n}^{LI}$. L'état final peut s'écrire comme :

$$|f_{n+1}\rangle = C_q^{\dagger}C_{k_L}|i_n\rangle \qquad \{\langle f_{n+1}| = C_{k_L}^{\dagger}C_q\}$$
(3.28)
on enlève un e^- de la lead
gauche pour le mettre sur
l'île

On a donc :

$$\Gamma_{n+1,n}^{LI} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{q,k_L} \sum_{i_n} |\langle i_n | C_q C_{k_L}^{\dagger} H_{TL} | i_n \rangle|^2 W_{i_n} \delta(E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \varepsilon_q - \varepsilon_l(k_L))$$
(3.29)

Il faut tenir compte de la différence d'énergie libre.

$$\Gamma_{n+1,n}^{LI} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{q,k_L} \sum_{i_n} |\langle i_n | C_q C_{k_L}^{\dagger} \sum_{k'_{L'}q'} \{ t_{L_{k'_{l'}q'}} C_{k'_{L}}^{\dagger} C_{q'} + t_{L_{k'_{l'}q'}}^{\dagger} C_{q'}^{\dagger} C_{k'_{L}} \} |i_n\rangle|^2 W_{i_n} \delta(E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \varepsilon_q - \varepsilon_{(k_L)})^2$$
seulement cette forme contribue \leftarrow Ne peut pas commencer $|i_n\rangle$ vers $|i_n\rangle$ (3.30)

Il n'y a pas de cohérence (enchevêtrement) et donc l'île et le lead sont indépendants. On a donc :

$$W_{i_n} = W_{i_n l} W_{i_L}$$

$$|i_n\rangle = |i_n l\rangle \otimes |i_L\rangle$$
(3.31)

La $\sum_{q',k'_L} \langle i_n | C_q C^{\dagger}_{k_L} C^{\dagger}_{q'} C_{k'_L} | i_n \rangle = 0$ si $q \neq q'$, $k_L \neq k'_L$. Ne peut prendre $|i_n\rangle$ vers $|i_n\rangle$ dans ce cas.

Pas utilisé $|\rangle \otimes |\rangle$ ici.

$$\Gamma_{n+1,n}^{LI} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{q,k_L} \sum_{i_{nI},i_L} |t_{k_L q}|^2 |\langle i_L | C_{k_L}^{\dagger} C_{k_L} | i_L \rangle|^2 |\langle i_{nI} | C_q C_q^{\dagger} | i_{nI} \rangle|^2 W_{i_n} W_{i_L} \delta(\cdots)$$
(3.33)

On a $\{C_q, C_{q'}^{\dagger}\} = \delta_{qq'}$ et donc $C_q C_q^{\dagger} = 1 - C_q^{\dagger} C_q$.

De même $\langle i | C^{\dagger}C | i \rangle$ est le nombre d'occupation de l'état $|i\rangle$ On a donc

$$\langle i|C^{\dagger}C|i\rangle = \{0,1\} \Longrightarrow |\langle i|C^{\dagger}C|i\rangle|^{2} = \langle i|C^{\dagger}C|i\rangle$$
(3.34)

Les W_i étant la distribution de l'occupation de l'état $|i\rangle$, on a :

Puisqu'il y a un grand nombre d'état k_L , q, on passe d'une somme à une intégrale :

$$\sum_{k_L,q} |t_{k_lq}|^2 \to \frac{2\pi}{\hbar} \iint_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_I d\varepsilon_L |t_L|^2 dI dL$$

$$densité de mode \leftarrow densité densité de mode \leftarrow densité densité de mode \leftarrow densité de mode \leftarrow densité densité de mode \leftarrow dens$$

On absorbe les détails des passages de Σ à \int dnas les densités de mode d*s*d*u*.

Avec $|t_L|^2 dI dL$ indépendant de l'énergie dans la bande d'énergie pertinente, on aura donc :

$$\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k_L,q} |t_{k_Lq}|^2 \rightarrow \frac{2\pi}{\hbar} |t_L|^2 dI dL \iint_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_I d\varepsilon_L$$

$$\equiv \frac{1}{e^2} \frac{2\pi e^2}{\hbar} |t_L|^2 dI dL \iint_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_I d\varepsilon_L$$

$$\equiv \frac{1}{R_L}$$
(3.37)

On a définit la résistance tunnel de la jonction de gauche :

$$R_L^{-1} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |t_L|^2 dI dL = (2\pi)^2 \frac{|t_L|^2 dI dL}{R_K}$$
(3.38)

Rappel : $R_K = h/e^2$ est le quantum de résistance. On vérifie si l'état initial est «plein» et l'état final «vide», cas incohérent.

Avec ces résultats, on a donc

$$\Gamma_{n+1,n}^{LI} = \frac{1}{e^2 R_L} \iint_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_q d\varepsilon_{k_L} f(\varepsilon_k - \mu_L) [1 - f(\varepsilon_q - \mu_I)] \delta(E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \varepsilon_q - \varepsilon_{k_L})$$
(3.39)

On peut faire cette intégrale exactement. On commence par simplifier l'expression suivante :

$$f(\varepsilon_{1})[1-f(\varepsilon_{2})] = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{1}}+1} \left\{ 1 - \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{2}}+1} \right\}$$

$$= \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{1}}+1} \frac{e^{\beta\varepsilon_{2}}}{e^{\beta\varepsilon_{2}}+1} \cdot \frac{(e^{\beta\varepsilon_{1}}+1) - (e^{\beta\varepsilon_{2}}+1)}{(e^{\beta\varepsilon_{1}}+1) - (e^{\beta\varepsilon_{2}}+1)} \qquad \left(\frac{1}{X_{2}} - \frac{1}{Y_{1}} = \frac{Y_{1} - X_{2}}{X_{2}Y_{1}}\right)$$

$$= \frac{e^{\beta\varepsilon_{2}}}{(e^{\beta\varepsilon_{1}}+1) - (e^{\beta\varepsilon_{2}}+1)} \left\{ \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{2}}+1} - \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{1}}+1} \right\}$$

$$= f_{b}(\varepsilon_{1} - \varepsilon_{2})\{f(\varepsilon_{2}) - f(\varepsilon_{1})\}$$

$$\longrightarrow \text{Bose-Einstein} \qquad \longrightarrow \text{ concave Fermi-Dirac}$$

$$(3.40)$$

On a donc :

$$\begin{split} \Gamma_{n+1,n}^{LI} &= \frac{1}{e^2 R_L} \iint_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_q d\varepsilon_{k_L} f_B(\varepsilon_{k_L} - \varepsilon_q + \mu_I - \mu_L) \{ f(\varepsilon_q - \mu_I) - f(\varepsilon_{k_L} - \mu_L) \} \\ &\quad \cdot \Delta(E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \varepsilon_q - \varepsilon_{k_L}) \\ &= \frac{1}{e^2 R_L} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_q d\varepsilon_{k_L} f_B(E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \mu_I - \mu_L) \\ &\quad \cdot \{ f(\varepsilon_q - \mu_I) - f(\varepsilon_q + E_{el}(n+1) - E_{el}(n) - \mu_L) \} \end{split}$$
(3.41)

Changement de variable $\bar{\varepsilon_q} = \varepsilon_q - \mu_I$

$$\Gamma_{n+1,n}^{LI} = \frac{1}{e^2 R_L} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\varepsilon_q} f_B(E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \mu_I - \mu_L) \cdot \{f(\bar{\varepsilon_q}) - f(\bar{\varepsilon_q} + E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \mu_I - \mu_L)\}$$
(3.42)

Cette intégrale est simple à résoudre. En effet soit,

$$g(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon) - f(\varepsilon + x) \right]$$
(3.43)

On a alors :

$$\frac{d}{dx} = -\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{df(\varepsilon + x)}{dx}
= +\int_{-\infty}^{-\infty} d\varepsilon \frac{df(\varepsilon + x)}{dx}
= \int_{-\infty}^{-\infty} d\varepsilon 1 \cdot \frac{df(\varepsilon + x)}{dx}
= 1 \cdot [f(\varepsilon + x)]_{\infty}^{-\infty} - \int_{-\infty}^{-\infty} d\varepsilon 1 \cdot \frac{d \cdot 1}{dx} f(\varepsilon + x)
= f(-\infty) - f(\infty)
= \frac{1}{e^{-\beta \infty}} - \frac{1}{e^{+\beta \infty} + 1}
= 1$$
(3.44)

On a donc g'(x) = 1. Avec g(0) = 0, on trouve (résolution de l'équation différentielle par intégration) :

$$\int_0^x dg(x) = \int_0^x dx \Longrightarrow g(x) = x \tag{3.45}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon - f(\varepsilon + x)) \right] = x \tag{3.46}$$

On trouve donc pour $\Gamma_{n+1,n}^{LI}$ (le résultat est donc $x \neq_B$) :

$$\Gamma_{n+1,n}^{LI} = \frac{1}{e^2 R_I} \frac{\Delta E_{el}}{e^{\beta \Delta E_{el}} - 1}$$
(3.47)

avec $\Delta E_{el} \equiv E_{el}(n+1) - E_{el}(n) + \mu_I - \mu_L$ où $\mu_I - \mu_L$ est le voltage entre l'île et le lead gauche $\rightarrow \ll eV \gg$.

On obtient évidemment le même résultat pour



en remplaçant simplement '*L*' par '*R*' partout. À basse température($\beta \to \infty$), $k_BT \ll |\Delta E_{el}|$, si 1. $(e^{\beta \Delta E} \to \infty) \Delta E_{el} \Rightarrow \Gamma_{n+1,n}^{LI} \to 0 \Leftrightarrow$ Blocage de Coulomb 2. $(e^{\beta \Delta E} \to 0) \Gamma_{n+1,n}^{LI} \to \frac{|\Delta E_{el}|}{e^2 R_L}$



On peut montrer que les taux respectent la condition de «detailed distance» :

$$\frac{\Gamma_{n+1,n}^{LI}}{\Gamma_{n+1,n}^{IL}} = e^{-\frac{\Delta E_{el}}{k_B T}}$$
(3.48)

3.2.3 Équation maîtresse

Maintenant que l'on connait les taux tunnels, on cherche à déterminer la probabilité P(n, t). On utilisera pour cela une équation maîtresse (classique). Par exemple, considérons une distribution de probabilités $P(\alpha)$ avec des taux $\Gamma_{\alpha\beta}$. On peut écrire :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P(\alpha) = -\sum_{\beta} \Gamma_{\beta\alpha} P(\alpha) + \sum_{\beta} \Gamma_{\alpha\beta} P(\beta)$$
Sortir de $|\alpha\rangle$.
$$(3.49)$$

On s'intéresse à l'état stationnaire et donc à

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P(\alpha) = 0 \tag{3.50}$$

On a évidemment :

$$\sum_{\alpha} P(\alpha) = 1 \tag{3.51}$$

Ici, on s'intéresse à P(n, t). On a les processus suivant.

L'équation maîtresse est donc :

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = -\left\{\Gamma^{LI}(n) - \Gamma^{IL}(n) + \Gamma^{RI}(n) + \Gamma^{IR}(n)\right\}P(n,t)
+ \left\{\Gamma^{LI}(n-1) + \Gamma^{RI}(n-1)\right\}P(n-1,t)
+ \left\{\Gamma^{IL}(n+1) + \Gamma^{IR}(n+1)\right\}P(n+1,t)$$
(3.52)

où pour simplifier la notation on a simplement indiqué l'état initial dans les taux. Des taux et de la probabilité P(n, t) on peut déterminer le courant circulant dans le SET. Par exemple, le courant

dans la jonction de gauche est :

$$I_{L}(t) = -e \sum_{n} \{ \Gamma^{LI}(n) - \Gamma^{IL}(n) \} P(n, t)$$
(3.53)



Pour un voltage DC appliqué sur la SET, on a :

$$I = I_L = -I_R \tag{3.54}$$

(et on peut s'intéresser seulement à l'état stationnaire)

On prendra $V_L = -V_R = V/2$ pour simplifier les expressions. À basse température et V petit, seul deux états de charge (*n* et *n* + 1 disons) seront importants. C'est le cas si

$$ne < en_g < (n+1)e \tag{3.55}$$

p(n) et p(n + 1) sont seuls pertinents. Seuls les taux suivant sont importants :

Les ΔE_{el} correspondants sont :

$$\Gamma^{II}(n) \quad \Gamma^{RI}(n) : \Delta E_{el} = \pm \left\{ \left(n + \frac{1}{2} - n_g \right) \frac{e^2}{C_{\Sigma}} - \frac{eV}{2} \right\}$$

$$\Gamma^{IL}(n+1) \quad \Gamma^{IR}(n+1) : \Delta E_{el} = \pm \left\{ \left(n + \frac{1}{2} - n_g \right) \frac{e^2}{C_{\Sigma}} + \frac{eV}{2} \right\}$$
(3.56)

Dans l'état stationnaire, l'équation maîtresse devient alors :

$$\frac{\mathrm{d}P(n)}{\mathrm{d}t} = 0 = -\{\Gamma^{LI}(n) + \Gamma^{RI}(n)\}p_s(n) + \{\Gamma^{IL}(n+1) + \Gamma^{IR}(n+1)\}p_s(n+1)$$
(3.57)

Avec p(n + 1) = 1 - p(n), on a :

$$p_s(n) = \frac{\Gamma_{IL}(n+1) + \Gamma_{IR}}{\Gamma_{\Sigma}}$$
(3.58)

où $\Gamma_{\Sigma} = \Gamma_{LI}(n) + \Gamma_{RI}(n) + \Gamma_{IL}(n+1) + \Gamma_{IR}(n+1)$. De ce résultat, on a donc pour le courant dans l'état stationnaire :

$$I = -e \sum_{n} \{\Gamma^{LI}(n) - \Gamma^{IL}(n)\} p_{s}(n)$$

= $-e \left\{ \left[\Gamma^{LI}(n) - \underbrace{\Gamma^{IL}(n)}_{v_{a} \text{ vers } n-1} p_{s}(n) + \underbrace{\left[\underbrace{\Gamma^{LI}(n+1)}_{v_{a} \text{ vers } n+2} \Gamma^{IL}(n+1) \right] (1 - p_{s}(n)) \right\}$ (3.59)
= $-e \frac{\Gamma^{LI}(n)\Gamma^{IR}(n+1) - \Gamma^{RI}(n)\Gamma^{IL}(n+1)}{\Gamma_{\Sigma}}$

Les termes en "x" ne font que sortir de $\{n, n+1\}$.

On peut obtenir une expression approximative pour *I* à basse température. En effet, on a déjà vu à la page 60 la condition nécessaire pour avoir $\Gamma^{LI}(n)$ non-nul à $T \rightarrow 0$. On doit avoir

$$\Delta E_{el} \leqslant 0 \tag{3.60}$$

 $\Rightarrow (n + \frac{1}{2} - n_g) \frac{e^{\frac{1}{p}}}{C_{\Sigma}} - \frac{e^{\frac{1}{2}}}{2} \leq 0$ (Haut de la page 62) $\Rightarrow \left(n_g - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right) e \geq + \frac{VC_{\Sigma}}{2}$

Pour avoir un courant non-nul, on doit aussi avoir $\Gamma_{IR}(n+1)$ non nul.

$$-\left[\left(n+\frac{1}{2}-n_g\right)\frac{e^2}{C_{\Sigma}}-\frac{e^{\ell}V}{2}\right] \le 0$$

$$en_g - \left(n+\frac{1}{2}\right)e \le +\frac{VC_{\Sigma}}{2}$$
(3.61)

Ces deux taux sont donc non-nul dans la fenêtre de largeur $C_{\Sigma}V$ autour de $n_g = (n + 1/2)$:

$$-\frac{VC_{\Sigma}}{2} \le en_g - \left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{3.62}$$

Dans cette fenêtre, les taux $\Gamma^{RI}(n)$ et $\Gamma^{IL}(n+1)$ sont nuls et donc :

_

$$I = \begin{cases} -e \frac{\Gamma^{LI}(n)\Gamma^{IR}(n+1)}{\Gamma^{LI}(n) + \Gamma^{IR}(n+1)} & \text{pour} & I = \frac{1}{4R_t} \left[V - \frac{4e^2}{C_{\Sigma}^2 V} \left(n_g - n - \frac{1}{2} \right)^2 \right] \\ 0 & \text{ailleur} & R_{t_L} = R_{t_R} \end{cases}$$
(3.63)

Graphique du courant en fonction de n_g et VC/e :

FIGURE !!

À $n_g \neq$ demi-entier :

- 1. Le courant est nul avant $V_{\text{threshold}} = e/C$
- 2. Blocage de Coulomb
- À n_g = demi-entier : le blocage est levé.

Entre les deux, le V_{th} est plus faible :

$$V_{th}(n) = \min_{n} \left\{ 2 \left| en_g - \left(n + \frac{1}{2} \right) e \right| / C \right\}$$
 (3.64)

 $I(n_g, V)$ a une forte dépendance à n_g . Un SET est un électromètre très sensible. Exemple d'application :



une sensitivité maximale

On peut mesurer l'état de charge d'une boite à un électron à l'aide d'un SET :



NOTE À TOI MÊME : montrer la figure 2a) de Lehnert et al. PRL 91 106801 (2003) Note 1 : un champ de IT est appliqué pour rendre normal le supra.

Note 2 : le SET est très sensible mais «très» lent.

- 1. Le R_t sont grandes.
- 2. Le câblage vers l'appareil de mesure peut avoir une grande *C*.
- 3. Le temps *RC* est grand

Solution : rf-SET



On ne mesure pas V ou I, mais plutôt le changement d'impédance du circuit LC. À haute fréquence, la capacité du câblage n'est pas important ($Z \sim 1/i\omega C$). Il faut toujours prendre en compte comment la mesure est vraiment faite.

4.1 Jonction Josephson

4.2 Théorie des circuits électriques

4.3 Modèle de Caldeira-Leggett

On modélise une résistance par une ligne à transmission semi-infinie. Cette ligne est elle-même modélisée comme une chaîne d'oscillateurs *LC*. L'admittance $Y(\omega) = 1/Z(\omega)$ de chacun de ces oscillateurs est purement imaginaire :

$$Y_m(\omega) = -\left(i\omega L_m + \frac{1}{i\omega C_m}\right)^{-1}.$$
(4.1)

Le choix de signe est sans conséquence et nous permet de garder la convention déjà utilisée pour la transformée de Fourier.

De façon générale, l'admittance relie le courant au voltage appliqué

$$i(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \, \tilde{Y}(t, t') v(t'), \tag{4.2}$$

où l'on ajouté un tilde à $\tilde{Y}(t,t')$ afin d'éviter toute confusion possible avec sa transformée de Fourier $Y(\omega)$. Évidemment, s'il y a un décalage τ dans le voltage d'entrée, le signal de sortie doit être décalé de la même façon : $i(t + \tau)$ est associé à $v(t + \tau)$. Pour cette raison, on en déduit que l'admittance $\tilde{Y}(t,t')$ ne peut dépendre que de la différence de temps : $\tilde{Y}(t,t') = \tilde{Y}(t-t')$. L'expression ci-haut devient alors [27]

$$i(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \, \tilde{Y}(t-t') v(t') = \tilde{Y}(t) * v(t), \tag{4.3}$$

où * représente le produit de convolution. À l'aide du théorème de convolution $\mathcal{F}{f*g} = \mathcal{F}{f}\cdot\mathcal{F}{g}$ où $\mathcal{F}{\cdot}$ représente la transformée de Fourier [28], cette relation implique immédiatement que $i(\omega) = Y(\omega)v(\omega)$ où

$$Y(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \tilde{Y}(t) e^{i\omega t}.$$
(4.4)

En plus d'être invariante sous translation du temps, $\tilde{Y}(t)$ doit assurer la causalité : la réaction ne peut précéder la cause. Ainsi, si v(t') est nul pour t' < t, il doit en être de même pour la réponse i(t). On en déduit donc que $\tilde{Y}(t - t' < 0) = 0$ ou encore [27]

$$\tilde{Y}(t) = \tilde{Y}(t)\theta(t), \tag{4.5}$$

où $\theta(t)$ est la fonction d'Heaviside. Lorsque l'on tient compte de la causalité comme on là fait ici, on arrive toutefois à un problème avec la transformée de Fourier de l'admittance. Afin de voir plus

clairement ce problème, on commence par exprimer le théorème de convolution sous la forme alternative $\mathcal{F}{f \cdot g} = \mathcal{F}{f} * \mathcal{F}{g}$ [28]. Appliqué à la situation qui nous intéresse ici, on peut donc écrire $Y(\omega)$ comme

$$Y(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \tilde{Y}(t) \theta(t) e^{i\omega t} = \int d\omega' \, Y(\omega') \Theta(\omega - \omega'), \tag{4.6}$$

où $\Theta(\omega)$ est la transformée de Fourier de $\theta(t)$. Le problème survient justement avec cette dernière expression,

$$\Theta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \,\theta(t) e^{i\omega t} = \left. \frac{e^{i\omega t}}{i\omega} \right|_{0}^{\infty},\tag{4.7}$$

puisque $\exp(i\infty)$ n'est pas bien définie.

Pour résoudre ce problème, on utilise un truc similaire à ce que nous avions utilisé dans le contexte de la règle d'or de Fermi : on ouvre et ferme de façon adiabatique la réponse à la perturbation v(t). On introduit donc un facteur de convergence $\eta > 0$ que l'on fera tendre vers zéro à la fin du calcul [18]. Avec ce facteur de convergence, l'Éq. (4.5) pour $\tilde{Y}(t)$ prend plutôt la forme

$$\tilde{Y}(t) \to \tilde{Y}(t)\theta(t)e^{-\eta t}$$
(4.8)

de sorte que la transformée de Fourier de $\tilde{Y}(t)$ devient

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \, \tilde{Y}(t) \theta(t) e^{-\eta t} e^{i\omega t} = \int d\omega' \, Y(\omega') \Theta(\omega + i\eta - \omega') \tag{4.9}$$

où $Y(\omega)$ est définie à l'Éq. (4.4) et

$$\Theta(\omega + i\eta - \omega') = \int_{-\infty}^{\infty} dt \,\theta(t) e^{i(\omega + i\eta - \omega')t} = \frac{-1}{i(\omega + i\eta - \omega')}.$$
(4.10)

En comparant l'Éq. (4.9) à l'Éq. (4.6) on voit que l'ajout du facteur de convergence correspond à faire le remplacement $\omega \rightarrow \omega + i\eta$, de sorte que l'on peut maintenant écrire l'Éq. (4.6) comme

$$Y(\omega + i\eta) = \int d\omega' Y(\omega')\Theta(\omega + i\eta - \omega').$$
(4.11)

À la fin de tous calculs, on doit évidemment faire disparaître le facteur de convergence η et on prend la limite appropriée

$$Y(\omega) = \lim_{\eta \to 0^+} Y(\omega + i\eta).$$
(4.12)

À compléter ...

5.1 Équation maîtresse de Born-Markov

Dans le modèle de Caldeira-Leggett, l'environnement électromagnétique d'un circuit électrique (i.e. un qubit supraconducteur) peut être modélisé sous la forme d'un ensemble infini d'oscillateurs harmoniques couplés au circuit. On a déjà écrit l'Hamiltonien total (système d'intérêt plus environnement) sous la forme

$$H = H_{\rm S} + H_{\rm B} + H_{\rm SB},\tag{5.1}$$

où $H_{\rm S}$ est l'Hamiltonien du circuit (système), $H_{\rm B}$ celui du bain d'oscillateurs (environnement) et $H_{\rm SB}$ l'Hamiltonien d'interaction. Résoudre exactement l'équation de Schrödinger pour cet Hamiltonien n'est pas une tâche facile. Dans cette section, on cherchera plutôt à obtenir une équation d'évolution approximative, mais plus simple à résoudre, pour la matrice densité réduite du système $\rho(t) = \text{Tr}_{\rm B}[\rho_{\rm tot}(t)]$.

L'évolution de $\rho_{tot}(t)$ est régie par l'équation de Schrödinger

$$\dot{\rho}_{\text{tot}}(t) = -i[H_{\text{S}} + H_{\text{B}} + H_{\text{SB}}, \rho_{\text{tot}}(t)].$$
 (5.2)

Il est utile de passer en représentation d'interaction où l'équation d'évolution devient

$$\hat{\rho}_{\text{tot}}(t) = -i[\hat{H}_{\text{SB}}(t), \hat{\rho}_{\text{tot}}(t)], \qquad (5.3)$$

avec

$$\hat{H}_{\rm SB}(t) = e^{+i(H_{\rm S}+H_{\rm B})t} H_{\rm SB} e^{-i(H_{\rm S}+H_{\rm B})t}$$
(5.4)

et

$$\hat{\rho}_{\text{tot}}(t) = e^{+i(H_{\text{S}} + H_{\text{B}})t} \rho_{\text{tot}}(t) e^{-i(H_{\text{S}} + H_{\text{B}})t}.$$
(5.5)

L'Éq. (5.3) peut être intégrée de part et d'autre pour donner [29]

$$\hat{\rho}_{\text{tot}}(t) = \hat{\rho}_{\text{tot}}(0) - i \int_0^t dt_1 \left[\hat{H}_{\text{SB}}(t_1), \hat{\rho}_{\text{tot}}(t_1) \right].$$
(5.6)

En portant cette solution dans l'Éq. (5.3), on obtient une équation intégro-différentielle

$$\dot{\hat{\rho}}_{\text{tot}}(t) = -i[\hat{H}_{\text{SB}}(t), \hat{\rho}_{\text{tot}}(0)] - \int_{0}^{t} dt_{1} [\hat{H}_{\text{SB}}(t), [\hat{H}_{\text{SB}}(t_{1}), \hat{\rho}_{\text{tot}}(t_{1})]].$$
(5.7)

On prend maintenant la trace sur les degrés de liberté de l'environnement de part et d'autre afin d'obtenir une expression pour le système seulement

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\int_{0}^{t} dt_{1} \operatorname{Tr}_{B}\left\{ [\hat{H}_{SB}(t), [\hat{H}_{SB}(t_{1}), \hat{\rho}_{tot}(t_{1})]] \right\},$$
(5.8)

où l'on a pris $\text{Tr}_{\text{B}}[\hat{H}_{\text{SB}}(t), \rho_{\text{tot}}(0)] = 0$. Ce choix implique que $\hat{H}_{\text{SB}}(t)$ n'a aucun élément de matrice diagonale dans la base où H_{B} est diagonal [30]. Puisqu'il est possible de redéfinir H_{S} afin d'inclure ces éléments diagonaux, ce choix n'est pas restrictif, et ce peu importe $\rho(0)$.

L'expression Éq. (5.8) est exacte, mais implicite car elle dépend de $\hat{\rho}_{tot}(t_1)$. Elle n'est donc pas très utile en pratique. En raison de cette dépendance sur tous les temps ou, en d'autres mots, sur le passé du système, on dira que cette équation est non markovienne. On cherche ici une équation markovienne, c'est-à-dire qui est locale en temps. Une série d'approximations doivent maintenant être réalisées afin d'arriver à une telle expression. La première approximation concerne la condition initiale. Nous prendrons le système et l'environnement comme désenchevêtré au temps t = 0: $\rho_{tot}(0) = \rho(0) \otimes \rho_B(0)$. L'impact des corrélations initiales est étudié à la Réf. [31].

On utilise maintenant le fait que le système est couplé à une infinité d'oscillateurs harmoniques. En effet, un tel environnement peut avoir un effet important sur le système, et ce même si l'effet du système sur ce dernier est à toute fin pratique négligeable. On pourra donc supposer que le couplage entre le système et l'environnent est faible, approximation connue sous le nom *d'approximation de Born*. Une première conséquence de ce faible couplage est que, à partir de l'état initial désenchevêtré, le système évoluera vers un état bien approximé par

$$\hat{\rho}_{\text{tot}}(t_1) \approx \hat{\rho}(t_1) \otimes \hat{\rho}_{\text{B}}(0). \tag{5.9}$$

L'équation d'évolution pour $\hat{\rho}(t)$ devient alors

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\int_{0}^{t} dt_{1} \operatorname{Tr}_{B} \left\{ [\hat{H}_{SB}(t), [\hat{H}_{SB}(t_{1}), \hat{\rho}(t_{1}) \otimes \hat{\rho}_{B}(0)]] \right\}.$$
(5.10)

Cette expression, quoique plus simple, n'est pas encore markovienne.

Puisque l'Hamiltonien d'interaction $\hat{H}_{SB}(t)$ en représentation d'interaction aura toujours la forme

$$\hat{H}_{\rm SB}(t) = \sum_{m} \hat{S}_m(t) \otimes \hat{B}_m(t)$$
(5.11)

correspondant à une somme d'opérateurs agissant sur le système $\hat{S}_m(t)$ et sur le bain $\hat{B}_m(t)$, on peut écrire l'équation ci-haut comme

$$\begin{split} \dot{\hat{\rho}}(t) &= -\int_{0}^{t} dt_{1} \operatorname{Tr}_{B} \Big\{ \hat{H}_{SB}(t) \hat{H}_{SB}(t_{1}) \hat{\rho}(t_{1}) \otimes \hat{\rho}_{B}(0) - \hat{H}_{SB}(t) \hat{\rho}(t_{1}) \otimes \hat{\rho}_{B}(0) \hat{H}_{SB}(t_{1}) \\ &- \hat{H}_{SB}(t_{1}) \hat{\rho}(t_{1}) \otimes \hat{\rho}_{B}(0) \hat{H}_{SB}(t) + \hat{\rho}(t_{1}) \otimes \hat{\rho}_{B}(0) \hat{H}_{SB}(t) \hat{H}_{SB}(t_{1}) \Big\} \\ &= -\sum_{m,m'} \int_{0}^{t} dt_{1} \Big\{ \hat{S}_{m}(t) \hat{S}_{m'}(t_{1}) \hat{\rho}(t_{1}) \langle \hat{B}_{m}(t-t_{1}) \hat{B}_{m'}(0) \rangle - \hat{S}_{m}(t) \hat{\rho}(t_{1}) \hat{S}_{m'}(t_{1}) \langle \hat{B}_{m'}(t_{1}-t) \hat{B}_{m}(0) \rangle \\ &- \hat{S}_{m'}(t_{1}) \hat{\rho}(t_{1}) \hat{S}_{m}(t) \langle \hat{B}_{m}(t-t_{1}) \hat{B}_{m'}(0) \rangle + \hat{\rho}(t_{1}) \hat{S}_{m'}(t_{1}) \hat{S}_{m}(t) \langle \hat{B}_{m'}(t_{1}-t) \hat{B}_{m}(0) \rangle \Big\}. \end{split}$$

$$(5.12)$$

Dans cette expression,

$$\langle \hat{B}_{m'}(t_1 - t)\hat{B}_m(0) \rangle = \langle \hat{B}_{m'}(t_1)\hat{B}_m(t) \rangle = \text{Tr}_{\text{B}} \left\{ \hat{B}_{m'}(t_1)\hat{B}_m(t)\hat{\rho}_{\text{B}}(0) \right\}$$
(5.13)

est une fonction de corrélation des opérateurs agissant sur l'environnement. Le couplage à l'environnement étant supposé faible, dans la représentation d'interaction, $\hat{\rho}(t)$ ne peut qu'évoluer lentement. À l'opposé, on supposera que les opérateurs agissant dans l'espace d'Hilbert de l'environnement ont un temps de corrélation très petit, de sorte que $\langle \hat{B}_{m'}(t_1 - t)\hat{B}_m(0) \rangle$ est non-nul seulement autour de $t_1 \approx t$. Dans ce cas, puisque seuls les temps $t_1 \approx t$ contribueront à l'intégrale, on peut prendre $\hat{\rho}(t_1) \rightarrow \hat{\rho}(t)$ dans l'expression ci-haut sans grande erreur. Finalement, pour la même raison, on peut faire tendre la borne inférieure à $-\infty$ sans changer significativement la valeur de l'intégrale. Cette dernière approximation est connue sous le nom d'*approximation de Markov* et correspond à dire que l'environnement n'a pas de "mémoire", c'est-à-dire que ses fonctions de corrélation décroissent très rapidement par rapport au temps d'évolution du système.

Avec ces approximations, on peut finalement écrire l'Éq. (5.10) sous la forme de Born-Markov

$$\dot{\hat{\rho}}(t) = -\int_{-\infty}^{t} dt_1 \operatorname{Tr}_{B} \left\{ [\hat{H}_{SB}(t), [\hat{H}_{SB}(t_1), \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_{B}(0)]] \right\}$$

$$= -\int_{0}^{\infty} dt' \operatorname{Tr}_{B} \left\{ [\hat{H}_{SB}(t), [\hat{H}_{SB}(t-t'), \hat{\rho}(t) \otimes \hat{\rho}_{B}(0)]] \right\},$$
(5.14)

où, dans la seconde égalité, on a fait le remplacement $t' = t - t_1$.

5.2 Formule de régression quantique

On s'intéresse à dans cette section à calculer des moyennes d'opérateurs et fonctions de corrélations à partir de l'équation maitresse. Afin de rendre la discussion le plus concrète possible, on s'intéressera à l'équation maîtresse de l'oscillateur harmonique amorti qui s'écrit

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}\rho = -i\omega_0 \left[a^{\dagger}a, \rho \right] + \kappa \left\{ a\rho a^{\dagger} - a^{\dagger}a\rho/2 - \rho a^{\dagger}a/2 \right\},$$
(5.15)

avec ω_0 la fréquence de l'oscillateur et κ son taux d'amortissement.

,

On commence par déterminer la valeur moyenne de l'opérateur a. On montre d'abord que

$$\langle \dot{a} \rangle = \partial_t \operatorname{Tr} \left[a(t)\rho(0) \right] = \partial_t \operatorname{Tr} \left[U^{\dagger}(t)a(0)U(t)\rho(0) \right]$$

= $\partial_t \operatorname{Tr} \left[a(0)U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t) \right] = \partial_t \operatorname{Tr} \left[a\rho(t) \right]$
= $\operatorname{Tr} \left[a\dot{\rho} \right].$ (5.16)

Puisque $\dot{\rho} = \mathcal{L}\rho$ on a donc que $\langle \dot{a} \rangle = \text{Tr}[a(\mathcal{L}\rho)]$. Dans le cas qui nous intéresse ici, on a donc immédiatement

$$\langle \dot{a} \rangle = -i\omega_0 \operatorname{Tr}\left(a\left[a^{\dagger}a,\rho\right]\right) + \kappa \operatorname{Tr}\left(a\left\{a\rho a^{\dagger} - a^{\dagger}a\rho/2 - \rho a^{\dagger}a/2\right\}\right)$$
(5.17)

On profite maintenant de la cyclicité de la trace et l'on choisit d'écrire dans l'ordre normal en utilisant $aa^{\dagger} = a^{\dagger}a + 1$ pour obtenir

$$\langle \dot{a} \rangle = -i\omega_0 \operatorname{Tr} \left[\left(a^{\dagger} a + 1 \right) a \rho - a^{\dagger} a a \rho \right] + \kappa \operatorname{Tr} \left[a^{\dagger} a a \rho - \left(a^{\dagger} a + 1 \right) a \rho / 2 - a^{\dagger} a a \rho / 2 \right]$$

$$= -i\omega_0 \operatorname{Tr} \left[a \rho(t) \right] - \frac{\kappa}{2} \operatorname{Tr} \left[a \rho(t) \right]$$

$$= -i(\omega_0 - i\kappa/2) \langle a(t) \rangle.$$

$$(5.18)$$

On a donc montré que

$$\langle a(t) \rangle = \langle a(0) \rangle e^{-i(\omega_0 - i\kappa/2)t}.$$
(5.19)

Il s'agit du résultat usuel pour l'oscillateur harmonique, avec ici la dissipation au taux $\kappa/2$ en plus. Il peux être surprenant de voir le taux $\kappa/2$ plutôt que κ . ce dernier taux est toutefois le taux de relaxation de l'énergie et c'est donc le nombre moyen de photons par contre décroit au taux κ . En effet, on montre facilement que

$$\langle n(t)\rangle = \langle n(0)\rangle e^{-\kappa t}.$$
(5.20)

De façon plus générale pour un opérateur O arbitraire, il est intéressant de remarquer que

$$\begin{aligned} \langle \dot{O} \rangle &= \operatorname{Tr} \left(O\mathcal{L}\rho \right) = \operatorname{Tr} \left\{ O\left(a\rho a^{\dagger} - \frac{a^{\dagger}a}{2}\rho - \rho \frac{a^{\dagger}a}{2} \right) \right\} \\ &= \operatorname{Tr} \left\{ \left(a^{\dagger}Oa - O\frac{a^{\dagger}a}{2} - \frac{a^{\dagger}a}{2}O \right) \rho \right\} \\ &= \operatorname{Tr} \left\{ \left(\mathcal{L}_{H}O \right) \rho \right\}, \end{aligned}$$
(5.21)

où \mathcal{L}_H est le Lindbladien en représentation d'Heisenberg. Comme on le verra plus tard, ce résultat n'est valide qu'avec la valeur moyenne qu'il ne faut pas omettre ici. En effet, sans valeur moyenne, ce résultat violerait le théorème de fluctuation-dissipation.

On passe maintenant aux fonctions de corrélations à deux temps de la forme $\langle A(t + \tau)B(t)\rangle$. Pour ce calcul, on retourne en quelque sorte à la case départ et on 'oublie' temporairement l'équation maîtresse. De façon très générale on peut ainsi écrire que

$$\langle A(t+\tau)B(t)\rangle = \operatorname{Tr}_{SB}\left[U^{\dagger}(t+\tau)AU(t+\tau)U^{\dagger}(t)BU(t)\rho_{\text{tot}}\right]$$
(5.22)

où $U(t) = \exp{-iHt}$ est l'opérateur d'évolution sous l'Hamiltonien total $H = H_S + H_B + H_{SB}$ et $\rho_{\text{tot}} = \rho \otimes \rho_\beta$ est la matrice densité totale au temps t = 0. En profitant à nouveau de la cyclicité de la trace, on peut écrire cette dernière expression comme [32]

$$\langle A(t+\tau)B(t)\rangle = \operatorname{Tr}_{SB} \left[AU(\tau)BU(t)\rho_{\text{tot}}U^{\dagger}(t+\tau) \right]$$

= $\operatorname{Tr}_{SB} \left[AU(\tau)B\rho_{\text{tot}}(t)U^{\dagger}(\tau) \right]$ (5.23)
= $\operatorname{Tr}_{S} \left[A\operatorname{Tr}_{B} \left[U(\tau)B\rho_{\text{tot}}(t)U^{\dagger}(\tau) \right] \right].$

Il est maintenant utile de définir $X_t(\tau) \equiv U(\tau)B\rho_{tot}(t)U^{\dagger}(\tau) = e^{-iH\tau}B\rho_{tot}(t)e^{+iH\tau}$. De par sa définition, cet opérateur satisfait à l'équation :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} X_t(\tau) = -i[H, X_\tau(t)]. \tag{5.24}$$

En comparant avec l'équation (5.3), on se rend compte que l'on a déjà résolu ce problème. En effet on avait alors

$$\dot{\rho}_{\text{tot}} = -i[H, \rho_{\text{tot}}] \tag{5.25}$$

et l'on s'intéressait à $\text{Tr}_B \rho_{\text{tot}} = \rho(t)$, exactement comme dans l'équation (5.41) ci-haut. On avait alors montré que la matrice densité réduite évolue selon $\dot{\rho}(t) = \mathcal{L}\rho$ et on doit donc immédiatement conclure que

$$\operatorname{Tr}_{B}[\partial_{\tau}X_{t}(\tau)] = \mathcal{L}\operatorname{Tr}_{B}[X_{t}(\tau)]$$
(5.26)

avec le même L que plus haut. La solution de cette équation prend donc la forme

$$\operatorname{Tr}_{B}(X_{t}(\tau)) = e^{\mathcal{L}\tau} \operatorname{Tr}_{B}[X_{t}(0)] = e^{\mathcal{L}\tau} \operatorname{Tr}_{B}[B\rho_{\operatorname{tot}}(t)]$$

= $e^{\mathcal{L}\tau} (B\rho(t)).$ (5.27)

Portant ce résultat dans l'équation (5.41), on obtient finalement :

$$\langle A(t+\tau)B(\tau)\rangle = \operatorname{Tr}_{S}\left[Ae^{\mathcal{L}\tau}\left(B\rho(t)\right)\right].$$
(5.28)

On montre de la même façon que

$$\langle A(t)B(t+\tau)\rangle = \operatorname{Tr}_{S}\left[Be^{\mathcal{L}\tau}\left(\rho(t)A\right)\right].$$
(5.29)

Ces expressions sont connues sous le nom de formule de régression quantique.

Il existe une forme particulièrement simple de ces formules dans le cas où l'on a affaire à un ensemble complet d'observables $\{A_{\mu}\}$ avec $\mu = 1, 2...$ [32]. Par cela, on veut dire que pour tout A_{μ} dans l'ensemble et pour tout opérateur O on a :

$$\operatorname{Tr}_{S}\left[A_{\mu}(\mathcal{L}O)\right] = \sum_{\lambda} M_{\mu\lambda} \operatorname{Tr}_{S}\left[A_{\lambda}O\right],$$
(5.30)

où les $M_{\mu\lambda}$ sont des constantes. Cette dernière expression conduit à

$$\langle \dot{A}_{\mu} \rangle = \operatorname{Tr}_{S} \left[A_{\mu} \dot{\rho} \right] = \operatorname{Tr}_{S} \left[A_{\mu} (\mathcal{L} \rho) \right] = \sum_{\lambda} M_{\mu\lambda} \operatorname{Tr}_{S} \left[A_{\lambda} \rho \right] = \sum_{\lambda} M_{\mu\lambda} \langle A_{\lambda} \rangle.$$
(5.31)

En d'autres mots, on a affaire à un ensemble d'équations différentielles linéaires couplées que l'on peut écrire en notation vectorielle sous la forme

$$\langle \dot{\mathbf{A}} \rangle = \mathbf{M} \langle \mathbf{A} \rangle, \tag{5.32}$$

avec **M** la matrice de coefficient $M_{\mu\lambda}$.

On utilise maintenant les résultats obtenus plus haut pour écrire :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle A_{\mu}(t+\tau)B(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial \tau} \operatorname{Tr}_{S} \left[A_{\mu} e^{\mathcal{L}\tau} \left(B\rho(t) \right) \right]
= \operatorname{Tr}_{S} \left[A_{\mu} \mathcal{L} e^{\mathcal{L}\tau} \left(B\rho(t) \right) \right]
= \sum_{\lambda} M_{\mu\lambda} \operatorname{Tr}_{S} \left[A_{\lambda} e^{\mathcal{L}\tau} \left(B\rho(t) \right) \right]
= \sum_{\lambda} M_{\mu\lambda} \langle A_{\lambda}(t+\tau)B(t) \rangle,$$
(5.33)

ou encore en notation vectorielle

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \mathbf{A}(t+\tau)B(t) \rangle = \mathbf{M} \langle \mathbf{A}(t+\tau)B(t) \rangle.$$
(5.34)

On a donc montré que pour un ensemble complet d'opérateurs, il est facile de déterminer les fonctions de corrélation à deux temps à partir des équations du mouvement pour les valeurs
moyennes. Par exemple, on a déjà montré que $\langle \dot{a}(t) \rangle = -(i\omega_0 + \kappa/2)\langle a(t) \rangle$. On obtient l'expression équivalente pour $\langle a^{\dagger}(t + \tau)a(t) \rangle$ immédiatement avec le remplacement $A = a^{\dagger}$ et B = a dans les expressions précédentes pour obtenir

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle a^{\dagger}(t+\tau)a(t) \rangle = + \left(i\omega_0 - \frac{\kappa}{2} \right) \langle a^{\dagger}(t+\tau)a(t) \rangle$$
(5.35)

et donc

$$\langle a^{\dagger}(t+\tau)a(t)\rangle = \langle a^{\dagger}(t)a(t)\rangle e^{+(i\omega_0 - \kappa/2)t} = \langle n(t)\rangle e^{+(i\omega_0 - \kappa/2)\tau} = \langle n(0)\rangle e^{+i\omega_0\tau} e^{-\kappa(\tau/2+t)},$$
(5.36)

où l'on a utilisé l'Éq. (5.38) pour la dernière égalité.

On remarque finalement que l'on a utilisé pour obtenir la formule de régression quantique le travail déjà effectué pour obtenir l'équation maîtresse de Born-Markov. La formule de régression quantique est donc valide si ces approximations le sont.

5.3 Représentations d'espace de phase

5.4 Formalisme input-output

6.1 Qubits de spin

6.2 Qubits supraconducteurs

6.2.1 Fluxonium

Le fluxonium est une boîte à paires de Cooper (CPB) court-circuitée par une inductance. Son Hamiltonien est donc [33]

$$H_{\rm Fluxonium} = 4E_C (n - n_g)^2 - E_J \cos(2\pi\varphi/\Phi_0) + \frac{(\varphi - \Phi_x)^2}{2L}.$$
 (6.1)

On applique une transformation unitaire $U = \exp(-in_g \varphi)$ de façon à éliminer la charge de grille. Suivant la prescription de l'Éq. (1.63), on obtient

$$H'_{\rm Fluxonium} = 4E_C n^2 - E_J \cos(2\pi\varphi/\Phi_0) + \frac{(\varphi - \Phi_x)^2}{2L}.$$
 (6.2)

Si la charge de grille dépend du temps, par exemple en présence de bruit de charge, l'Hamiltonien transformé garde une dépendance en n_g proportionnelle à \dot{n}_g . Le spectre de bruit de cette quantité est $S_{\dot{n}_g} = \omega^2 S_{n_g}(\omega)$. Ainsi, pour du bruit en 1/f, $S_{n_g}(\omega) = A/|\omega|$ avec $A \sim 10^{-4} - 10^{-3}e$ l'amplitude typique du bruit de charge [34], on a que $S_{\dot{n}_g} = A\omega$. Ce comportement en f ne cause que peu de déphasage. On conclut donc que le bruit de charge n'en 1/f n'est pas une cause important de déphasage pour le fluxonium [33].

La transformation unitaire que nous avons appliquée ici peut évidemment être appliquée sur l'Hamiltonien de la CPB avec le même résultat. On pourrait donc penser, à tort, que la même conclusion s'applique à ce système. Il y a toutefois une différence importante. On remarque que contrairement au fluxonium, le potentiel de la CPB est périodique en φ de sorte que

$$|\psi(\varphi + 2\pi)\rangle = |\psi(\varphi)\rangle. \tag{6.3}$$

On sait que, sous la transformation unitaire, la fonction d'ondes se transforme comme $|\psi'(\varphi)\rangle = e^{-in_g \varphi} |\psi(\varphi)\rangle$. Ceci implique que

$$\begin{aligned} |\psi'(\varphi+2\pi)\rangle &= e^{-in_g(\varphi+2\pi)} |\psi(\varphi+2\pi)\rangle \\ &= e^{-in_g(\varphi+2\pi)} |\psi(\varphi)\rangle, \end{aligned}$$
(6.4)

et donc que

$$|\psi'(\varphi+2\pi)\rangle = e^{-i2\pi n_g} |\psi'(\varphi)\rangle.$$
(6.5)

Si n_g n'est pas un entier, la transformation unitaire affecte donc les conditions frontières périodiques qui ne sont plus respectées par la fonction d'ondes transformée et ce même si $\dot{n}_g = 0$. L'expression Eq. (6.5) correspond en fait au théorème de Bloch pour une particule de vecteur d'onde $k = n_g$ dans un réseau périodique de pas $a = 2\pi$. Dans la limite où $E_J/E_C \gg 1$, l'Hamiltonien de la CPB est dominé par le terme Josephson. On obtient immédiatement de l'approche de couplage fort (*tight-binding*) que la relation de dispersion $E_m(n_g)$ s'approche d'un cosinus [34]

$$E_m(n_g) \simeq E_m(n_g = 1/4) - \frac{\epsilon_m}{2} \cos(2\pi n_g), \tag{6.6}$$

où

$$\epsilon_m \equiv E_m(n_g = 1/2) - E_m(n_g = 0) \tag{6.7}$$

est l'amplitude maximale des oscillations de la dispersion de charge. Toujours dans la limite $E_I/E_C \gg 1$, on montre que

$$\epsilon_m \simeq (-1)^m E_C \frac{2^{4m+5)}}{m!} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{E_J}{2E_C}\right)^{m/2+3/4} \exp(-\sqrt{8E_J/E_C}).$$
 (6.8)

À l'opposé, pour le fluxonium, le terme inductif brise la périodicité du potentiel. Il n'y a donc pas de condition frontière à respecter et l'impact de la charge de grille n'est que le terme en \dot{n}_g dans l'Hamiltonien transformé. On en conclut donc que les fluctuations lentes de la charge de grille causent du déphasage pour le CPB mais très peu pour le fluxonium.

6.3 Électrodynamique quantique en circuit

A États Cohérents



Le déplacement dans l'espace des phases se fait avec :

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^{\dagger} - \alpha^{*}a}$$

$$= e^{\frac{|\alpha|^{2}}{2}} e^{\alpha a^{\dagger}} e^{-\alpha^{*}a}$$
(A.1)

Puisque

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{[A,B]}{2}}$$
(A.2)

pour [A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0.

 $D(\alpha)$ respecte les propriétés suivantes :

$$D^{\dagger}(\alpha)aD(\alpha) = a + \alpha$$

$$D^{\dagger}(\alpha)a^{\dagger}D(\alpha) = a + \alpha^{*}$$
(A.3)

L'état cohérent est :

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle \tag{A.4}$$

avec $a|\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$. En effet :

$$D^{\dagger}(\alpha)a|\alpha\rangle = D^{\dagger}(\alpha)aD(\alpha)|0\rangle$$

= $(a + \alpha)|0\rangle$ (A.5)
= $\alpha|0\rangle$

En multipliant de part et d'autre par $D(\alpha)$, on a bien :

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{A.6}$$

On montre que

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$
(A.7)

et donc que la distribution des n est Poisonienne :

$$P(n) = |\langle n|\alpha \rangle|^2 = \frac{|\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2}}{n!}$$
(A.8)

Notons que

$$\langle \alpha | \beta \rangle \neq \delta(\alpha - \beta)$$

= $e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - 2\alpha^*\beta)}$ (A.9)

On a aussi :

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \, |\alpha\rangle \langle \alpha| = \mathbb{I} \tag{A.10}$$

Note :

Sature Heisenberg

$$\Delta x \Delta P = \frac{\hbar}{2} \tag{A.12}$$

Fonction Q

$$Q(\alpha) = \frac{\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle}{\pi} \ge 0 \tag{A.13}$$

Et,

$$1 = \operatorname{Tr} \rho = \operatorname{Tr} \left\{ \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \, |\alpha\rangle \langle \alpha|\rho \right\}$$
$$= \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \, \langle \alpha|\rho|\alpha\rangle = 1$$
(A.14)

Donc,

$$\int d^2 \alpha \ Q = 1 \tag{A.15}$$

Fonction P

$$\rho = \int P(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha | d^2 \alpha \tag{A.16}$$

Lien entre P et Q

$$Q(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi} \int d^2 \lambda \ e^{-|\lambda - \alpha|^2} P(\lambda, \lambda^*)$$

$$Q(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} \int d^2 \lambda \ e^{-2|\lambda - \alpha|^2} W(\lambda, \lambda)$$
(A.17)



B MODÈLE RCSJ



Courant :

$$I_b = I_c \sin \varphi + \frac{V}{R} + C_J \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \tag{B.1}$$

Mais,

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{2\pi}{\Phi_0}\right) V \tag{B.2}$$

Et donc,

$$I_b = I_c \sin \varphi + \frac{1}{R} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} + C_J \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \frac{\mathrm{d}^2 \varphi}{\mathrm{d}t^2} \tag{B.3}$$

On réécris cette expression sous la forme :

$$C_{J}\left(\frac{\Phi_{0}}{2\pi}\right)^{2}\ddot{\varphi} + \frac{1}{R}\left(\frac{\Phi_{0}}{2\pi}\right)^{2}\dot{\varphi} + \left(\frac{I_{C}\Phi_{0}}{2\pi}\right)\left[\sin\varphi - \frac{I}{I_{C}}\right] = \left(\frac{\Phi_{0}}{2\pi}\right)I_{N}$$

$$m\ddot{\varphi} + \gamma\dot{\varphi} + \frac{\mathrm{d}U(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi} = F_{N}$$
(B.4)

On a donc une "particule" de "masse" $m = C_J (\Phi_0/2\pi)^2$ dans un potentiel :

$$U(\varphi) = -\left(\frac{I_C \Phi_0}{2\pi}\right) \left[\cos\varphi + \left(\frac{I}{I_C}\right)\varphi\right]$$
(B.5)

On trouve la fréquence des petites oscillations dans un minimum du puits :

$$U(\varphi) \approx U(\varphi_0) + \frac{1}{2} \underbrace{U''(\varphi_0)}_{=m\omega_p^2} (\varphi - \varphi_0)^2$$
(B.6)



Avec,

$$\omega_{p} = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{I_{C} \Phi_{0}}{2\pi}} \quad \dot{a} \quad I = 0$$

$$= \sqrt{\frac{1}{C_{J}} (2\pi)^{2} \frac{(2e)^{2}}{h^{2}} E_{J}} = \frac{\sqrt{8E_{C}E_{J}}}{\hbar} \quad (B.7)$$

La fréquence plasma.

Courant Critique

À $I = I_C$, il n'y a plus de barrière de potentiel.

$$U'(\varphi)|_{\varphi=\frac{\pi}{2}} = \sin\varphi|_{\varphi=\frac{\pi}{2}} + \frac{I}{I_C} = 0$$
(B.8)

 $I = I_C$, il n'y a plus de pente au max. $\dot{\varphi} \neq 0$ à la moindre fluctuation \Rightarrow Voltage.



- [1] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [2] Darrell G. Schlom et Loren N. Pfeiffer. Oxide electronics : Upward mobility rocks ! *Nat Mater*, 9(11) :881–883, 11 2010.
- [3] J. Preskill. Quantum computation. 1997.
- [4] N. David Mermin. Commentary : Quantum mechanics : Fixing the shifty split. *Physics Today*, **65(7)** :8–10, 2012.
- [5] S. Popescu et D. Rohrlich. Thermodynamics and the measure of entanglement. *Phys. Rev. A*, **56** :R3319, 1997.
- [6] W.K. Wootters. Entanglement of formation and concurrence. *Quant. Inf. and Comp.*, **1**:27, 2001.
- [7] A. A. Clerk, M. H. Devoret, S. M. Girvin, Florian Marquardt, et R. J. Schoelkopf. Introduction to quantum noise, measurement, and amplification. *Rev. Mod. Phys.*, 82(2) :1155–1208, Apr 2010.
- [8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, et F. Laoe. Mécanique Quantique, vol. 2. Herman, 1973.
- [9] F. Bloch et A. Siegert. Magnetic resonance for nonrotating fields. Phys. Rev., 57:522, 1940.
- [10] D. Sénéchal. Mécanique quantique. Notes de cours phy-731, Université de Sherbrooke, 1997.
- [11] Henk van Houten et Carlo Beenakker. Quantum point contacts. *Physics Today*, 49(7) :22–27, 1996.
- [12] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, et C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a twodimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, **60** :848–850, Feb 1988.
- [13] D A Wharam, T J Thornton, R Newbury, M Pepper, H Ahmed, J E F Frost, D G Hasko, D C Peacock, D A Ritchie, et G A C Jones. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 21(8) :L209, 1988.
- [14] R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, **1**:223, 1957.
- [15] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, et F. Laloë. Mécanique Quantique, volume I. Hermann, Paris, 1973.
- [16] H. Bruus et K. Flensberg. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics : An Introduction*. Oxford University Press, 2004.
- [17] Ya.M. Blanter et M. Büttiker. Shot noise in mesoscopic conductors. *Physics Reports*, 336:1 166, 2000.
- [18] Richard Mattuck. A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem. Dover Publications, second edition, 1992.
- [19] M. Büttiker. Quantized transmission of a saddle-point constriction. Phys. Rev. B, 41 :7906– 7909, Apr 1990.

- [20] M. Büttiker. Absence of backscattering in the quantum hall effect in multiprobe conductors. *Phys. Rev. B*, **38** :9375–9389, Nov 1988.
- [21] M. Büttiker. Symmetry of electrical conduction. IBM J. Res. Dev., 32:317 334, (1988).
- [22] R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, et R. B. Laibowitz. Observation of *h/e* aharonov-bohm oscillations in normal-metal rings. *Phys. Rev. Lett.*, **54** :2696–2699, Jun 1985.
- [23] Gregor Hackenbroich. Phase coherent transmission through interacting mesoscopic systems. *Physics Reports*, **343(6)** :463 538, 2001.
- [24] F. Lefloch, C. Hoffmann, M. Sanquer, et D. Quirion. Doubled full shot noise in quantum coherent superconductor-semiconductor junctions. *Phys. Rev. Lett.*, **90(6)** :067002, Feb 2003.
- [25] L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin, et B. Etienne. Observation of the e/3 fractionally charged laughlin quasiparticle. *Phys. Rev. Lett.*, **79(13)** :2526–2529, Sep 1997.
- [26] R. de Picciotto, M. Reznikov, M. Heiblum, V. Umansky, G. Bunin, et D. Mahalu. Direct observation of a fractional charge. *Nature*, 389(6647) :162–164, 09 1997.
- [27] H.M. Nussenzveig. Causality and dispersion relations. Academic Press, 1972.
- [28] G. B. Arfken et H. J. Weber. Mathematical Methods For Physicists. Academic Press, 6 edition, 2005.
- [29] H. P. Breuer et F. Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, New York, 2007.
- [30] C.W. Gardiner et P. Zoller. *Quantum Noise : A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics.* Springer, New York, 2004.
- [31] Hermann Grabert, Peter Schramm, et Gert-Ludwig Ingold. Quantum brownian motion : The functional integral approach. *Physics Reports*, **168(3)** :115–207, 1988.
- [32] Howard J. Carmichael. Statistical Methods in Quantum Optics 1. Springer, 1999.
- [33] Jens Koch, V. Manucharyan, M. H. Devoret, et L. I. Glazman. Charging effects in the inductively shunted josephson junction. *Phys. Rev. Lett.*, **103**(21) :217004, Nov 2009.
- [34] Jens Koch, Terri M. Yu, Jay Gambetta, A. A. Houck, D. I. Schuster, J. Majer, Alexandre Blais, M. H. Devoret, S. M. Girvin, et R. J. Schoelkopf. Charge-insensitive qubit design derived from the cooper pair box. *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, 76(4):042319, 2007.

$T_1, 17$ $T_2, 17$ $T_{\varphi}, 17$ État mixte, 16 pur, 16 Visibilité, 11 États diffusés, 32 2DEG, 5 Admittance, 50 Approximation de Born, 53 de Markov, 54 séculaire, 23 Bruit de grenaille, 46 de Johnson-Nyquist, 46 Décohérence, 11 Déphasage, 11, 17 Densité électronique, 9 Distribution de Fermi, 9 Entropie de von Neumann, 16 Facteur de convergence, 51 Fenêtre de transport, 28 Gaz d'électrons dégénérés, 9 Hétérostructures, 5 Hamiltonien couplage minimal, 42 Matrice de diffusion, 30 densité, 14 Mobilité, 6 Phase géométrique, 43 Point de contact quantique, 27 Point quantique, 9 Pureté, 16 Référentiel tournant, 23 Rabi, fréquence de, 24 Relaxation, 17

INDEX

Représentation d'interaction, 25 Série de Dyson, 25 Trace partielle, 15 Vicibilité, 11