

CHAPITRE 1 :

Concepts importants en physique mésoscopique

Les notes de cours pour ce chapitre sont partiellement tirées des anciennes notes de cours du Pr Alexandre Blais.

1 Introduction

La **physique mésoscopique** est un domaine de la physique de la matière condensée qui étudie les systèmes ayant des dimensions intermédiaires entre celles de la physique quantique et de la physique classique.¹ La dimension mésoscopique est une dimension intermédiaire entre la dimension macroscopique et la dimension microscopique. Bien qu'il n'y ait pas de définition rigide pour les dimensions des systèmes mésoscopiques, la taille des systèmes étudiés est généralement comprise entre 10 à 1000 nm où les effets quantiques apparaissent.

Si les systèmes mésoscopiques et macroscopiques comprennent tous les deux plusieurs atomes, les systèmes macroscopiques sont bien décrits par les propriétés moyennes dérivées des lois de la mécanique classique, alors que les systèmes mésoscopiques sont affectés par les fluctuations autour de la moyenne et doivent être décrits par la mécanique quantique.

Un système est dit de dimensions mésoscopiques lorsqu'il commence à montrer des propriétés quantiques. Par exemple, alors que la conductance d'un fil macroscopique diminue continuellement avec son diamètre, devenant mésoscopique, la conductance du fil diminue par sauts discrets.

Remarque :

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

$$G = \frac{\sigma A}{L}, \quad (1.1)$$

où σ est la conductivité du matériel (une propriété indépendante des dimensions). Un des objectifs de ce cours est de montrer que l'Éq. (1.1) n'est plus valide lorsque les dimensions A et L sont plus petites que le libre parcours moyen, la longueur d'onde de Fermi, ou la longueur de déphasage.

1. https://fr.wikipedia.org/wiki/Physique_mésoscopique

Dispositif macroscopique	Dispositif mésoscopique
$L \gg L_m$ (régime diffusif)	$L \lesssim L_m$ (ballistic)
$L \gg L_\varphi$ (pas de cohérence de phase)	$L \lesssim L_\varphi$ (cohérence de phase)
$L \gg \lambda_F$ (pas de quantification d'énergie)	$L \lesssim \lambda_F$ (quantification d'énergie)
$E_C \ll k_B T$ (pas d'effets de charge d'un électron)	$E_C \gtrsim k_B T$ (effets de charge d'un électron)

TABLE 1 – Comparaison entre le transport électrique dans les conducteurs macroscopiques et mésoscopiques. L est la taille du dispositif, L_m est le libre parcours moyen, L_φ est la longueur de déphasage, λ_F est la longueur d'onde de Fermi, E_C est l'énergie de charge d'un électron.

La physique mésoscopique permet aussi de comprendre ce qui se produit lors de la miniaturisation d'objets macroscopiques comme les transistors dans l'industrie de l'électronique des semiconducteurs.² En effet, le nombre de transistors des microprocesseurs sur une puce de silicium double tous les deux ans (**“loi” de Moore**). Les propriétés physiques d'un matériau changent lorsque ses dimensions s'approchent de l'échelle nanométrique. Ainsi, la physique mésoscopique est intimement reliée aux domaines de la nanofabrication et de la nanotechnologie. En effet, les dispositifs utilisés en nanotechnologie sont des exemples de systèmes mésoscopiques. Ces dispositifs sont fabriqués, mesurés puis observés expérimentalement ou simulés théoriquement afin d'avancer dans la compréhension de la physique des isolants, semiconducteurs, métaux et supraconducteurs. Aujourd'hui, le domaine de la physique mésoscopique est en plein essor, grâce en partie à ces applications en électronique, spintronique, et information quantique. L'objectif de ce cours est d'explorer quelques uns des phénomènes mésoscopiques les plus célèbres, comme la quantification de la conductance à travers un point de contact quantique, l'effet Aharonov-Bohm, le blocage de Coulomb dans les boîtes quantiques, l'effet Hall quantique et la dynamique quantique des circuits électroniques.

2 Grandeurs caractéristiques importantes

Il y a plusieurs longueurs et énergies caractéristiques qui permettent de déterminer si un système est considéré comme mésoscopique. La table 1 résume les différences entre des dispositifs mésoscopiques et macroscopiques.³

2. Le 29 décembre 1959, Richard Feynman a donné une présentation visionnaire à la réunion annuelle de l'Américan Physical Society, intitulé “there's plenty of room at the bottom”. Il disait : *Je ne sais pas comment les rendre petites en pratique, mais je sais que les machines informatiques sont trop grandes, elles remplissent des pièces. Pourquoi ne pouvons-nous pas les rendre très petites, avec de petits fils et de petits composants, et par « petits », je veux dire « vraiment petits » ? Par exemple, les fils devraient avoir 10 ou 100 atomes de diamètre, et les circuits ne devraient avoir que quelques milliers d'angströms. Tous ceux qui ont analysé la théorie logique des ordinateurs parviennent à la conclusion que les possibilités des ordinateurs seraient très intéressants, s'ils pouvaient être rendus moins complexes de plusieurs ordres de grandeur. S'ils avaient des millions de fois plus d'éléments, ils pourraient émettre des jugements. Ils auraient le temps de calculer le meilleur moyen de faire le calcul qu'ils sont sur le point de faire. Ils pourraient choisir la méthode d'analyse qui, par leur expérience, serait meilleure que celle que nous leur fournirions. Et ils auraient plusieurs nouvelles caractéristiques qualitatives.*

3. T. Heinz, *Mesoscopic electronics in solid state nanostructures*, Wiley-Vch (2007).

2.1 Énergies caractéristiques

L'énergie caractéristique la plus évidente est l'**énergie thermique** $k_B T$, où T est la température du système. L'énergie thermique décrit l'énergie cinétique d'agitation microscopique d'un objet, qui est due à une agitation désordonnée de ses molécules et de ses atomes. La relation de conversion suivante est souvent utilisée en physique mésoscopique :

$$T = 1\text{K} \leftrightarrow k_B T \simeq 0.1 \text{ meV}. \quad (2.1)$$

Pour que des phénomènes mésoscopiques se manifestent, l'énergie thermique doit être plus petite que les énergies caractéristiques que nous allons introduire maintenant.

Exercice 1

Vérifiez l'Éq. (2.1).

La deuxième énergie caractéristique importante est l'**énergie de Fermi**, i.e. l'énergie maximale d'un électron à température zéro. Cette énergie apparaît dans la distribution de Fermi-Dirac, qui gouverne la physique statistique des systèmes d'électrons.

Rappel : La distribution de Fermi-Dirac

Les gaz de fermions suivent la statistique de Fermi-Dirac. Le nombre moyen de particules occupant un état quantique individuel λ d'énergie ϵ_λ est donné par la fonction de Fermi

$$f(\epsilon_\lambda) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} + 1}, \quad (2.2)$$

où $\beta = 1/(k_B T)$, T est la température et μ est le potentiel chimique. L'indice λ contient tous les nombres quantiques qui caractérisent un état quantique d'une particule. Pour un gaz d'électrons, les seuls degrés de liberté sont ceux de translations (impulsion \mathbf{k}) et de spin (s), d'où $\lambda = \{\mathbf{k}, s\}$. Notons que $0 \leq f(\epsilon_\lambda) \leq 1$, ce qui est cohérent avec le principe d'exclusion de Pauli. Les valeurs possibles de ϵ_λ sont discrètes et bornées inférieurement par le niveau fondamental individuel ϵ_0 . Par exemple, pour un gaz de particules de masse m non relativistes placées dans une boîte de volume $V = L_x L_y L_z$,

$$\epsilon_\lambda = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad (2.3)$$

où

$$k_i = \frac{\pi}{L_i} n_i; \quad n_i = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{conditions de frontière ouvertes}) \quad (2.4)$$

$$k_i = \frac{2\pi}{L_i} n_i; \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{conditions de frontière périodiques}) \quad (2.5)$$

Les conditions de frontière périodiques sont définis par

$$\begin{aligned}\psi_\lambda(x + L_x, y, z) &= \psi_\lambda(x, y, z) \\ \psi_\lambda(x, y + L_y, z) &= \psi_\lambda(x, y, z) \\ \psi_\lambda(x, y, z + L_z) &= \psi_\lambda(x, y, z),\end{aligned}\tag{2.6}$$

où L_x, L_y, L_z sont les dimensions du système et ψ_λ est la fonction d'onde correspondant à l'état individuel λ . Les conditions de frontière ouvertes sont définis par

$$\psi_\lambda(\mathbf{r} \in \text{parois}) = 0.\tag{2.7}$$

À température et potentiel chimique fixés, $f(\epsilon_\lambda)$ est une fonction décroissante de l'énergie ϵ_λ : les états individuels sont d'autant moins peuplés que leur énergie est plus élevée. Il est important de noter que **le potentiel chimique est une fonction de la température, du volume et du nombre moyen de particules**.

$$\mu = \mu(T, V, N).\tag{2.8}$$

En fait, étant donné que μ est une grandeur intensive, elle dépend uniquement de T et de $n = N/V$. Pour comprendre pourquoi μ dépend de T , considérons un morceau de métal, à l'intérieur duquel les électrons de conduction forment un gaz parfait. Par conséquent, le nombre total d'électrons de conduction peut s'écrire comme

$$N = \sum_\lambda f(\epsilon_\lambda).\tag{2.9}$$

En plus, dans un morceau de métal connu, on peut facilement estimer le nombre N . Par exemple, pour le cuivre (un métal typique), la densité est 9 g/cm^3 , le poids atomique est 63.5, et il y a un électron de conduction par atome.

Alors, le nombre d'électrons de conduction par unité de volume dans Cu est donné par

$$\begin{aligned}n &= \frac{\text{nombre d'électrons}}{\text{volume}} = \frac{\text{nombre d'atomes}}{\text{volume}} \times \frac{\text{nombre d'électrons de conduction}}{\text{atome}} \\ &= \frac{9 \text{ g/cm}^3}{63.5 \text{ g/mole}} \times N_A \frac{\text{atomes}}{\text{mole}} \times 1 \frac{\text{e}^-}{\text{atome}} = 8.4 \times 10^{22} \frac{\text{e}^-}{\text{cm}^3}.\end{aligned}\tag{2.10}$$

D'ici, $N = nV$, où V est le volume du morceau de métal. Intuitivement, il est clair que N ne dépend pas de la température (à moins que la température soit si élevée qu'on "arrache" des électrons du métal).

Or, cela exige que

$$\sum_{\lambda} f(\epsilon_{\lambda}) \quad (2.11)$$

soit indépendant de la température. Puisque $f(\epsilon)$ dépend de T , il est nécessaire du point de vue mathématique que μ varie avec T pour que l'Éq. (2.11) puisse rester indépendante de T . Alors, μ est une fonction de T et l'Éq. (2.9) permet de trouver μ en fonction de N , V et T , bien qu'il ne soit pas toujours facile de faire cela analytiquement.

À température nulle, $\beta \rightarrow \infty$, la distribution de Fermi-Dirac prend l'allure d'une "marche d'escalier" :

$$\lim_{T \rightarrow 0} f(\epsilon_{\lambda}) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon_{\lambda}) = \begin{cases} 1 & \epsilon_{\lambda} < \epsilon_F \\ 0 & \epsilon_{\lambda} > \epsilon_F \end{cases}, \quad (2.12)$$

où $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside et

$$\epsilon_F \equiv \mu(T = 0) \quad (2.13)$$

s'appelle l'**énergie de Fermi**. À une température non nulle mais basse par rapport à la **température de Fermi**

$$T_F \equiv \epsilon_F/k_B \quad (2.14)$$

la "marche d'escalier" de la distribution de Fermi-Dirac devient plus douce. Dans les métaux, T_F est de l'ordre de 10^4 K, et donc l'approximation de marche d'escalier est toujours très bonne. Dans les semiconducteurs, à cause de leur (relativement) basse densité de porteurs, T_F peut être plus basse que la température de la pièce.

À température nulle et à une densité de particules donnée, l'état d'équilibre minimise l'énergie totale moyenne E . Pour atteindre l'état de plus basse énergie dans un gaz de N fermions, tout en suivant la distribution de Fermi-Dirac, il faut occuper les états individuels de plus basse à plus haute énergie, avec une particule par état individuel. Une fois qu'on met toutes les particules sur place, *l'énergie de la particule la plus énergétique est ϵ_F* .

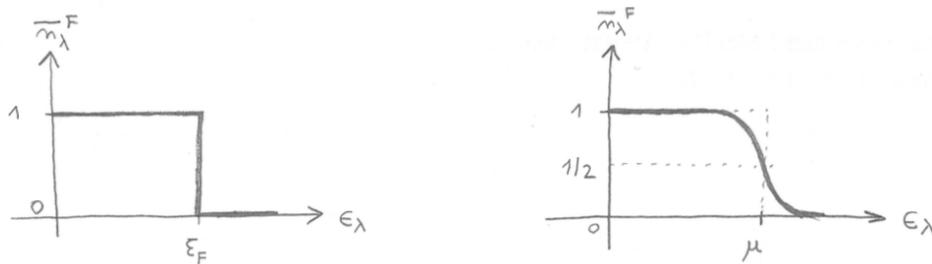


FIGURE 1 – Distribution de Fermi-Dirac, à température nulle (gauche) et à une température non nulle mais basse (droite). Note concernant la notation : \bar{n}_{λ}^F est équivalent à $f(\epsilon_{\lambda})$.

Une troisième énergie caractéristique importante est la **différence d'énergie entre deux états quantiques voisins**. On parle de confinement quantique lorsque les déplacements des électrons ou des trous d'un semiconducteur sont limités dans une ou plusieurs dimensions. Ce confinement modifie les propriétés électroniques d'un matériau, en rendant les niveaux d'énergie discrets. En effet, la quantification du vecteur d'onde (Éq. (2.4)) se traduit dans la quantification

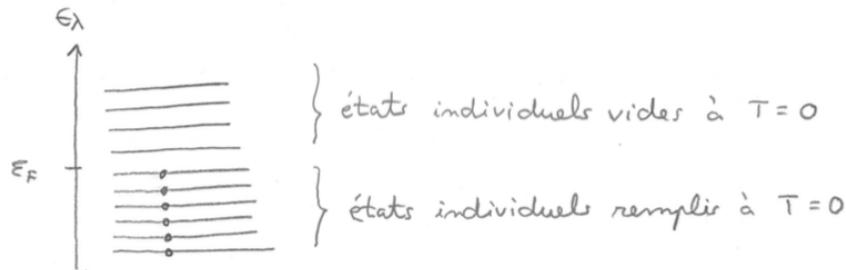


FIGURE 2 – Occupation des états individuels à température nulle. L'électron le plus énergétique a une énergie ϵ_F . Si on ajoute un autre électron au gaz, l'énergie du système augmente par $\simeq \epsilon_F$.

des niveaux d'énergie :

$$\begin{aligned} E_{n_x, n_y, n_z} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \text{ (cond. de frontière ouvertes)} \\ E_{n_x, n_y, n_z} &= \frac{\hbar^2 4\pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \text{ (cond. de frontière périodiques),} \end{aligned} \quad (2.15)$$

de sorte que la différence d'énergie entre deux états voisins est

$$\begin{aligned} E_{n_x+1, n_y, n_z} - E_{n_x, n_y, n_z} &\propto L_x^{-2} \\ E_{n_x, n_y+1, n_z} - E_{n_x, n_y, n_z} &\propto L_y^{-2} \\ E_{n_x, n_y, n_z+1} - E_{n_x, n_y, n_z} &\propto L_z^{-2}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Ainsi, un fort confinement donne lieu à une grande séparation entre des niveaux d'énergie successifs.

Finalement, l'**énergie de charge** E_C décrit le coût d'énergie électrostatique associé à l'ajout d'un électron dans un conducteur isolé. Il s'écrit comme

$$E_C = \frac{e^2}{2C}, \quad (2.17)$$

où C est la capacitance du conducteur isolé. Si le conducteur est une sphère de rayon a , on a $C = 4\pi\epsilon_0 a$, où ϵ_0 est la permittivité du vide. Pour un conducteur non-sphérique, C dépend approximativement linéairement de la taille du conducteur.

Exercice 2

Montrez que la capacité d'une sphère conductrice de rayon a est donnée par $4\pi\epsilon_0 a$. Donnez la valeur numérique de a pour que l'énergie de charge soit plus grande que l'énergie thermique à la température de la pièce.

Rappel : la densité d'états

Soit un système macroscopique, dans lequel la différence entre les valeurs voisines de k_i est très petite. Par conséquent, il y a beaucoup d'états (n_x, n_y, n_z) pour lesquels le vecteur d'onde est entre \mathbf{k} et $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$, même si $d\mathbf{k}$ est petit. Combien d'états y-a-t-il ?

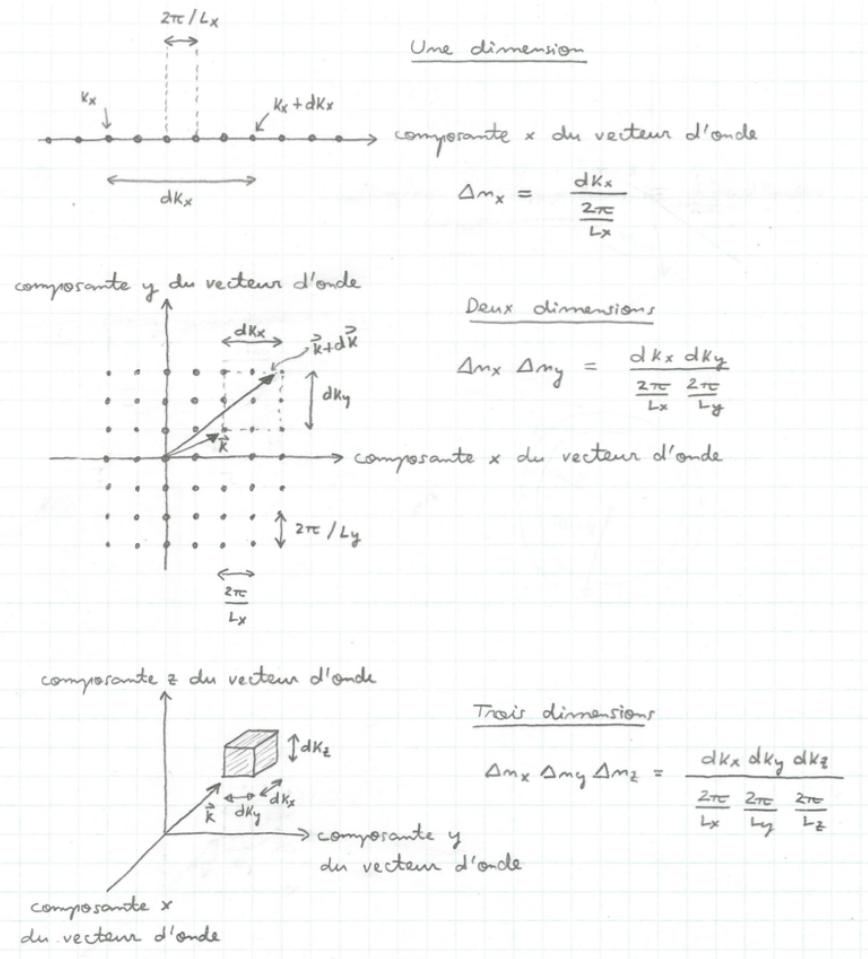


FIGURE 3 – Énumération d'états quantiques individuels avec un vecteur d'onde entre \mathbf{k} et $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$. En une dimension, Δn_x est le nombre d'états dont la composante x du vecteur d'onde prend une valeur entre k_x et $k_x + dk_x$ (sans compter le spin). $\Delta n_x \Delta n_y$ et $\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$ sont les généralisations en 2D et 3D, respectivement.

Oublions le spin pour l'instant, et imaginons d'abord que n_y et n_z (i.e. k_y et k_z) sont fixés. Soit Δn_x le nombre de valeurs de n_x pour lesquels la composante x du vecteur d'onde est entre k_x et $k_x + dk_x$. Puisque la “distance” entre deux points successifs du vecteur d'onde est $2\pi/L_x$, on a

$$\Delta n_x = \frac{dk_x}{\left(\frac{2\pi}{L_x}\right)} = \frac{L_x}{2\pi} dk_x \quad (2.18)$$

Alors, le nombre d'états (n_x, n_y, n_z) pour lesquels le vecteur d'onde est entre \mathbf{k} et $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$ est donné par

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^2} dk_x dk_y dk_z = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k \equiv \rho(\mathbf{k}) d^3 k, \quad (2.19)$$

où $V = L_x L_y L_z$ est le volume de la boîte, $d^3 k = dk_x dk_y dk_z$ est l'élément de volume infinitésimal dans l'espace de \mathbf{k} , et $\rho(\mathbf{k})$ est la **densité d'états** dans l'espace de \mathbf{k} . La quantité $\rho(\mathbf{k})d^3 k$ est l'analogue de $\Omega(E)$ (cf. chapitre 2) dans l'espace de \mathbf{k} et pour des états quantiques individuels. Dans le cas qui nous concerne ici,

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{k}) &= \frac{L_x}{(2\pi)} && \text{(en 1 dimension)} \\ \rho(\mathbf{k}) &= \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} && \text{(en 2 dimensions)} \\ \rho(\mathbf{k}) &= \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} && \text{(en 3 dimensions)} \end{aligned} \quad (2.20)$$

À partir de $\rho(\mathbf{k})$, nous pouvons obtenir d'autres densités d'états qui joueront également un rôle important dans les prochains chapitres. Par exemple, le nombre d'états tel que $k = |\mathbf{k}|$ est entre k et $k + dk$ en trois dimensions est calculé à partir de

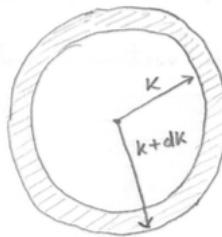


FIGURE 4 – Une coquille sphérique d'épaisseur dk dans l'espace de \mathbf{k} . Le nombre d'états individuels dans la zone ombrée est donné par $\rho(\mathbf{k})d^3k$ intégré sur les angles θ et ϕ en coordonnées sphériques.

$$\rho(k)dk = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(\mathbf{k})d^3k = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\phi \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \quad (2.21)$$

Donc,

$$\rho(k) = \frac{V}{2\pi^2} k^2 \text{ (en trois dimensions).} \quad (2.22)$$

Il est impératif de ne pas confondre $\rho(\mathbf{k})$ avec $\rho(k)$. Comme exercice, calculez $\rho(k)$ en une et deux dimensions [réponse : $\rho(k) = L_x L_y / (2\pi)k$ en 2D, $\rho(k) = L_x / \pi$ en 1D].

On peut définir la densité d'états avec des variables autres que \mathbf{k} . Par exemple, vous allez souvent rencontrer $\rho(\mathbf{p})$ (la densité d'états dans l'espace d'impulsion) et $\rho(\epsilon)$ (la densité d'états dans l'espace d'énergie). En général, il est facile d'obtenir $\rho(\mathbf{p})$ et $\rho(\epsilon)$ à partir de $\rho(\mathbf{k})$. Par exemple, quelle est la relation entre $\rho(\mathbf{k})$ et $\rho(\mathbf{p})$, étant donné que $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$? Le nombre d'états dont le vecteur d'onde est entre \mathbf{k} et $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$ doit être égal au nombre d'états dont l'impulsion est entre \mathbf{p} et $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$, de sorte que

$$\rho(\mathbf{p})d^3p = \rho(\mathbf{k})d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{d^3p}{\hbar^3} \Rightarrow \rho(\mathbf{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \text{ (3D),} \quad (2.23)$$

et des expressions analogues en 2D et 1D.

Pour obtenir $\rho(\epsilon)$, il faut connaître la relation entre ϵ et \mathbf{k} . Pour une particule non relativiste dans une boîte, $\epsilon = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m)$, i.e. ϵ est une fonction de la *grandeur* de \mathbf{k} seulement. Donc, le nombre d'états dont la grandeur du vecteur d'onde est entre k et $k + dk$ doit être égal au nombre d'états dont l'énergie est entre ϵ et $\epsilon + d\epsilon$. Mathématiquement, on écrit

$$\rho(\epsilon)d\epsilon = \rho(k)dk, \quad (2.24)$$

d'où

$$\rho(\epsilon) = \frac{\rho(k)}{\frac{d\epsilon}{dk}}. \quad (2.25)$$

Dans la partie droite de cette équation, il faut écrire k en fonction de ϵ . Par exemple, si on prend $\epsilon = \hbar^2 k^2 / (2m)$ en trois dimensions,

$$\rho(\epsilon) = \frac{4\pi k^2 \frac{V}{(2\pi)^3}}{\frac{\hbar^2 k}{m}} = \frac{mk}{2\pi^2 \hbar^2} = \frac{m\sqrt{2m\epsilon}}{2\pi^2 \hbar^3}. \quad (2.26)$$

Lorsque la dispersion d'énergie du système est moins simple (p. ex. plusieurs bandes, dispersions sans symétrie sphérique/cylindrique), la formule suivante est très utile :

$$\rho(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}n} \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k}n}), \quad (2.27)$$

où n est l'indice de bandes, $E_{\mathbf{k}n}$ est la dispersion de bandes, et $\delta(x)$ est la “fonction” delta de Dirac. Pour le cas particulier d'une seule bande avec une dispersion parabolique, l'Éq. (2.27) se réduit à l'Éq. (2.25). Souvent, on s'intéresse à la densité d'états par unité de volume (en 3D), aire (en 2D), ou longueur (en 1D). Dans ce cas, on divisera les résultats précédents par V , A ou L , respectivement.

Exercise 3

Pour vérifier que l'Éq. (2.27) est en effet la densité d'états, multipliez les deux côtés de l'équation avec l'élément infinitésimal d'énergie $d\epsilon$, et puis intégrez entre E et $E + \delta E$, avec δE également infinitésimal. Vérifiez que, au premier ordre en δE , cet intégrale donne

$$\rho(E)\delta E = \sum_{\mathbf{k}n} \Theta(E_{\mathbf{k}n} - E)\Theta(E + \delta E - E_{\mathbf{k}n}), \quad (2.28)$$

où Θ est la fonction de Heaviside. La partie droite de cette équation compte le nombre des états dont l'énergie est entre E et $E + \delta E$. Ainsi, le facteur $\rho(E)$ de la partie gauche de l'équation est bel est bien la densité d'états.

Finalement, une autre forme utile pour la densité d'états est

$$\rho(\epsilon) = \frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}, \quad (2.29)$$

où $N(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}n} \Theta(\epsilon - E_{\mathbf{k}n})$ est le nombre d'états électroniques dont l'énergie est plus basse que ϵ (Θ est la fonction de Heaviside). La preuve de cette formule est immédiate à partir de l'Éq. (2.27).

Exercise 4

Démontrez que, pour le cas particulier d'une seule bande avec une dispersion parabolique, l'Éq. (2.27) se réduit à l'Éq. (2.25).

Exercise 5

Obtenez $\rho(\epsilon)$ pour un gaz d'électrons en une, deux et trois dimensions. Faites le calcul de deux façons différentes : (i) en utilisant l'Éq. (2.25), et (ii) en utilisant l'Éq. (2.27).

Exercise 6

Obtenez des expressions analytiques pour la différence d'énergie entre deux états voisins au niveau de Fermi, dans un gaz d'électrons 1D, 2D et 3D. Donnez des valeurs numériques (en meV et en Kelvin) pour un métal typique et pour un semiconducteur typique (vous trouverez des valeurs typiques pour la masse effective et la densité électronique dans les livres de physique du solide).

Exercise 7

Imaginons un gaz d'électrons bidimensionnel sous un champ magnétique B perpendiculaire. Tel que vous avez appris en mécanique quantique ou en physique du solide, les niveaux d'énergie électroniques sont

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.30)$$

où $n = 0, 1, 2, \dots$ est l'**indice des niveaux de Landau** et $\omega_c = eB/m^*$ est la fréquence du cyclotron. Chaque niveau de Landau est fortement dégénéré (car l'énergie est indépendante de la position du centre des orbites du cyclotron). Quelle est la dégénérence de chaque niveau de Landau? Si vous n'avez jamais étudié ce problème, vous pouvez regarder p. ex. https://en.wikipedia.org/wiki/Landau_quantization. En utilisant ce résultat, montrez que la densité d'états par unité d'aire est donnée par

$$\rho(\epsilon) = 2 \frac{eB}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \delta(\epsilon - E_n), \quad (2.31)$$

où on a négligé le splitting Zeeman entre spin-up et spin-down. Tracez $\rho(\epsilon)$ en fonction de ϵ .

2.2 Longueurs caractéristiques

La longueur caractéristique la plus évidente est la **taille du système**, L . Souvent, la taille du système est différente pour chacune des trois dimensions. Dans ce cas, on utilise L_x , L_y , L_z . Pour que des phénomènes mésoscopiques se manifestent, la taille du système doit être plus petite que les trois longueurs caractéristiques que nous allons introduire maintenant.

La deuxième longueur caractéristique importante, **longueur d'onde de de Broglie**, est donnée par

$$\lambda = \frac{h}{m^*v}, \quad (2.32)$$

où h est la constante de Planck et m^*, v sont la masse effective et la vitesse des électrons (respectivement). Cette longueur donne la “taille quantique” minimale d'une particule. On peut voir cela à partir du principe d'incertitude de Heisenberg. En une dimension, on a $\Delta x \Delta p \gtrsim h$, où Δx est l'incertitude dans la position de la particule (i.e. sa “taille”), et Δp est l'incertitude dans sa quantité de mouvement. En effet,

$$\Delta x \gtrsim \frac{h}{\Delta p} = \frac{h}{\sqrt{\bar{p}^2 - \bar{p}^2}} = \frac{h}{\sqrt{\bar{p}^2}} = \frac{h}{m^* \sqrt{\bar{v}^2}}, \quad (2.33)$$

où \bar{x} est la valeur moyenne de x et on a utilisé $\bar{p} = 0$ (car, en équilibre, la particule a la même probabilité de se déplacer à gauche qu'à droite).

Pour les systèmes électroniques, il existe une longueur de de Broglie particulière qui joue un rôle essentiel en physique mésoscopique, c'est-à-dire la **longueur d'onde de Fermi**. Dans l'état fondamental d'un système électronique, lorsque tous les électrons sont placés dans les niveaux d'énergie disponibles en respectant le principe d'exclusion de Pauli, l'électron le plus énergétique

a une énergie cinétique appelée l'**énergie de Fermi**, ϵ_F . La longueur d'onde pertinente aux électrons du niveau de Fermi est la longueur d'onde de Fermi,

$$\lambda_F = \frac{h}{m^* v_F} = \frac{h}{\sqrt{2m^*\epsilon_F}} = \frac{2\pi}{k_F}, \quad (2.34)$$

où k_F est le vecteur d'onde de Fermi. Qualitativement, λ_F correspond à la distance moyenne typique entre deux électrons voisins, de sorte que λ_F devient plus petite lorsque la densité électronique du système augmente. À basse température, le transport électrique est principalement dû aux électrons au niveau de Fermi (d'énergie ϵ_F), d'où l'importance de λ_F .⁴

Exercice 8

Obtenez des expressions analytiques pour λ_F en fonction de la densité électronique dans un gaz d'électrons en une, deux et trois dimensions. Montrez que λ_F correspond *grossost modo* à la distance moyenne entre deux électrons voisins. Comparez λ_F d'un semiconducteur et d'un métal en prenant des densités électroniques typiques pour les deux. Étant donné que les effets de quantification d'énergie dans le transport électrique deviennent importants lorsque λ_F devient de l'ordre de la taille minimale du système, est-ce que ces effets sont plus faciles à observer dans les semiconducteurs ou dans les métaux ? Pourquoi ?

Exercice 9

Considérons un fil de dimensions $L \times W \times W$, avec une densité électronique linéique n_e . On suppose que L est une longueur macroscopique (parallèle à l'axe x du fil), tandis que W est petit. Donc, on prend des conditions de frontière ouvertes le long de y, z . La dispersion d'énergie est donnée par

$$E_{k_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_y^2}{W^2} + \frac{n_z^2}{W^2} \right), \quad (2.35)$$

où $n_y, n_z = 1, 2, 3\dots$ sont des **indices de sous-bande**, et m^* est la masse effective des électrons. Tracez les cinq premières sous-bandes en fonction de k_x , avec des étiquettes (n_y, n_z) . Calculez le nombre de sous-bandes occupées à température nulle (on dit qu'une bande est occupée si elle contient au moins un électron) et vérifiez qu'il dépend de W comme $k_F W$. Montrez qu'il y a une seule sous-bande occupée, $(n_y, n_z) = (1, 1)$, lorsque $k_F W \lesssim 1$, i.e. lorsque $\lambda_F/W \gtrsim 1$. Dans ce cas, on dit que le fil contient un gaz d'électrons *unidimensionnel*. Si le nombre de sous-bandes occupées est supérieur à 1, on dit que le fil contient un gaz d'électron *quasi-unidimensionnel*.

4. Cependant, il y a deux exceptions importantes à cette règle : l'effet Hall quantique et les courants persistants dans les anneaux conducteurs. Dans ces cas, les électrons de *tous* les niveaux d'énergie occupés contribuent au transport.

Exercise 10

Écrivez les fonctions d'onde correspondants aux niveaux d'énergie de l'Eq. (2.35). Pour faire cela, vous devez résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps avec des conditions de frontière ouvertes dans les directions y , z , et des conditions de frontière périodiques le long de x . En passant, montrez que les fonctions d'onde peuvent s'écrire comme $\psi_{k,n_y,n_z}(x,y,z) = \chi_{n_y,n_z}(y,z)e^{ikx}$, où χ est un produit d'ondes stationnaires.

Exercise 11

Considérez une couche mince d'électrons de dimensions $L \times L \times W$, où L est macroscopique et l'épaisseur W est petite. Trouvez une expression analytique pour la densité surfacique électronique maximale pour laquelle le gaz d'électrons est *bidimensionnel*. Utilisant $m^* = 0.067m_0$ (masse effective pour GaAs) et une densité surfacique $n_e \simeq 2 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ (densité typique pour un gaz d'électron bidimensionnel à l'interface GaAs/AlGaAs), calculez la valeur numérique maximale de W pour laquelle le gaz d'électron est bidimensionnel.

La troisième longueur caractéristique importante, le **libre parcours moyen** L_m , est la distance moyenne parcourue par une particule avant que son impulsion soit changée par une collision. Théoriquement, dans un cristal de taille infinie et parfaitement périodique, le moment cristallin \mathbf{k} des états de Bloch est un bon nombre quantique (i.e. une onde de Bloch se propage sans subir des collisions) et donc $L_m \rightarrow \infty$.⁵ Dans un tel cristal, un électron se déplace comme dans le vide, mais avec une masse effective m^* qui diffère de celle du vide ($m_0 = 9.1 \times 10^{-31}\text{kg}$).

5. En effet, le potentiel périodique d'un cristal *ne diffuse pas* les électrons.

Remarque : la masse effective

Dans la théorie de bandes, le *tenseur* de masse effective est proportionnel à l'inverse de la courbure de bandes,

$$\mathbf{m}_{\mathbf{k}n}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}n}}{\partial k_i \partial k_j} \right]^{-1}, \quad (2.36)$$

où $i, j \in \{x, y, z\}$, $E_{\mathbf{k}n}$ est l'énergie de l'état (\mathbf{k}, n) et n est l'indice de bandes. Ainsi, le tenseur de masse effective est représenté par une matrice 3×3 et dépend du moment cristallin \mathbf{k} et de l'indice de bandes n . Puisque nous serons surtout intéressés par des propriétés de transport, les valeurs les plus importantes de la masse effective sont celles à la surface de Fermi.

Dans l'approximation des bandes paraboliques, $\mathbf{m}^* = m^* \delta_{ij}$ est proportionnelle à la matrice identité et ses éléments diagonaux m^* sont indépendants de \mathbf{k} et de n . Même dans cet approximation, la masse effective est différente de la masse dans le vide, à cause du potentiel périodique cristallin. Les effets du potentiel périodique sont plus prononcés près des gaps d'énergie [voir p. ex. le chapitre 9 de N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt-Saunders, 1976)]. Par conséquent, pour des métaux simples avec des bandes demi-remplies (donc le niveau de Fermi loin des gaps), on trouve $m^* \simeq m_0$. Cependant, pour des semiconducteurs où le niveau de Fermi se trouve près d'un gap, $m^* \lesssim 0.1m_0$. Une masse effective plus petite implique une longueur d'onde de Fermi plus grande. Alors, λ_F est plus grand (par environ un ordre de grandeur) dans les semiconducteurs que dans les métaux (cf. l'Eq. (2.34)).

En pratique, les imperfections qui brisent la périodicité du cristal (ainsi que les bords du système) sont inévitables. Ces imperfections donnent lieu à la diffusion des électrons et donc à un libre parcours moyen fini. Plus la concentration d'impuretés est grande, plus L_m devient petit (en relation de proportionnalité inverse). Souvent, on définit

$$\tau_m = \frac{L_m}{v_F} \quad (2.37)$$

comme le **temps de relaxation** de l'impulsion. 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.

Il est important de distinguer différents mécanismes de diffusion. D'un côté, nous avons la diffusion due aux défauts statiques, p. ex. des atomes qui manquent ou qui sont déplacés (dislocations), des atomes étrangers (impuretés), ou même les parois de l'échantillon. Dans ces cas, la masse du centre de diffusion (la masse de l'ion, ou la masse du parois) est beaucoup plus grande que la masse de l'électron, et par conséquent la diffusion est élastique. En d'autres mots, l'énergie de l'électron est inchangée lors de la collision ($E_{\text{initial}} = E_{\text{final}}$), bien que son impulsion change ($\mathbf{k}_{\text{initial}} \neq \mathbf{k}_{\text{final}}$). On définit le **libre parcours moyen élastique** L_e comme la distance moyenne qu'un électron parcourt avant de subir une diffusion élastique. Dans un cristal idéal de dimension finie, le libre parcours moyen élastique est égal à la taille de l'échantillon.

Un deuxième type de perturbation qui brise la périodicité du cristal comprend des centres de diffusion dynamiques (dépendants du temps). L'exemple le plus commun est celui des vibrations du réseau (phonons), qui brisent la périodicité du cristal instantanément. À cause de l'attraction Coulombienne entre les électrons et les ions, les électrons interchangent de l'impulsion *et* de

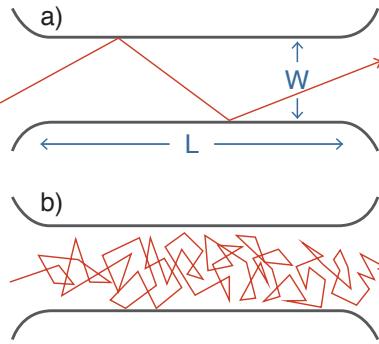


FIGURE 5 – a) Régime balistique : $L_m \gg L, W$. À l’exception des bords de l’échantillon, il n’y a pas de collisions changeant l’impulsion des porteurs. b) Régime diffusif : $L_m \ll L, W$.

l’énergie avec les phonons, ce qui constitue une diffusion inélastique. Autre que les phonons, les interactions électron-électron produisent elles aussi des collisions inélastiques. On définit le **libre parcours moyen inélastique** L_i comme la distance moyenne qu’un électron parcourt avant de subir une collision inélastique. Parfois, on appelle L_i la “longueur de relaxation d’énergie” (*energy relaxation length*, en anglais). Comme expliqué plus bas, une différence clé entre la diffusion élastique et inélastique est que seulement le dernier fait que la phase de la fonction d’onde électronique devient aléatoire.

Cette discussion nous donne l’occasion de mettre l’emphase sur deux types de transport électronique. Comme illustré à la Fig. 5, 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 $W < L_m < L$.

La troisième longueur caractéristique d’importance, la **longueur de déphasage** L_φ , correspond à la distance moyenne parcourue par un porteur avant que sa phase initiale soit perdue. La longueur de déphasage détermine le degré auquel l’électron peut expérimenter des phénomènes où la phase de la fonction d’onde est importante, i.e. des effets d’interférence quantique. Ainsi, la description en terme de sous-bandes dans un système confiné est valide si la taille typique de confinement des électrons du 2DEG est inférieure 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. Comme on discutera plus tard, la longueur de déphasage est intimement liée à la longueur de relaxation d’énergie.

Il est utile d’introduire le **temps de déphasage** τ_φ . On parlera aussi de façon équivalente de **temps de décohérence**. 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. 6. 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 quels

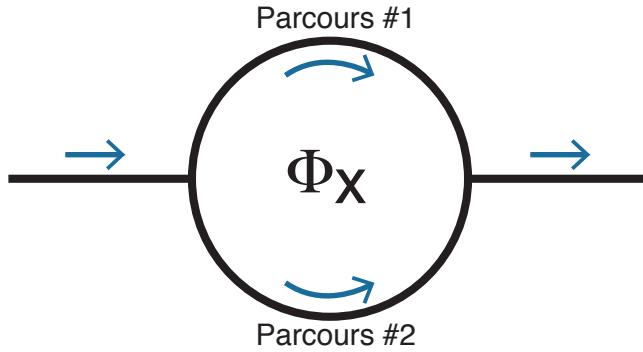


FIGURE 6 – Version mésoscopique de l’interféromètre de Young : un anneau, typiquement d’or ou d’aluminium, et de taille mésoscopique. Un flux magnétique Φ_x modifie la phase accumulée par les porteurs le long de l’anneau.

types de diffuseurs peuvent causer une telle réduction ? On considère ici trois classes :

1. 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.
2. 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.
3. Diffuseurs ayant un degré de liberté interne. Lors d’une collision, ce type de diffuseur peut changer d’état. Imaginons, par exemple, qu’une impureté ayant un spin 1/2 étant initialement dans l’état $|\uparrow\rangle$ se retrouve dans l’état $|\downarrow\rangle$ 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

$$(|H\rangle + |B\rangle) \otimes |\uparrow\rangle \longrightarrow |H\rangle |\uparrow\rangle + |B\rangle |\downarrow\rangle, \quad (2.38)$$

où $H(B)$ 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 $\langle H|B\rangle$, 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 disparaître si les états du spin après interaction avec l’électron ne sont pas orthogonaux. Nous formaliserons cette discussion à la prochaine section.

En général, $\tau_\phi \propto T^{-p}$, où p est un nombre positif, différent pour chaque mécanisme de déphasage.⁶ En d'autres mots, le temps de déphasage devient infini lorsque la température tend vers zéro. C'est à cause de cela que les effets d'interférence quantique deviennent visibles à basse température.

Revenons maintenant à la longueur de déphasage L_φ . Dans la (rare) situation où le temps de relaxation de l'impulsion est plus grand que le temps de déphasage $\tau_m \geq \tau_\varphi$, la vitesse des porteurs entre chaque événement changeant la phase est v_F et par conséquent

$$L_\varphi = v_F \tau_\varphi. \quad (2.39)$$

Souvent, on a toutefois $\tau_\varphi \gg \tau_m$. Il peut donc y avoir plusieurs collisions à l'intérieur du temps de déphasage. Après τ_m , la direction de propagation est complètement aléatoire et donc $\langle L_\varphi \rangle = 0$. Puisque cette valeur moyenne est nulle, on remplace L_φ dans l'Éq. (2.39) par sa grandeur rms. On détermine cette quantité en notant que, pendant un temps τ_φ , l'électron suit $\sim \tau_\varphi / \tau_m$ parcours chacun de distance $\sim \tau_m v_F$. En trois dimensions, ces petits parcours ont une direction (θ, ϕ) aléatoire. En moyennant sur l'angle solide de la sphère, la distance parcourue dans le temps τ_φ est

$$L_\varphi = \sqrt{\frac{\tau_\varphi}{\tau_m} \times \frac{v_F^2 \tau_m^2}{3}} = \sqrt{\frac{v_F^2 \tau_m}{3} \tau_\varphi} \equiv \sqrt{D \tau_\varphi}, \quad (2.40)$$

où $D = v_F^2 \tau_m / 3$ est le **coefficent de diffusion** en trois dimensions.⁷

6. Par exemple, les interactions électron-électron, qui sont une cause principale de déphasage aux plus basses températures, produisent $p = 1/2$.

7. L'Éq. (2.40) est un exemple de marche aléatoire en trois dimensions. Soit

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \quad (2.41)$$

la position finale de l'électron après $N = \tau_\varphi / \tau_m$ collisions. Étant donné que la direction du mouvement de l'électron après chaque collision est aléatoire, $\langle \mathbf{r} \rangle = 0$. Cependant, $\langle \mathbf{r}^2 \rangle \neq 0$ et

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \rangle = \sum_i \langle r_i^2 \rangle = \sum_i (\langle x_i^2 \rangle + \langle y_i^2 \rangle + \langle z_i^2 \rangle) = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle, \quad (2.42)$$

où on utilise le fait que les différentes collisions sont statistiquement indépendantes ($\langle r_i r_j \rangle = \langle r_i \rangle \langle r_j \rangle = 0$ pour $i \neq j$). De plus, $\langle r_i^2 \rangle$ est indépendant de i car tous les parcours ont la même longueur $v_F \tau_m$. Donc,

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = N \frac{v_F^2 \tau_m^2}{3}, \quad (2.43)$$

où le facteur $1/3$ vient de la valeur moyenne angulaire en trois dimensions. Par exemple, le calcul de $\langle z_i^2 \rangle$ implique l'intégrale

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \theta = 1/3. \quad (2.44)$$

On obtient le même résultat pour $\langle x_i^2 \rangle$ et $\langle y_i^2 \rangle$.

Exercise 12

Calculez L_ϕ dans le régime diffusif pour un gaz d'électrons bidimensionnel. Montrez qu'on peut toujours écrire $L_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}$, mais avec $D = v_F^2\tau_m/2$.

Comme le résume le Tableau 2, les longueurs caractéristiques 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 semiconducteurs à très hautes mobilités et en particulier dans les gaz électroniques bidimensionnels (2DEG, pour *two dimensional electron gaz*). Un grand nombre d'expériences en physique mésoscopique sont donc conduites sur des 2DEGs et on survolera leurs principales caractéristiques à la section 4.

Remarque :

La dimensionnalité du système est définie en relation au phénomène physique d'intérêt. Par exemple, si $L_x \ll L_\varphi$ mais $L_y, L_z \gg L_\varphi$, le système est 2D par rapport aux phénomènes basés sur l'interférence de la phase. Mais, si en même temps $L_x \gg \lambda_F$, le système est 3D par rapport aux effets de confinement.

3 Éléments du transport électrique semiclassique

Une grande partie de ce cours est consacrée à la compréhension du transport quantique dans les dispositifs mésoscopiques. Il est par conséquent pertinent de reviser quelques concepts clés du transport classique.

3.1 Vitesse de dérive

Nous allons commencer avec le modèle de transport le plus simple. Considérons un électron se déplaçant dans un milieu avec des impuretés. La probabilité de collision par unité de temps de l'électron avec les impuretés est $1/\tau_m$, où τ_m est le temps de diffusion du moment introduit plus haut. Tel que montré dans les livres sur la physique du solide [p. ex. chapitre 1 de N. W.

Dimensions	Grandeur 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 $T \lesssim 4$ K)
100 nm – 10 nm	Taille des dispositifs semi-conducteurs commerciaux
100 nm – 10 nm	Longueur de de Broglie dans les semi-conducteurs
100 nm – 10 nm	L_m dans les films métalliques polycristallins
1 nm – 1 Å	Longueur de de Broglie dans les métaux
1 nm – 1 Å	Distance typique entre les atomes

TABLE 2 – Grandeur caractéristiques en physique mésoscopique. Adapté de S. Datta, *Electron transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press (1997).

	Transport Diffusif	Transport Balistique
Transport Classique	$\lambda_F, L_m, L_\varphi \ll L$	$\lambda_F \ll L \ll L_m, L_\varphi$
Transport Quantique	$\lambda_F, L_m \ll L, L_\varphi$	$\lambda_F, L < L_m < L_\varphi$

TABLE 3 – Différents types de transport et les relations correspondantes entre les différentes longueurs caractéristiques. Les dispositifs électroniques macroscopiques sont dans le régime du transport diffusif classique, tandis que les dispositifs mésoscopiques peuvent être dans tous les quatre régimes de transport.

Ashcroft et N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt-Saunders, 1976)], l’effet des collisions entre les électrons et les impuretés est d’introduire une force de friction dans l’équation de mouvement du moment moyen \mathbf{p} de l’électron :

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\mathbf{p}}{\tau_m} + \mathbf{F}, \quad (3.1)$$

où \mathbf{F} est la force externe agissant sur l’électron. En régime stationnaire, la valeur moyenne du moment est $\mathbf{p} = \mathbf{F}\tau_m$. Similairement, la vitesse moyenne (appelée **vitesse de dérive**) devient $\mathbf{v}_d = \mathbf{F}\tau_m/m^*$.

Supposons qu’on applique un champ électrique uniforme et indépendant du temps \mathbf{E} . La vitesse de dérive est dans ce cas

$$\mathbf{v}_d = -\frac{e}{m^*} \mathbf{E} \tau_m. \quad (3.2)$$

On peut réécrire cette vitesse comme

$$\mathbf{v}_d = -\mu \mathbf{E}, \quad (3.3)$$

où $\mu = e\tau_m/m^*$ est la **mobilité** du système. Malheureusement, on utilise la même lettre grecque pour la mobilité et pour le potentiel chimique. Pourtant, le contexte permettra discerner à quoi nous faisons référence à chaque fois.⁸

Le courant électrique est directement relié à la vitesse de dérive,

$$\mathbf{j} = -en_e \mathbf{v}_d = en\mu \mathbf{E} = \frac{ne^2 \tau_m}{m^*} \mathbf{E}, \quad (3.4)$$

où n_e est la densité d’électrons par unité de volume. On peut également écrire

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad (3.5)$$

où

$$\sigma = en_e \mu = \frac{n_e e^2 \tau_m}{m^*} \quad (3.6)$$

reçoit le nom de la **conductivité de Drude**.

Il est intéressant de considérer le cas d’un gaz d’électrons bidimensionnel. Dans ce cas, $n_e = k_F^2/(2\pi)$ (comptant le spin) et donc

$$\sigma = \frac{e^2}{m^*} \frac{k_F^2}{2\pi} \tau_m = \frac{e^2}{h} k_F L_m, \quad (3.7)$$

8. En plus, dans ce cours nous serons intéressés au potentiel chimique à $T \rightarrow 0$, qui reçoit le nom ϵ_F .

où $L_m = v_F \tau_m$. Le facteur e^2/h a des unités de conductance (en 2D, et seulement en 2D, la conductivité équivaut à la conductance). Il s'appelle le **quantum de conductance** pour des raisons qui deviendront claires au chapitre 2. Dans un métal, $k_F L_m \gg 1$ est donc $\sigma \gg e^2/h$.

Remarque : Conductivité vs. conductance

Dans une expérience, on mesure la conductance G plutôt que la conductivité σ . La conductivité relie la densité de courant au champ électrique : $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$. La conductance relie le courant total à la différence du potentiel : $I = GV$. Pour un conducteur homogène de grande taille de dimensions $L \times L \times W$, $G = (W/L)\sigma$. Cette relation n'est plus valide lorsque les dimensions du système deviennent petites (voir le revue de Beenakker, page 10). Par exemple, ce n'est pas vrai que $G \propto W$ lorsque $W < \lambda_F$, ou que $G \propto L$ lorsque $L < L_m$. On va discuter la conductance des dispositifs mésoscopiques dans le prochain chapitre.)

3.2 Conductivité de Drude à partir de l'équation de Boltzmann

Redérivons la formule de Drude à l'aide d'un modèle plus sophistiqué. La densité de courant dans un cristal *homogène* en trois dimensions peut s'écrire sous la forme

$$\mathbf{j} = -e \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}n} \mathbf{v}_{\mathbf{k}n} g_{\mathbf{k}n}, \quad (3.8)$$

où V est le volume du système, e est la charge de l'électron, n est l'indice des bandes, $\mathbf{v}_{\mathbf{k}n} = \langle \psi_{\mathbf{k}n} | \mathbf{v} | \psi_{\mathbf{k}n} \rangle$ est la valeur moyenne de l'opérateur vitesse \mathbf{v} dans l'état (\mathbf{k}, n) , et $g_{\mathbf{k}n}$ est l'occupation du même état. En équilibre, $v_{\mathbf{k}n} = \partial E_{\mathbf{k}n} / \partial (\hbar \mathbf{k})$ est une fonction impaire de \mathbf{k} . Au même temps, $g_{\mathbf{k}n}$ est égale à la distribution de Fermi $f_{\mathbf{k}n}$, laquelle constitue une fonction paire de \mathbf{k} . Par conséquent, $\mathbf{j} = 0$. En présence d'un champ électrique \mathbf{E} , la densité de courant devient non-nulle à cause de deux effets : (i) le champ change des états propres, (ii) le champ change la fonction de distribution. Ici, nous nous limiterons à l'effet (ii) ; l'effet (i) deviendra important pour la conductivité Hall que nous étudierons plus tard dans le cours.

Nous pouvons calculer la fonction de distribution dans un champ électrique à partir de l'équation de Boltzmann :

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}n} \cdot \frac{\partial g_{\mathbf{k}n}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial g_{\mathbf{k}n}}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial g_{\mathbf{k}n}}{\partial t} = \frac{\partial g_{\mathbf{k}n}}{\partial t} \Big|_{\text{diffusion}}, \quad (3.9)$$

où $\mathbf{F} = \hbar \partial \mathbf{k} / \partial t = -e \mathbf{E}$ est la force électrique et

$$\frac{\partial g_{\mathbf{k}n}}{\partial t} \Big|_{\text{diffusion}} = -\frac{g_{\mathbf{k}n} - f_{\mathbf{k}n}}{\tau_m} \quad (3.10)$$

est le terme des collision (dans l'approximation du temps de relaxation). En régime stationnaire ($\partial g / \partial t = 0$) et pour une densité d'électrons uniforme ($\partial g / \partial \mathbf{r} = 0$), l'Eq. (3.9) devient

$$-\frac{e \mathbf{E}}{\hbar} \cdot \frac{\partial g_{\mathbf{k}n}}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{g_{\mathbf{k}n} - f_{\mathbf{k}n}}{\tau_m}. \quad (3.11)$$

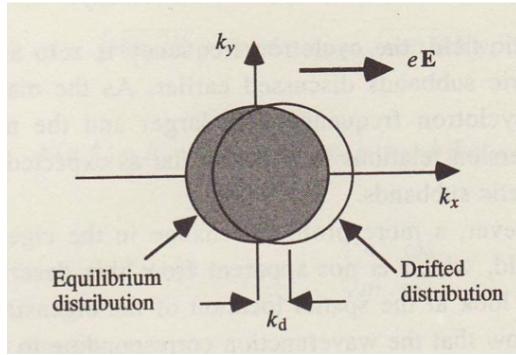


FIGURE 7 – Des états électroniques occupés en absence et en présence d'un champ électrique (cas d'une seule bande). Les fonctions de distribution correspondantes sont $f_{\mathbf{k}}$ et $f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_d}$. L'effet du champ \mathbf{E} est simplement de transférer des état occupés de $\sim -k_F$ à $\sim +k_F$, tel qu'illustré dans la Fig. 7.

Pour un champ électrique faible, on peut effectuer une approximation au premier ordre en \mathbf{E} , i.e. $\mathbf{E} \cdot \partial g / \partial \mathbf{k} \simeq \mathbf{E} \cdot \partial f / \partial \mathbf{k}$. Il s'en suit

$$g_{\mathbf{k}n} \simeq f_{\mathbf{k}n} - \mathbf{k}_d \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}n}}{\partial \mathbf{k}}, \quad (3.12)$$

où nous avons défini le vecteur d'onde de dérive

$$\mathbf{k}_d \equiv -\frac{e\mathbf{E}\tau_m}{\hbar}. \quad (3.13)$$

À basse température, la fonction $\partial f / \partial \mathbf{k}$ est piquée au niveau de Fermi.⁹ Donc, $g \simeq f$ pour des états au coeur de la mer de Fermi ($k \ll k_F$) : ces états sont toujours occupés. En d'autres mots, la différence entre g et f ne devient notable qu'en proximité du niveau de Fermi. De plus, étant donné que $k_d \ll k_F$ pour un champ électrique faible, nous pouvons réécrire l'Éq. (3.12) comme

$$g_{\mathbf{k}n} \simeq f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_d,n}. \quad (3.15)$$

9. En effet,

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}, \quad (3.14)$$

et on sait bien que $\partial f / \partial E_{\mathbf{k}} \simeq -\delta(E - \epsilon_F)$ à basse température.

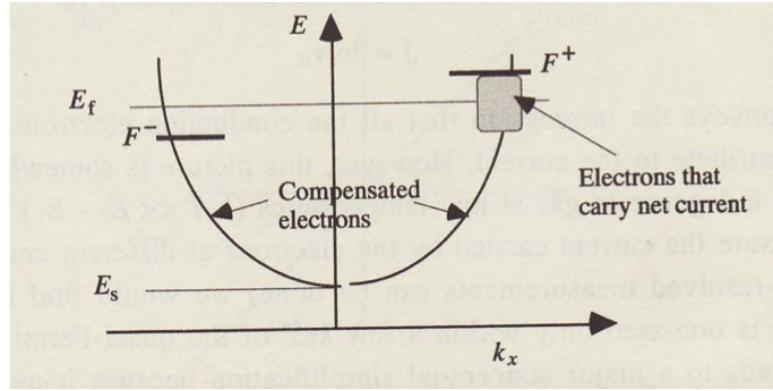


FIGURE 8 – Des quasi-énergies de Fermi, F_{\pm} . L'énergie de Fermi en équilibre est noté comme E_f . L'intervalle d'énergie entre F_+ et F_- , nommé la **fenêtre de transport**, contient les états électroniques qui sont responsables pour le courant net.

Remarque :

Une autre façon d'interpréter le résultatat $g_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_d}$ est à partir des **quasi-énergies de Fermi** F_{\pm} (cf. Fig. 8) :

$$\begin{aligned} F_+ &= \text{quasi-énergie de Fermi pour les électrons se déplaçant dans la même direction que } e\mathbf{E}. \\ F_- &= \text{quasi-énergie de Fermi pour les électrons se déplaçant en sens opposé à } e\mathbf{E}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Supposons, sans perte de généralité, que $\mathbf{E} \parallel \hat{\mathbf{x}}$. Tous les états ($\pm k_x$) sous F_- sont occupés (donc pas de courant). Entre F_+ et F_- , seul les états $+k_x$ sont occupés. Nous pouvons estimer F_{\pm} comme

$$F_{\pm} = \frac{\hbar^2(k_F \pm k_d)^2}{2m^*} \underset{k_F \gg k_d}{\approx} \epsilon_F \pm \frac{\hbar^2 k_F k_d}{m^*} = \epsilon_F \pm eEL_m \quad (3.17)$$

Donc, $F_+ - F_- \simeq 2eEL_m$ est approximativement l'énergie gagnée par un électron dans le champ \mathbf{E} sur une longueur L_m . L'intervalle d'énergie entre F_+ et F_- , nommé la **fenêtre de transport**, contient les états électroniques qui sont responsables pour le courant net.

Par la suite, la densité de courant devient

$$\begin{aligned} j_{\alpha} &= -\frac{e}{V} \sum_{\mathbf{k}n} v_{\mathbf{k}n}^{\alpha} f_{\mathbf{k}n} - \frac{e}{V} \sum_{\mathbf{k}n} v_{\mathbf{k}n}^{\alpha} \mathbf{k}_d \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}n}}{\partial \mathbf{k}} \\ &= -\frac{e}{V} \sum_{\beta} k_d^{\beta} \sum_{\mathbf{k}n} v_{\mathbf{k}n}^{\alpha} \frac{\partial E_{\mathbf{k}n}}{\partial k_{\beta}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}n}}{\partial E_{\mathbf{k}n}} \\ &\simeq \frac{e}{V} \tau_m \sum_{\beta} E^{\beta} \sum_{\mathbf{k}n} \delta(\epsilon - \epsilon_F) v_{\mathbf{k}n}^{\alpha} v_{\mathbf{k}n}^{\beta}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

où $\alpha, \beta = x, y, z$. En d'autres mots,

$$j^{\alpha} = \sigma_{\alpha\beta} E^{\beta}, \quad (3.19)$$

avec le **tenseur conductivité**

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \tau_m \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}n} v_{\mathbf{k}n}^\alpha v_{\mathbf{k}n}^\beta \delta(\epsilon - \epsilon_F). \quad (3.20)$$

Maintenant, nous pouvons séparer la somme sur \mathbf{k} dans une partie angulaire et une partie correspondant à la grandeur k . Si l'on suppose que les bandes d'énergie ont une symétrie sphérique, avec $\mathbf{v}_{\mathbf{k}n} = v_{kn} \hat{\mathbf{k}}$, l'intégrale angulaire implique $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma \delta_{\alpha\beta}$, où

$$\sigma = e^2 \sum_n \frac{v_{Fn}^2}{3} \rho_n(\epsilon_F) \tau_m. \quad (3.21)$$

Ici, $v_{Fn} \equiv v_{k_F,n}$ est la grandeur de la vitesse à l'intersection entre la bande n et le niveau de Fermi, tandis que $\rho_n(\epsilon_F) = (1/V) \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_{\mathbf{k}n} - \epsilon_F)$ est la densité d'états **partielle** (pour la bande n) au niveau de Fermi. Lorsqu'il y a une seule bande au niveau de Fermi (ou, alternativement, si la vitesse de Fermi est la même pour toutes les bandes), l'Éq. (3.21) devient

$$\sigma = e^2 \frac{v_F^2}{3} \tau_m \rho(\epsilon_F) = \frac{n_e e^2 \tau_m}{m^*}, \quad (3.22)$$

où n_e est la densité du gaz électronique. Ce résultat constitue la célèbre **formule de Drude**. La dépendance en température de la conductivité est contenue dans celle de τ_m (la densité est indépendante de T pour un gaz dégénéré, $k_B T \ll \epsilon_F$). La formule de Drude est *semiclassique* : la distribution (quantique) de Fermi-Dirac est prise en considération, mais la dynamique des électrons au niveau de Fermi est supposée d'être classique (l'équation de Boltzmann est une description où l'on spécifie la position et la quantité de mouvement au même temps). Plus tard dans le cours on discutera des corrections à la formule de Drude dont l'origine est l'interférence quantique.

On peut réécrire l'Éq. (3.22) comme

$$\sigma = e^2 D \rho(\epsilon_F), \quad (3.23)$$

où $D = v_F^2 \tau_m / 3$ est le **coefficent de diffusion** en trois dimensions. L'équation (3.23) est connue comme la **relation d'Einstein**.

Exercice 13

Calculez la conductivité de Drude pour un gaz d'électrons bidimensionnel.

À première vue, l'apparence de la densité n_e dans l'Éq. (3.22) peut donner l'impression que tous les électrons sont importants pour le transport du courant électrique. En effet, si l'on écrit la formule de Drude (Éq. (3.22)) comme

$$\mathbf{j} = -en_e \mathbf{v}_d, \quad (3.24)$$

où $\mathbf{v}_d = \hbar \mathbf{k}_d / m^*$ est la vitesse de dérive, il semble que le courant est transporté par tous les électrons, chacun avec une vitesse v_d . Toutefois, on sait à partir de notre analyse précédente que

le courant n'est dû qu'aux électrons près du niveau de Fermi (i.e. les électrons dans la fenêtre de transport). La façon de reconcilier ce fait avec l'Éq. (3.24) est d'écrire cette dernière comme

$$j = e \left(n_e \frac{v_d}{v_F} \right) v_F, \quad (3.25)$$

ce qui permet la reinterprétation suivante : le courant est créé par une petite fraction v_d/v_F d'électrons se déplaçant à la vitesse de Fermi ($v_F \gg v_d$).

Exercice 14

Estimez la vitesse de dérive dans un gaz d'électrons, où $\tau_m \simeq 10^{-14}$ s, pour des champ électriques "raisonnables". Comparez avec la vitesse de Fermi typique.

3.3 Relation d'Einstein

Il est illustratif de redériver la relation d'Einstein (Éq. (3.23)) d'une autre façons. On commence par écrire le courant électrique total comme un courant de diffusion plus le courant de dérive :

$$\mathbf{j} = -eD\boldsymbol{\nabla}n_e + \sigma\mathbf{E}, \quad (3.26)$$

où D est le coefficient de diffusion et σ est la conductivité. Il est important de noter que tant D que σ sont des propriétés intrinsèques d'un système en *équilibre*. Par conséquent, on peut trouver un lien entre D et σ en rappelant le fait que le courant doit s'annuler en équilibre :

$$eD\boldsymbol{\nabla}n_e = \sigma\mathbf{E} \text{ (en équilibre).} \quad (3.27)$$

De plus, en équilibre termodynamique le **potentiel électrochimique** (la somme du potentiel chimique et le potentiel électrostatique) doit être uniforme. Autrement dit, son gradient doit être nul, ce qui implique

$$0 = -e\mathbf{E} + \boldsymbol{\nabla}\epsilon_F \text{ (en équilibre),} \quad (3.28)$$

où on a considéré que le potentiel chimique est donné par l'énergie de Fermi (approximation de basse température). La raison pour laquelle l'énergie de Fermi dépend de l'espace est que la densité du système n'est pas homogène. Alors on écrit

$$\boldsymbol{\nabla}\epsilon_F = \frac{\partial\epsilon_F}{\partial n_e} \boldsymbol{\nabla}n_e = \frac{1}{\rho(\epsilon_F)} \boldsymbol{\nabla}n_e. \quad (3.29)$$

Ainsi, l'Éq. (3.28) donne $e\mathbf{E} = [\boldsymbol{\nabla}n_e]/\rho(\epsilon_F)$. Combinant ceci avec l'Éq. (3.27), nous arrivons à la relation d'Einstein :

$$\sigma = e^2 \rho(\epsilon_F) D. \quad (3.30)$$

Remarquez le facteur $\rho(\epsilon_F)$ dans l'Éq. (3.30) : il nous informe qu'un cristal est isolant s'il n'a pas d'états électroniques au niveau de Fermi.

3.4 Le coefficient de diffusion

On a déjà rencontré le coefficient de diffusion quelques fois dans ce chapitre. Ici, on veut compléter cette analyse en nous concentrant dans un calcul direct du coefficient. Le **tenseur de diffusion** en trois dimensions peut être défini à partir de la correlation vitesse-vitesse :

$$D_{ij} = \int_0^\infty \langle v_i(t)v_j(0) \rangle dt, \quad (3.31)$$

où $i, j = x, y, z$ et v_i est la i -ième composante de la vitesse d'un électron. On va justifier l'Éq. (3.31) tantôt.

En l'absence des forces externes, l'équation de mouvement pour la vitesse est

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\mathbf{v}}{\tau_m} = 0, \quad (3.32)$$

où le deuxième terme est la force de friction due aux collisions. La solution de l'Éq. (3.32) est $\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0) \exp(-t/\tau_m)$. Avec l'aide de ce résultat, on écrit

$$\langle v_i(t)v_j(0) \rangle = e^{-t/\tau_m} \langle v_i(0)v_j(0) \rangle, \quad (3.33)$$

ce qui nous amène à

$$D_{ij} = \langle v_i(0)v_j(0) \rangle \tau_m. \quad (3.34)$$

Pour calculer la fonction de corrélation à temps égal, on tient en compte que les électrons qui contribuent au transport se déplacent tous avec la vitesse de Fermi, mais en direction aléatoire. Ainsi, un moyennage angulaire au niveau de Fermi nous donne

$$\langle v_i(0)v_j(0) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int v_i(0)v_j(0) \sin \theta d\theta d\phi = \begin{cases} v_F^2/3 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (3.35)$$

Donc, le tenseur de diffusion devient

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D & 0 & 0 \\ 0 & D & 0 \\ 0 & 0 & D \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

où la constante de diffusion $D = v_F^2 \tau_m / 3$ coïncide avec celle de l'Éq. (3.23).

Exercice 15

Montrez que la constante de diffusion pour un gaz d'électrons bidimensionnel est donné par $D = v_F^2 \tau_m / 2$.

Pour finaliser cette section, nous allons justifier l'Éq. (3.31). Nous allons commencer avec l'expression pour le courant de diffusion,

$$\mathbf{j} = -D \nabla n_e. \quad (3.37)$$

En appliquant l'équation de continuité, $\partial n_e / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$, nous arrivons à l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = D \nabla^2 n_e. \quad (3.38)$$

Multiplions les deux côtés de l'équation de diffusion avec r^2 et intégrons sur tout l'espace (d -dimensionnel) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\text{tout l'espace}} d^d r r^2 n_e(\mathbf{r}, t) = D \int_{\text{tout l'espace}} d^d r r^2 \nabla^2 n_e(\mathbf{r}, t). \quad (3.39)$$

En intégrant par parties et en négligeant les termes de surface (i.e. supposant que n_e et ∇n_e tendent vers zéro plus rapidement que $1/r^2$ lorsque $r \rightarrow \infty$),

$$\int_{\text{tout l'espace}} d^d r r^2 \nabla^2 n_e(\mathbf{r}, t) = 2dN, \quad (3.40)$$

où $N = \int_{\text{tout l'espace}} d^d r n_e(\mathbf{r}, t)$ est le nombre total de particules dans le système. Étant donné que N est une constante, on peut réécrire l'Éq. (3.39) comme

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\int_{\text{tout l'espace}} d^d r r^2 n_e(\mathbf{r}, t)}{\int_{\text{tout l'espace}} d^d r n_e(\mathbf{r}, t)} = 2dD, \quad (3.41)$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle r^2(t) \rangle = 2dD. \quad (3.42)$$

Par conséquent,

$$D = \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle r^2(t) \rangle}{t}. \quad (3.43)$$

Maintenant, on va relier $\langle r^2(t) \rangle$ à l'autocorrelation de la vitesse. Premièrement, nous écrivons

$$\langle r^2(t) \rangle = \left\langle \left(\int_0^t dt' \mathbf{v}(t') \right)^2 \right\rangle = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle. \quad (3.44)$$

En équilibre, la corrélation des vitesses a la symétrie par translation du temps,

$$\langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle = \langle \mathbf{v}(t' - t'') \cdot \mathbf{v}(0) \rangle. \quad (3.45)$$

D'ici, on arrive à

$$\int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle = 2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle = 2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle \mathbf{v}(t'') \cdot \mathbf{v}(0) \rangle \quad (3.46)$$

Exercice 16

Démontrez les deux égalités de l'Éq. (3.46). Pour démontrer la première égalité, notez que $\langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle = \langle \mathbf{v}(t' - t) \cdot \mathbf{v}(t'' - t) \rangle$ et que $\langle \mathbf{v}(-t') \cdot \mathbf{v}(-t'') \rangle = \langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle$ (voyez-vous pourquoi?).

Maintenant, en appliquant la règle de Leibniz,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} \langle r(t)^2 \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} 2 \int_0^t dt'' \langle \mathbf{v}(t'') \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = 2 \int_0^\infty dt'' \langle \mathbf{v}(t'') \cdot \mathbf{v}(0) \rangle \quad (3.47)$$

Ainsi, nous obtenons

$$D = \frac{1}{d} \int_0^\infty dt \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle. \quad (3.48)$$

Cette formule est un exemple de **formule de Green-Kubo**, et établit le lien entre le coefficient de diffusion et l'autocorrelation des vitesses. En d dimensions, et avec une symétrie “sphérique”, $\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = d \langle v_x(t) v_x(0) \rangle$.

3.5 Magnétoconductance

Un des systèmes mésoscopiques le plus important consiste en un gaz d'électrons bidimensionnel sous un champ magnétique perpendiculaire. Ici, nous allons examiner sa conductance semiclassique en utilisant le coefficient de diffusion et la relation d'Einstein.

La force magnétique qui agit sur un électron est perpendiculaire à la vitesse de ce dernier. L'équation de mouvement classique est

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{m^*} \mathbf{v} \times \mathbf{B} - \frac{\mathbf{v}}{\tau_m}, \quad (3.49)$$

où \mathbf{B} est le champ magnétique. Supposons que le plan du gaz est xy , et que $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$. Alors,

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \omega_c \mathbf{v} \times \hat{\mathbf{z}} - \frac{\mathbf{v}}{\tau_m}. \quad (3.50)$$

Cette équation décrit la *précession amortie* de \mathbf{v} autour de \mathbf{B} . En forme matricielle, on a

$$\begin{pmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\tau_m & \omega_c \\ -\omega_c & -1/\tau_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

On peut diagonaliser la matrice dans la partie droite de cette équation en définissant $v_\pm(t) = v_x(t) \pm i v_y(t)$ (notez que ces sont des “vecteurs propres” de la matrice de Pauli σ_y). Ainsi, on arrive à

$$\dot{v}_\pm(t) = (-1/\tau_m \mp i\omega_c)v_\pm(t), \quad (3.52)$$

dont la solution est $v_\pm(t) = v_\pm(0) \exp[(-1/\tau_m \mp i\omega_c)t]$. En revenant aux variables d'intérêt $v_x = (v_+ + v_-)/2$ et $v_y = (v_+ - v_-)/(2i)$, on trouve

$$\begin{aligned} v_x(t) &= [v_x(0) \cos(\omega_c t) + v_y(0) \sin(\omega_c t)] e^{-t/\tau_m} \\ v_y(t) &= [v_y(0) \cos(\omega_c t) - v_x(0) \sin(\omega_c t)] e^{-t/\tau_m} \end{aligned} \quad (3.53)$$

Par conséquent,

$$D_{xx} = \int_0^\infty dt \langle v_x(t) v_x(0) \rangle = \int_0^\infty dt \langle v_x(0) v_x(0) \rangle e^{-t/\tau_m} \cos(\omega_c t) = D \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2}, \quad (3.54)$$

où on a utilisé $\langle v_x(0)v_y(0) \rangle = 0$ et $\langle v_x(0)^2 \rangle = v_F^2/2$ (rappelez-vous que $\langle \rangle$ constitue un moyen angulaire sur la surface de Fermi, qui est circulaire pour un gaz d'électrons bidimensionnel). En plus, on a défini $D = v_F^2\tau_m/2$ comme le coefficient de diffusion pour le cas sans champ magnétique. Nous pouvons calculer D_{yy} , D_{xy} et D_{yx} de la même façon. Le résultat est

$$\mathbf{D} = \frac{D}{1 + (\omega_c\tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau_m \\ \omega_c\tau_m & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.55)$$

En présence du champ magnétique, le tenseur de diffusion n'est plus diagonal.

Exercice 17

Prouvez l'Éq. (3.55).

Maintenant, la relation d'Einstein donne l'expression suivante pour le tenseur de conductivité :

$$\boldsymbol{\sigma} = e^2\rho(\epsilon_F)\mathbf{D} = \frac{\sigma}{1 + (\omega_c\tau_m)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau_m \\ \omega_c\tau_m & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

où σ est la conductivité de Drude en absence de champ magnétique. Observons que la conductivité longitudinale diminue lorsqu'on applique un champ magnétique, et que l'effet du champ commence à devenir important lorsque $\omega_c\tau_m \gtrsim 1$. Comme on verra plus tard dans le cours, ces résultats classiques sont modifiés en présence de l'interférence quantique.

À partir de la conductivité, nous pouvons extraire la résistivité

$$\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\sigma}^{-1} = \rho \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau_m \\ -\omega_c\tau_m & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

où $\rho = \sigma^{-1}$ est la résistivité à champ nul. L'élément hors-diagonal $\rho_{xy} \equiv R_H$ est la **résistance de Hall** classique

$$R_H = \frac{B}{n_e e} = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{e^2} \frac{\hbar\omega_c}{\epsilon_F}, \quad (3.58)$$

où on a négligé le splitting Zeeman (le facteur 1/2 vient de la dégénérescence de spin). L'élément diagonal ρ_{xx} s'appelle la résistivité longitudinale. Curieusement, dans l'approximation classique ρ_{xx} est indépendante du champ magnétique. Ce résultat contre-intuitif s'origine du fait que le voltage Hall annule la force de Lorentz moyenne agissant sur les électrons.

Dans l'Éq. (3.56), nous avons utilisé la densité d'états à champ nul. En plus, nous avons supposé partout que τ_m est indépendant du champ. Ces deux approximations sont justifiées à faible champ, lorsque $\epsilon_F \gg \hbar\omega_c$. Au fur et à mesure qu'on augmente le champ, des corrections aux résultats précédents deviennent significatives. Ces déviations prennent la forme des oscillations dans la magnétorésistance (**l'effet Shubnikov - de Haas**) et des plateaux dans la résistance de Hall (**l'effet Hall quantique**). L'origine de ces deux phénomènes est la formation des niveaux de Landau, qui donne lieu à une densité d'états dépendante du champ magnétique (cf. Éq. (2.31)). L'effet principal se trouve dans le taux de diffusion τ_m^{-1} , qui est proportionnel à $\rho(\epsilon_F)$ (on peut montrer cela à partir de la règle d'or de Fermi, que nous étudierons plus tard

dans ce chapitre). Des oscillations dans la densité d'états produites par la quantification des niveaux de Landau sont ainsi visibles dans la magnétorésistance. Puisque $\rho_{xx} \propto \tau_m^{-1} \propto \rho(\epsilon_F)$, la résistivité devient minimale lorsque le niveau de Fermi se trouve entre deux niveaux de Landau. Cette situation arrive lorsque le facteur de remplissage de Landau, $\nu \equiv (n_e/2)h/(eB)$ devient un nombre entier.

Exercice 18

Considérez un gaz d'électrons bidimensionnel sous un champ magnétique perpendiculaire. Montrez que le nombre des niveaux de Landau remplis est égal à la partie entière de $\nu = (n_e/2)h/(eB)$, où n_e est la densité électronique.

Les oscillation de Shubnikov - de Haas résultantes sont périodiques en $1/B$, avec la séparation entre deux pics voisins donnée par

$$\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{e}{h} \frac{2}{n_e}. \quad (3.59)$$

Cette briève explication de l'effet Shubnikov-de Haas est sur simplifiée, mais essentiellement correcte. Par contre, l'effet Hall quantique est un effet plus subtil, intimement relié à la quantification de la résistance dans un point de contact quantique balistique. Nous allons étudier cela au prochain chapitre.

4 Gaz d'électrons bidimensionnel

La plupart des expériences sur les semiconducteurs en physique mésoscopique sont réalisées sur des hétérostructures de GaAs-AlGaAs, illustrées à la Fig. 9a).¹⁰ 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 bandes de ces matériaux. La Fig. 9b) 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 (dopé aux électrons) et le GaAs de type p (dopé aux trous). 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 valence.

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. 9c, en raison de la courbure des bandes la densité d'électrons augmente rapidement près de l'interface et l'énergie de Fermi se trouve

10. Les MOSFETs (metal-oxide-semiconductor field effect transistors) de Si constituent également une plate-forme importante pour la recherche des phénomènes mésoscopiques. De plus, il y a des nombreux travaux dans le domaine de la physique mésoscopique impliquant des nanotubes de carbone, du graphène, ainsi que des "puits quantiques" (*quantum wells*) créés dans les hétérostructures de AlSb-InAs-AlSb et de Si-Si_{1-x}Ge_x-Si.

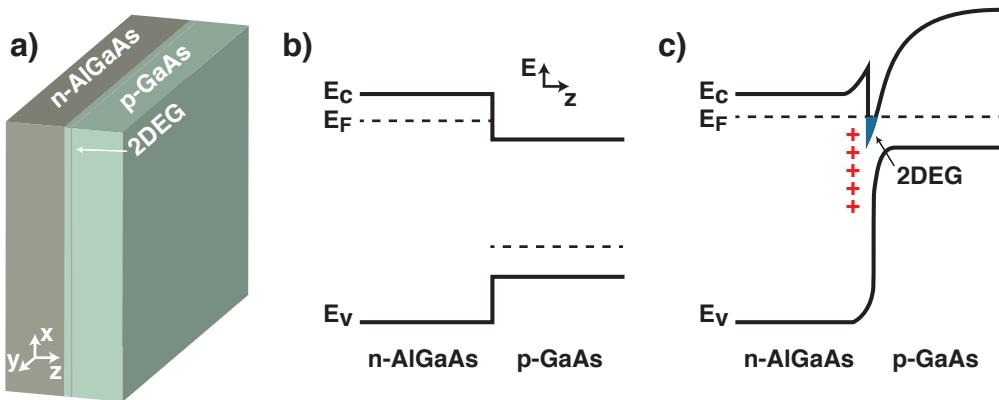


FIGURE 9 – a) Un 2DEG est formé près de l’interface entre une couche de AlGaAs et une couche de GaAs. b) Diagramme de bandes avant contact entre les couches. c) Diagramme de bandes après équilibrage.

dans la bande de conduction dans une mince région de l'espace. Il se forme alors une couche essentiellement unidimensionnelle d'électrons, le 2DEG.

4.1 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, un long 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 .

Comme l'on a vu plus haut, la mobilité est définie comme le ratio entre la vitesse de dérive et le champ électrique :

$$\mu \equiv \left| \frac{\mathbf{v}_d}{\mathbf{E}} \right| = \frac{e\tau_m}{m^*}. \quad (4.1)$$

Tel qu'illustré à la Fig. 10, dans les semiconducteurs, 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. 10, les hétérostructures de AlGaAs/GaAs utilisées pour les expériences de physique mésoscopique ont toutefois des mobilités beaucoup plus grandes.¹¹ Ceci est rendu possible par l'utilisation de l'épitaxie par jet moléculaire (MBE, pour *Molecular Beam Epitaxy*), une technique qui permet de créer couche atomique par couche atomique des semiconducteurs 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

11. Concernant la mobilité, il y a deux avantages des hétérostructures de AlGaAs/GaAs par rapport aux MOSFETs de Si. Premièrement, l'interface AlGaAs/GaAs est de meilleure qualité que l'interface Si/SiO₂, car les constantes de réseau de GaAs et AlGaAs sont presque identiques. Deuxièmement, la masse effective de GaAs ($m^* \simeq 0.067m_0$) est plus petite que celle de Si ($m^* = 0.19m_0$).

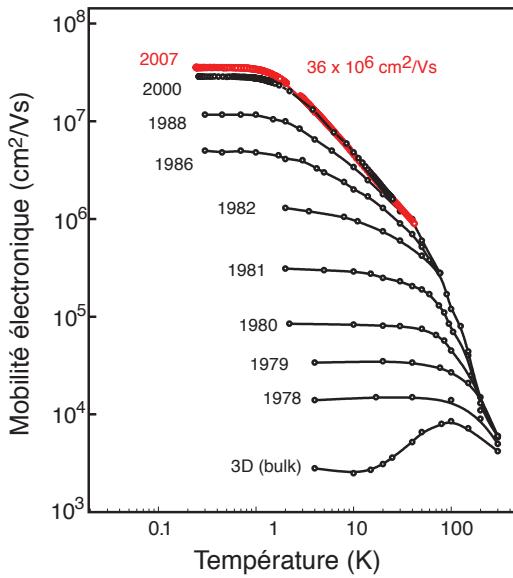


FIGURE 10 – Mobilité d'un 2DEG dans le GaAs obtenu par croissance MBE en fonction de la température et pour différentes années. Figure adaptée de Darrell G. Schlom et Loren N. Pfeiffer, Nat. Mater. **9**, 881 (2010).

de la Fig. 9a, ces hétérostructures sont fabriquées à l'aide de plusieurs couches de semiconducteurs 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 $2 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ sont obtenues commercialement. Quelques groupes se spécialisant en croissance par MBE sont capables d'atteindre des mobilités de l'ordre de $10^7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Pour ces échantillons, le libre parcours moyen L_m peut être aussi grand que $\sim 100 \mu\text{m}$. 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 modernes 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.

4.2 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 découpée en z et $\mathbf{r} = (x, y)$, en d'autres mots $\Psi(\mathbf{r}, z) = \chi(z)\psi(\mathbf{r})$. On supposera aussi 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 $m^* = \hbar^2(d^2E/dk^2)^{-1}$.

Les électrons ne sont pas confinés dans le plan xy et $\psi(\mathbf{r})$ correspondnt donc à une onde plane.¹² Telle qu'illustrée à la Fig. 11, une bonne approximation pour le potentiel de confinement

12. Le lecteur pourrait se demander la question suivante : comment arrive-t-on aux ondes planes malgré le potentiel périodique du cristal ? Sauf pour le remplacement $m_0 \rightarrow m^*$, les effets du potentiel périodique semblent en effet absents. La réponse est la suivante : la fonction d'onde Ψ définit dans le texte n'est qu'une partie de la fonction d'onde totale : elle est la partie qui varie lentement à l'échelle atomique (une “fonction enveloppe”). On

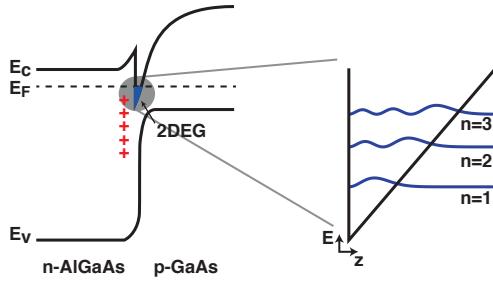


FIGURE 11 – Approximation triangulaire au potentiel de confinement du 2DEG et module carré des trois premières fonctions d'onde.

est un potentiel triangulaire selon l'axe z . On a donc comme potentiel

$$U(z) = \begin{cases} \beta z & z > 0 \\ \infty & z \leq 0, \end{cases} \quad (4.2)$$

où β est caractéristique de la pente du potentiel. L'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien dans la direction z s'écrit donc

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

avec $\zeta = (z - E/\beta)/l_\beta^3$ où $l_\beta = (2m^*\beta/\hbar^2)^{-1/3}$ 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 $Ai(l_\beta^2 \zeta)$. De même, puisque la fonction d'onde s'annule nécessairement en $z = 0$, on a que $Ai(l_\beta^2 \zeta|_{z=0}) = 0$. 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. 11.

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

$$\epsilon_{kn} = -E_0 \zeta_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (4.3)$$

avec $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Chacun des niveaux n correspond donc à une sous-bande, ayant une dépendance en k . Si la température est basse et la densité électronique faible, seule la première sous-bande $n = 1$ est 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_{kn} ne comporte pas toutes les contributions importantes à l'énergie. En effet, au potentiel $U(z)$ de l'Eq. (4.3), 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

peut comprendre plusieurs propriétés physiques du cristaux à partir d'une fonction enveloppe. Cette approche (d'écrire une équation de Schrödinger effective pour la fonction enveloppe) reçoit le nom **d'approximation de la fonction enveloppe**.

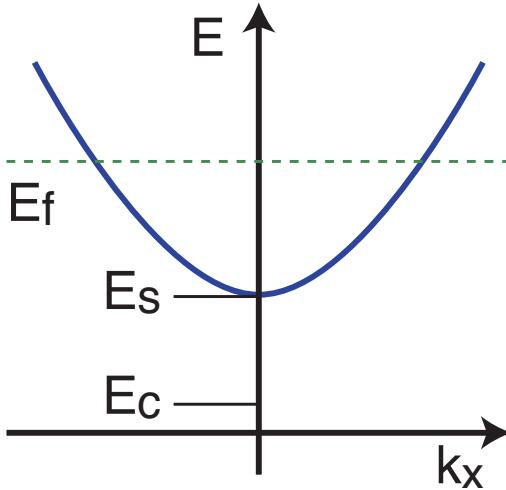


FIGURE 12 – Diagramme d'énergie de la première sous-bande.

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 plus tard dans le cours. 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 à la Fig. 12. La sous-bande est remplie jusqu'au niveau 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.

4.3 Densité électronique et distribution de Fermi

La densité d'états $\rho(\epsilon)$ est définie comme

$$\rho(\epsilon) = 2 \sum_{n,k_x,k_y} \delta(\epsilon - E_{kn}) \quad (4.4)$$

avec E_{kn} donnée à l'Éq. (4.3). Avec cette définition, la quantité $\rho(\epsilon)d\epsilon$ correspond au nombre d'états dans l'intervalle d'énergie $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$. 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 obtenir¹³

$$\begin{aligned}\rho(\epsilon) &= 2 \sum_n \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y \delta \left(\epsilon - E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) \\ &= 2 \sum_n \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dk k \delta \left(\epsilon - E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) \\ &= \sum_n \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \theta(\epsilon - E_n).\end{aligned}\tag{4.5}$$

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

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \epsilon_F)/(k_B T)} + 1}\tag{4.6}$$

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

$$n_e = \int_0^{\infty} d\epsilon N(\epsilon) f(\epsilon).\tag{4.7}$$

En principe, le potentiel chimique μ devrait prendre la place de ϵ_F dans cette dernière expression. Toutefois, à basse température $\mu \approx \epsilon_F$. 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 $f(\epsilon) \approx \theta(\epsilon_F - \epsilon)$ et la densité électronique en 2D devient

$$n_e \approx \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} d\epsilon \theta(\epsilon - E_s) \theta(\epsilon_F - \epsilon) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (\epsilon_F - E_s)\tag{4.8}$$

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 $2 \times 10^{11-12}/\text{cm}^2$. Pour un métal, on a plutôt des densités de l'ordre de $10^{19}/\text{cm}^2$.

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

5 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. 13. Des grilles sur lesquelles est appliqué un voltage négatif sont déposées sur le AlGaAs. La Fig. 13b) montre une vue de dessus du gaz électronique. Le gaz 2D d'électrons, initialement de densité constante (région grisée), peut voir

13. On utilise 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 $g(x)$.

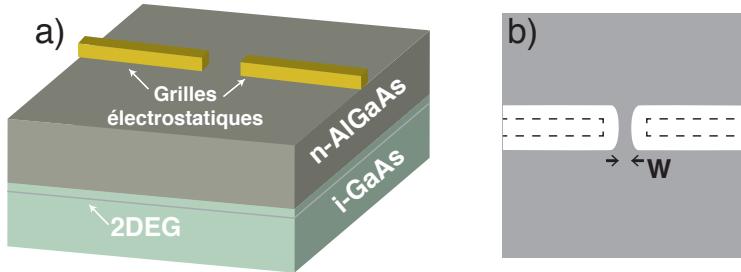


FIGURE 13 – a) Création d’une constriction à l’aide de grilles métalliques déposées en surface. Un champ électrique négatif appliqué sur les grilles repousse les électrons du 2DEG. b) Représentation schématique de la constriction dans le 2DEG. Les pointillés indiquent la position des grilles. Les zones grisées contiennent des électrons tandis que ceux-ci ont été expulsés des zones en blanc.

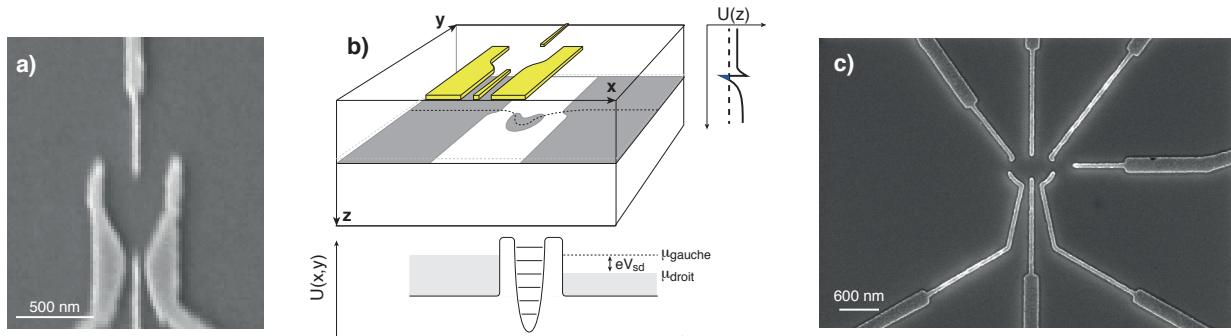


FIGURE 14 – Vue de dessus des grilles formant un point quantique simple (a) et double (c) dans un 2DEG. Les cercles illustrent approximativement les régions où les électrons sont confinés dans toutes les directions. Figures gracieusetés de Michel Pioro-Ladrière et Julien Camirand Lemyre.

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 prochain chapitre, 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 prédict par la loi d'Ohm, 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. 14. Comme on le verra aux prochains chapitres, 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.

Exercise 19

Considérez la dispersion d'énergie d'un 2DEG avec du confinement latéral,

$$E_{kn} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2 n^2}{W^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (5.1)$$

où $n = 1, 2, \dots$. Montrez que la différence d'énergie entre deux sous-bandes voisines proches du niveau de Fermi est $\Delta E \sim \epsilon_F/N$, où N est le nombre de sous-bandes occupées. Pour que la quantification des niveaux d'énergie soit observable, il faut que l'énergie thermique soit plus basse que la différence d'énergie entre deux niveaux voisins. En-dessous de quelle température faut-il refroidir un hétérostructure de GaAs/AlGaAs de $W = 100\text{nm}$ pour satisfaire à cette condition ? Également, afin de discerner la quantification des niveaux d'énergie il faut que le libre parcours moyen soit plus grand que W . Quelle mobilité du 2DEG faut-il pour que cette condition soit réalisable pour $W = 100\text{nm}$?

6 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

$$|\Psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle|E_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle|E_2\rangle, \quad (6.1)$$

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. Nous 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 prédition 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 $M_S \otimes \mathbb{1}_E$ agissant seulement sur le système, avec $\mathbb{1}$ l'opérateur identité.¹⁴ La valeur moyenne des résultats d'un ensemble de mesures de cette observable sur l'état $|\Psi\rangle$ est

$$\begin{aligned} \langle \Psi | M_S \otimes \mathbb{1}_E | \Psi \rangle &= (c_1^* \langle \psi_1 | \langle E_1 | + c_2^* \langle \psi_2 | \langle E_2 |) (M_S \otimes \mathbb{1}_E) (c_1 |\psi_1\rangle |E_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle |E_2\rangle) \\ &= |c_1|^2 \langle \psi_1 | M_S | \psi_1 \rangle + |c_2|^2 \langle \psi_2 | M_S | \psi_2 \rangle, \end{aligned} \quad (6.2)$$

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

$$\langle \Psi | M_S \otimes \mathbb{1}_E | \Psi \rangle = \text{Tr}[\rho_S M_S] \quad (6.3)$$

14. John Preskill, notes de cours, <http://www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph219/>

où l'on a défini

$$\rho_S = |c_1|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |c_2|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|, \quad (6.4)$$

la **matrice densité** du système. On peut donner une interprétation à ρ_S en remarquant que l'Éq. (6.2) 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 jeu, 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'environnement 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

$$\rho = p_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|, \quad (6.5)$$

une matrice densité de la forme Éq. (6.4) et qui tient compte de votre incertitude (classique) sur l'état qui a effectivement été préparé. Il s'agit de la bonne description du système puisque toutes les prédictions que vous pourriez faire concernant la moyenne de mesures d'une observable M sur le système prendraient la forme Éq. (6.2), 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. (6.3) 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.¹⁵

Revenons à la matrice densité et à certaines de ses 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

15. N. D. Mermin, Physics Today **65**, 8 (2012).

taille quelconque préparé dans un état arbitraire

$$|\psi_{12}\rangle = \sum_{ij} a_{ij} |i_1\rangle |j_2\rangle. \quad (6.6)$$

Comme ci-haut, la valeur moyenne d'une observable $M_1 \otimes \mathbb{1}_2$ agissant seulement sur le premier sous-système est

$$\begin{aligned} \langle M_1 \rangle &= \langle \psi_{12} | M_1 \otimes \mathbb{1}_2 | \psi_{12} \rangle \\ &= \sum_{ij} \sum_{i'j'} a_{ij}^* a_{i'j'} \langle i_1 | \langle j_2 | (M_1 \otimes \mathbb{1}_2) | i'_1 \rangle | j'_2 \rangle \\ &= \sum_{ii'j} a_{ij}^* a_{i'j} \langle i_1 | M_1 | i'_1 \rangle \\ &= \text{Tr}[\rho_1 M_1], \end{aligned} \quad (6.7)$$

où

$$\rho_1 = \text{Tr}_2[|\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}|] = \sum_j \langle j_2 | \psi_{12} \rangle \langle \psi_{12} | j_2 \rangle = \sum_{ii'j} a_{ij}^* a_{i'j} |i'_1\rangle\langle i_1| \quad (6.8)$$

est la matrice densité du premier sous-système obtenue de l'état joint $|\psi_{12}\rangle$ à l'aide d'une **trace partielle**, $\text{Tr}_2[\cdot]$, sur le second sous-système.

Les propriétés des matrices densités s'obtiennent facilement à partir de la forme générale donnée par l'Éq. (6.8). En effet, on note que ρ_1 est hermitien, $\rho_1^\dagger = \rho_1$. De même, pour tout $|\psi\rangle$ dans \mathcal{E}_1 , on note que $\langle\psi|\rho_1|\psi\rangle = \sum_j |\sum_i a_{ij} \langle\psi|i_1\rangle|^2 \geq 0$. 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 $\text{Tr}[\rho_1] = 1$. Cette dernière propriété correspond à la condition normalisation.

Puisque ρ_1 peut toujours être diagonalisée, on réécrit l'Éq. (6.8) sous sa forme diagonale, c'est-à-dire

$$\rho_1 = \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|. \quad (6.9)$$

On remarque que si une seule valeur propre p_α est non nulle, alors nécessairement $\rho_1^2 = \rho_1$ et donc $\text{Tr}[\rho_1^2] = \text{Tr}[\rho_1] = 1$. 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 $\text{Tr}[\rho_1^2] = \sum_\alpha p_\alpha^2 < 1$ 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

$$S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \log_d \rho] \geq 0 \quad (6.10)$$

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. (6.9) n'est pas unique. 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,

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{2}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle-| \\ &= \frac{1}{2}\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2}\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\frac{\langle 0| - \langle 1|}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|.\end{aligned}\tag{6.11}$$

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 chaîne 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

$$\begin{aligned}\dot{\rho} &= |\dot{\psi}\rangle\langle\psi + |\psi\rangle\langle\dot{\psi}| \\ &= -iH|\psi\rangle\langle\psi|/\hbar + i|\psi\rangle\langle\psi|H/\hbar \\ &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho],\end{aligned}\tag{6.12}$$

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 vers la fin du cours 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 décroît 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

$$\rho_{coh} = |+\rangle\langle+| = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} := \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},\tag{6.13}$$

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 corres-

pondant au mélange incohérent des deux états de base :

$$\rho_{\text{incoh}} = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

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 quantifier, 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 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$,

$$\begin{aligned} \rho_{12} &= |\psi_{12}\rangle\langle\psi_{12}| \\ &= (\alpha|00\rangle + \beta|11\rangle)(\langle 00|\alpha^* + \langle 11|\beta^*) \\ &= |\alpha|^2|00\rangle\langle 00| + \alpha\beta^*|00\rangle\langle 11| + \alpha^*\beta|11\rangle\langle 00| + |\beta|^2|11\rangle\langle 11| \\ &:= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 & 0 & \alpha\beta^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha^*\beta & 0 & 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Comme nous l'avions vu lors de la discussion entourant l'Éq. (6.4), la matrice densité réduite pour le premier qubit prend alors la forme

$$\rho_1 = \text{Tr}_2\rho_{12} = \langle 0_2|\rho_{12}|0_2\rangle + \langle 1_2|\rho_{12}|1_2\rangle = |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1| \quad (6.16)$$

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

$$\rho_1 = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| \quad (6.17)$$

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 a 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 ‘maximamente’ 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.¹⁶ Malgré que la situation soit beaucoup plus complexe dans ce cas, il existe des mesures d'enchevêtrement pour certains états mixtes.¹⁷

7 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 $\mathcal{S}(\omega)$. 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.¹⁸

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

$$G_{VV}(t, t') = \langle V(t)V(t') \rangle. \quad (7.1)$$

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,

$$\begin{aligned} G_{VV}(t, t') &= \langle V(t)V(t') \rangle \\ &= \langle V(t - \tau)V(t' - \tau) \rangle \quad (\text{invariance sous translation}) \\ &= \langle V(\tau)V(0) \rangle \\ &= \langle V(0)V(-\tau) \rangle \quad (\text{invariance sous translation}) \\ &= \langle V(-\tau)V(0) \rangle \quad (\text{variable classique, donc commutateur nul}). \end{aligned} \quad (7.2)$$

Les troisième et dernière lignes nous indiquent 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 $\hat{V}(0)$.

16. S. Popescu et D. Rohrlich, Phys. Rev. A **56**, R3319 (1997).

17. W. K. Wootters, Quant. Inf. and Comp. **1**, 27 (2001).

18. On suit ici de très près l'annexe A de A. A. Clerk, M. H. Devoret, S. M. Girvin, F. Marquardt et R. J. Schoelkopf, Rev. Mod. Phys. **82**, 1155 (2010).

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, spécifient complètement ces propriétés statistiques. On supposera aussi G_{VV} décroît 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

$$V_T[\omega] = \frac{1}{\sqrt{T}} \int_{-T/2}^{+T/2} dt e^{i\omega t} V(t), \quad (7.3)$$

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 $V_T[\omega]$ 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

$$S_{VV}[\omega] \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \langle |V_T[\omega]|^2 \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \langle V_T[\omega] V_T[-\omega] \rangle, \quad (7.4)$$

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'autocorrélation

$$S_{VV}[\omega] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G_{VV}(t). \quad (7.5)$$

La relation inverse prend la forme

$$G_{VV}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} S_{VV}[\omega]. \quad (7.6)$$

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’

$$G_{VV}(t) = \sigma^2 \delta(t), \quad (7.7)$$

le spectre est complètement indépendant de la fréquence

$$S_{VV}[\omega] = \sigma^2. \quad (7.8)$$

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

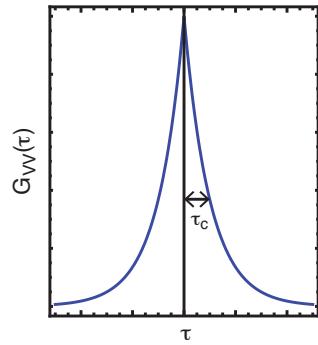


FIGURE 15 – Fonction d'autocorrélation $G_{VV}(\tau)$ symétrique et décroissant sur le temps de corrélation τ_c .

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.

$$\mathcal{S}_{VV}[\omega] = \mathcal{S}_{VV}[-\omega]. \quad (7.9)$$

On montre ceci facilement à l'aide de l'Éq. (7.6) en utilisant $G_{VV}(t) = G_{VV}(-t)$.

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

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2x^2. \quad (7.10)$$

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

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

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (7.11)$$

qui ont comme solutions

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0)\cos(\Omega t) + p(0)\frac{1}{M\Omega}\sin(\Omega t) \\ p(t) &= p(0)\cos(\Omega t) - x(0)M\Omega\sin(\Omega t), \end{aligned} \quad (7.12)$$

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

$$\begin{aligned} G_{xx}(t) &= \langle x(t)x(0) \rangle \\ &= \langle x(0)x(0) \rangle \cos(\Omega t) + \langle p(0)x(0) \rangle \frac{1}{M\Omega}\sin(\Omega t). \end{aligned} \quad (7.13)$$

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 $\frac{1}{2}M\Omega^2\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ on obtient ainsi

$$G_{xx}(t) = \frac{k_B T}{M\Omega^2} \cos(\Omega t). \quad (7.14)$$

Ce dernier résultat conduit à la densité spectrale

$$\mathcal{S}_{xx}[\omega] = \pi \frac{k_B T}{M\Omega^2} [\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega)]. \quad (7.15)$$

Comme il se doit, ce résultat est symétrique.

7.1 Théorème de Wiener-Khinchin

Des Éqs. (7.3-7.4), on a que

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{VV}[\omega] &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T dt' e^{i\omega(t-t')} \langle V(t)V(t') \rangle \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-2B(t)}^{+2B(t)} d\tau e^{i\omega\tau} \langle V(t+\tau/2)V(t-\tau/2) \rangle, \end{aligned} \quad (7.16)$$

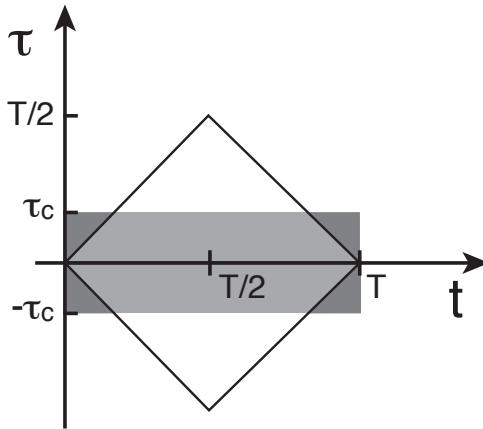


FIGURE 16 – Région d'intégration $B(t)$. *Erreur de frappe* : il faut changer $T/2 \rightarrow T$ sur l'axe verticale.

avec $\tau = t - t'$ et où

$$B(t) = \begin{cases} t & \text{si } t < T/2 \\ T - t & \text{si } t > T/2. \end{cases} \quad (7.17)$$

Exercice 20

Dérivez la deuxième ligne de l'Éq. (7.16) à partir de la première. Pour faire cela, faites d'abord un changement de variables $(t, t') \rightarrow (t_1, t_2)$, où $t_1 = (t + t')/2$ et $t_2 = t - t'$. Notez que le Jacobien de cette transformation est égal à 1, et faites attention avec les limites d'intégration pour les nouvelles variables. Par la suite, redéfinissez $t_1 \rightarrow t$ et $t_2 \rightarrow \tau$.

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. 16 et qui sont petits si le temps de corrélation τ_c est petit devant T . Utilisant l'invariance sous translation du temps, on obtient

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{VV}[\omega] &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle V(\tau)V(0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle V(\tau)V(0) \rangle, \end{aligned} \quad (7.18)$$

ce qui correspond au résultat énoncé à l'Éq. (7.5).

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

$$\begin{aligned}\langle V[\omega]V^*[\omega'] \rangle &= \iint_{-\infty}^{\infty} dt dt' e^{i\omega t} e^{-i\omega' t'} \langle V(t)V(t') \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega t} e^{-i\omega'(t-\tau)} \langle V(t)V(t-\tau) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega-\omega')t} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega'\tau} \langle V(t)V(t-\tau) \rangle.\end{aligned}\quad (7.19)$$

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

$$\langle V[\omega]V^*[\omega'] \rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega')\mathcal{S}_{VV}[\omega']. \quad (7.20)$$

Remarque :

Dans l'Éq. (7.20), $V[\omega]$ est défini comme

$$V[\omega] = \int_{-T/2}^{T/2} e^{i\omega t} V(t) dt, \quad (7.21)$$

et on considère la limite $T \rightarrow \infty$. Cette définition de $V[\omega]$ diffère de la définition de $V_T[\omega]$ (Éq. (7.3)) par un facteur \sqrt{T} .

8 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

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle. \quad (8.1)$$

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

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle. \quad (8.2)$$

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

$$\begin{aligned}
 i\hbar|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle &\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(U^{-1}|\psi'\rangle) = HU^{-1}|\psi'\rangle \\
 &\Rightarrow i\hbar\dot{U}^{-1}|\psi'\rangle + i\hbar U^{-1}|\dot{\psi}'\rangle = HU^{-1}|\psi'\rangle \\
 &\Rightarrow i\hbar|\dot{\psi}'\rangle = UHU^{-1}|\psi'\rangle - i\hbar U\dot{U}^{-1}|\psi'\rangle \\
 &\Rightarrow i\hbar|\dot{\psi}'\rangle = (UHU^{-1} - i\hbar U\dot{U}^{-1})|\psi'\rangle.
 \end{aligned} \tag{8.3}$$

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

$$H' = UHU^{-1} - i\hbar U\dot{U}^{-1}. \tag{8.4}$$

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

$$H = \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_z + \hbar\Omega_R \cos(\omega_d t - \phi_d)\sigma_x. \tag{8.5}$$

Le second terme de cet Hamiltonien peut par exemple résulter de l'interaction dipolaire-électrique $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$ entre le dipôle $\mathbf{d} \propto \sigma_x$ du système à deux niveaux et un champ électrique \mathbf{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

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_z + \hbar\Omega_R \cos(\omega_d t - \phi_d)\sigma_x \\
 &= \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_z + \hbar\Omega_R [\cos(\omega_d t) \cos(\phi_d) + \sin(\omega_d t) \sin(\phi_d)]\sigma_x \\
 &= \frac{\hbar\omega_{01}}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\Omega_R}{2} [(e^{i\omega_d t} + e^{-i\omega_d t}) \cos(\phi_d) + i(e^{i\omega_d t} - e^{-i\omega_d t}) \sin(\phi_d)] (\sigma_+ + \sigma_-).
 \end{aligned} \tag{8.6}$$

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'Eq. (8.2). 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'

$$e^{i\theta\sigma_z/2}\sigma_{\pm}e^{-i\theta\sigma_z/2} = \sigma_{\pm}e^{\pm i\theta}, \tag{8.7}$$

$$e^{i\theta\sigma_z/2}\sigma_z e^{-i\theta\sigma_z/2} = \sigma_z. \tag{8.8}$$

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 discréption. 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

$$\begin{aligned} H' &= \frac{\hbar}{2}(\omega_{01} - \omega)\sigma_z + \frac{\hbar\Omega_R}{2} [(e^{i\omega_d t} + e^{-i\omega_d t}) \cos(\phi_d) + i(e^{i\omega_d t} - e^{-i\omega_d t}) \sin(\phi_d)] (\sigma_+ e^{i\omega t} + \sigma_- e^{-i\omega t}) \\ &= \frac{\hbar}{2}(\omega_{01} - \omega)\sigma_z + \frac{\hbar\Omega_R}{2} (e^{-i\Delta t} e^{-i\phi_d} \sigma_+ + e^{i\Delta t} e^{i\phi_d} \sigma_-) + \frac{\hbar\Omega_R}{2} (e^{i\Sigma t} e^{i\phi_d} \sigma_+ + e^{-i\Sigma t} e^{-i\phi_d} \sigma_-) \end{aligned} \quad (8.9)$$

En distribuant les exponentielles comme à la dernière ligne de l'Éq. (8.9), 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 $\sim 1/\Omega_R$ pendant lequel ces termes accumulent une phase $\sim \Sigma/\Omega_R$. 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 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.¹⁹ La Fig. 17 montre la solution numérique de l'Éq. (8.9) 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 tenir compte perturbativement. Ces termes conduisent alors à un décalage de fréquence $\sim \Omega_R^2/\Sigma$ du qubit, connu sous le nom de décalage de Bloch-Siegert.²⁰

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

$$\begin{aligned} H' &\approx \frac{\hbar}{2}(\omega_{01} - \omega_d)\sigma_z + \frac{\hbar\Omega_R}{2} [(\sigma_- + \sigma_+) \cos(\phi_d) + i(\sigma_- - \sigma_+) \sin(\phi_d)] \\ &= \frac{\hbar\delta}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\Omega_R}{2} [\sigma_x \cos(\phi_d) + \sigma_y \sin(\phi_d)], \end{aligned} \quad (8.10)$$

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

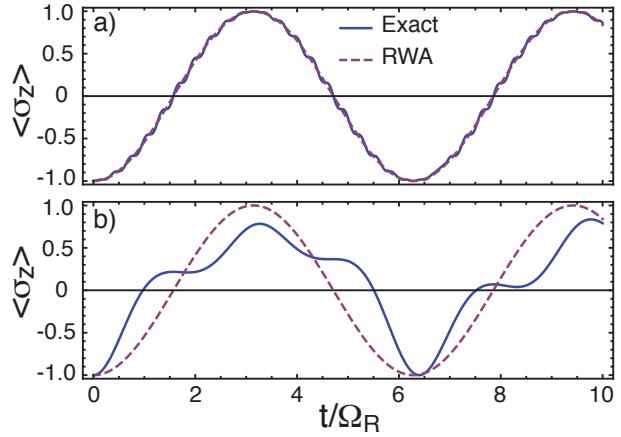


FIGURE 17 – Évolution de la valeur moyenne de σ_z sous l'Hamiltonien H' avec (lignes pointillées rouges) et sans (lignes pleines bleues) la RWA. a) $\Omega_R/\Sigma = 0.2$ b) $\Omega_R/\Sigma = 2$.

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

19. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, *Mécanique Quantique*, vol. 2 (Herman, 1973).
 20. F. Bloch et A. Siegert, Phys. Rev. **57**, 522 (1940).

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.

Exercice 21

Considérons l'Hamiltonien d'un gaz d'électrons unidimensionnel (le long de l'axe x), soumis à un champ magnétique en forme de spirale :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(x), \quad (8.11)$$

où $\mathbf{B}(x) = B_0(\cos(qx), 0, \sin(qx))$, et B_0 et q sont des paramètres constants. Le premier terme dans l'Éq. (8.11) est indépendant du spin. Trouvez la transformation unitaire U qui diagonalise le terme magnétique, de sorte que le deuxième terme dans l'Éq. (8.11) devient $B_0\sigma^z$ (uniforme). Le prix qu'il faut payer pour simplifier le terme magnétique est l'apparence d'un terme de couplage spin-orbite ; identifiez ce terme. Par conséquent, un fil sans couplage spin-orbite placé dans un champ en spirale est totalement équivalent à un fil avec du couplage spin-orbite placé dans un champ uniforme. Ce résultat a été beaucoup utilisé dans la recherche des fermions Majorana dans les dispositifs mésoscopiques.

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

En physique quantique, la règle d'or de Fermi est un moyen de calculer le taux de transition (probabilité de transition par unité de temps) à partir d'un état propre énergétique d'un système quantique vers un continuum d'états propres, par perturbation. Cette règle constitue un outil important dans la physique mésoscopique.

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

$$H(t) = H_0 + V(t). \quad (9.1)$$

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

$$|\psi'(t)\rangle = e^{+iH_0t/\hbar} |\psi(t)\rangle, \quad (9.2)$$

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. (8.4), l'Hamiltonien dans ce référentiel

prend la forme

$$V'(t) = e^{+iH_0t/\hbar}[H_0 + V(t)]e^{-iH_0t/\hbar} - H_0 = e^{+iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}. \quad (9.3)$$

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

$$i\hbar|\dot{\psi}'(t)\rangle = V'(t)|\psi'(t)\rangle \quad (9.4)$$

a comme solution formelle

$$|\psi'(t)\rangle = |\psi'(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V'(t_1) |\psi'(t_1)\rangle. \quad (9.5)$$

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. (9.5) et en itérant. Ceci conduit à

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= |\psi'(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V'(t_1) |\psi'(t_0)\rangle \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V'(t_1) V'(t_2) |\psi'(t_0)\rangle \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 V'(t_1) V'(t_2) V'(t_3) |\psi'(t_0)\rangle + \dots \end{aligned} \quad (9.6)$$

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 [?]

$$V(t) = V e^{\eta t} \quad (9.7)$$

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

$$H_0|j\rangle = \hbar\omega_j|j\rangle \quad (9.8)$$

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

$$\begin{aligned} \langle f'(t)|\psi'(t)\rangle &= \langle f'(t)|i'(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle f'(t)|V'(t_1)|i'(t_0)\rangle \\ &= \langle f|e^{-iH_0t/\hbar}e^{+iH_0t_0/\hbar}|i\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle f'(t)|e^{+iH_0t_1/\hbar}(Ve^{\eta t_1})e^{-iH_0t_1/\hbar}|i'(t_0)\rangle, \end{aligned} \quad (9.9)$$

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

$$\begin{aligned} \langle f'(t)|\psi'(t)\rangle &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle f'(t)|e^{+i\omega_f t_1}(Ve^{\eta t_1})e^{-i\omega_i t_1}|i'(t_0)\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle f'(t)|V|i'(t_0)\rangle \int_{t_0}^t dt_1 e^{+i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t_1} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle f'(t)|V|i'(t_0)\rangle \frac{e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t} - e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t_0}}{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)}. \end{aligned} \quad (9.10)$$

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

$$\langle f'(t) | \psi'(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle f'(t) | V | i'(t_0) \rangle \frac{e^{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)t}}{i(\omega_f - \omega_i - i\eta)}. \quad (9.11)$$

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

$$P_{fi}(t) = |\langle f'(t) | \psi'(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | V | i \rangle|^2 \frac{e^{2\eta t}}{(\omega_f - \omega_i)^2 + \eta^2}. \quad (9.12)$$

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

$$\Gamma_{fi} = \frac{d}{dt} P_{fi}(t) = \frac{2}{\hbar^2} |\langle f | V | i \rangle|^2 e^{2\eta t} \frac{\eta}{(\omega_f - \omega_i)^2 + \eta^2}. \quad (9.13)$$

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

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{z^2 + \epsilon^2} = \pi \delta(z), \quad (9.14)$$

ce qui conduit à la règle d'or de Fermi

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_f - \hbar\omega_i). \quad (9.15)$$

Ce résultat s'obtient aussi pour une perturbation ouverte de manière abrupte. Notons que s'il y a plusieurs états finaux équivalents, on remplace Γ_{fi} par $\sum_f \Gamma_{fi}$. En d'autres mots, on additionne de façon incohérente les différents taux de transition.

Comme exemple de l'application de la règle d'or de Fermi, nous allons estimer le temps de collision τ_m due aux impuretés ionisées dans un métal. L'énergie potentielle d'un électron dans le champ créé par une seule impureté de charge Ze est

$$V_i(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon r} e^{-\lambda r}, \quad (9.16)$$

où ϵ est la permittivité diélectrique du cristal, et $1/\lambda$ est une longueur caractéristique d'écrantage due à tous les autres électrons.²¹ Selon la règle d'or de Fermi, le taux de diffusion d'un électron dans l'état (\mathbf{k}, n) , dû à une seule impureté, est

$$\gamma_{\mathbf{kn}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'n'} |\langle \psi_{\mathbf{kn}} | V_i(r) | \psi_{\mathbf{k}'n'} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{kn}} - E_{\mathbf{k}'n'}). \quad (9.17)$$

21. Nous avons appliqué l'approximation de Thomas-Fermi pour l'écrantage [voir p. ex. le chapitre 17 de N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt-Saunders, 1976)].

Remarquons que les états finaux (\mathbf{k}, n) ont tous la même énergie que l'état initial (\mathbf{k}, n) , à cause de la fonction delta. Ceci constitue un exemple de diffusion élastique dont on a discuté plus haut. Maintenant, étudions à fond l'élément de matrice $\langle \psi_{\mathbf{kn}} | V_i(r) | \psi_{\mathbf{k}'n'} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mathbf{kn}} | V_i(r) | \psi_{\mathbf{k}'n'} \rangle &= \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) V_i(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V_i(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} V_i(\mathbf{q}) \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (9.18)$$

où V est le volume du cristal, $V_i(\mathbf{q})$ est la transformée de Fourier de l'Éq. (9.16) et nous avons utilisé le théorème de Bloch, $\psi_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) / \sqrt{V}$. Étant donné que $u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ pour tout vecteur de réseau \mathbf{R} , il est profitable de séparer l'intégral sur \mathbf{r} de l'Éq. (9.18) en deux parties : une intégrale sur la cellule unité du cristal, et une somme sur toutes les cellules unités. Ainsi,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mathbf{kn}} | V_i(r) | \psi_{\mathbf{k}'n'} \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} V_i(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{q}} V_i(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \mathbf{G}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{G}} V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{G}) \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (9.19)$$

où \mathbf{G} est un vecteur quelconque de l'espace réciproque, V_{cell} est le volume de la cellule unité, et nous avons utilisé la célèbre relation

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = N_{\text{cell}} \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{G}}, \quad (9.20)$$

$N_{\text{cell}} = V/V_{\text{cell}}$ étant le nombre total de cellules unité dans le cristal. Ici, nous allons faire une approximation : nous dirons que $V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{G})$ est beaucoup plus grand pour $G = 0$ que pour $G \neq 0$, de sorte que

$$\langle \psi_{\mathbf{kn}} | V_i(r) | \psi_{\mathbf{k}'n'} \rangle \simeq \frac{1}{V_{\text{cell}}} V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{kn}}(\mathbf{r}). \quad (9.21)$$

Nous pouvons justifier cette approximation à partir de

$$V_i(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V_i(\mathbf{r}) = -\frac{1}{V} \frac{Ze^2}{\epsilon(q^2 + \lambda^2)}. \quad (9.22)$$

Cette fonction a son maximum à $q = 0$. En plus, \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont généralement beaucoup plus petits que les dimensions de la zone de Brillouin. D'abord, k est petit car nous voulons calculer le temps de diffusion pour les électrons situés à la surface de Fermi ($k = k_F$), et pour des métaux simples cette surface est bien à l'intérieur de la zone de Brillouin. Ensuite, k' doit également être petit à cause de la delta de Dirac qui fait son apparence dans l'Éq. (9.17). Par conséquent,

$G \neq 0$ mène à des (relativement) grandes valeurs de $|\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{G}|$, et donc aux (relativement) petites valeurs de $V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{G})$.

Exercice 22

Démontrez l'Éq. (9.22).

Nous pouvons simplifier l'Éq. (9.24) encore plus si nous adoptons la situation d'un métal simple avec une seule bande au niveau de Fermi. Dans ce cas, $n = n'$ et

$$\frac{1}{V_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})^* u_{\mathbf{k}'n}(\mathbf{r}) \sim O(1). \quad (9.23)$$

Strictement, l'Éq. (9.23) donne 1 seulement si $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Néanmoins, dans les cas les plus simples l'intégrale est de l'ordre de 1 lorsque \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont à la surface de Fermi. Ainsi,

$$\langle \psi_{\mathbf{k}n} | V_i(r) | \psi_{\mathbf{k}'n'} \rangle \simeq V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (9.24)$$

Ceci nous amène à

$$\gamma_{\mathbf{k}n} \simeq \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \delta(E_{\mathbf{k}n} - E_{\mathbf{k}'n}). \quad (9.25)$$

Ce taux correspond à une seule impureté. Si l'on a N_i impuretés ionisées dans le cristal, le taux total de diffusion pour l'état (\mathbf{k}, n) est donné par la somme incohérente

$$\Gamma_{\mathbf{k}n} = N_i \gamma_{\mathbf{k}n} \simeq N_i \sum_{\mathbf{k}'} |V_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \delta(E_{\mathbf{k}n} - E_{\mathbf{k}'n}). \quad (9.26)$$

Essayons d'aller plus loin et de faire l'intégrale dans l'Éq. (9.26) analytiquement. Cela est possible pour des bandes paraboliques, $E_{\mathbf{k}n} = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$. Dans ce cas,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}n} &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \left(\frac{Ze^2}{\epsilon} \right)^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(q^2 + \lambda^2)^2} \delta(E_{\mathbf{k}n} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}n}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \left(\frac{Ze^2}{\epsilon} \right)^2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{(q^2 + \lambda^2)^2} \delta\left(\frac{\hbar^2 k q}{m^*} \cos \theta - \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}\right) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \left(\frac{Ze^2}{\epsilon} \right)^2 \int_0^\infty \frac{dq q^2}{4\pi} \frac{1}{(q^2 + \lambda^2)^2} \int_{-1}^1 dx \delta\left(\frac{\hbar^2 k q}{m^*} x - \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}\right) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \left(\frac{Ze^2}{\epsilon} \right)^2 \int_0^\infty \frac{dq q^2}{4\pi} \frac{1}{(q^2 + \lambda^2)^2} \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \int_{-1}^1 dx \delta(x - \frac{q}{2k}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \left(\frac{Ze^2}{\epsilon} \right)^2 \int_0^{2k} \frac{dq q}{4\pi} \frac{1}{(q^2 + \lambda^2)^2} \frac{m^*}{\hbar^2 k} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} n_i \left(\frac{Ze^2}{\epsilon} \right)^2 \frac{m^*}{4\pi \hbar^2 k} \frac{2k^2}{\lambda^2 (4k^2 + \lambda^2)}, \end{aligned} \quad (9.27)$$

où $n_i = N_i/V$ est la densité des impuretés et nous avons approximé $\sum_{\mathbf{q}} \simeq V/(2\pi)^3 \int d\mathbf{q}$. Pour les propriétés de transport, on s'intéresse aux électrons au niveau de Fermi. Dans ce cas, on peut remplacer k par k_F . Finalement, le temps de collision est tout simplement

$$\tau_m = 1/\Gamma_{\mathbf{k}n}. \quad (9.28)$$

Le résultat de l'Éq. (9.27) nous apprend que le temps de collision dû aux impuretés ionisées est inversement proportionnel à la concentration de ces dernières, et qu'il augmente lorsque l'énergie de l'électron ($\propto k^2$) devient plus élevée. Également, on apprend que le taux de collision diminue lorsque l'écrantage de l'interaction Coulomb devient plus fort (i.e. lorsque λ devient plus grand).

Exercise 23

Dans le cas où $k = k_F$ et $k_F \ll \lambda$, montrez que le taux de diffusion devient proportionnel à la densité d'états au niveau de Fermi.