

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Spécialité : NANOPHYSIQUE

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Benjamin VENITUCCI

Thèse dirigée par **Yann-Michel NIQUET**, Université Grenoble Alpes

préparée au sein du **Laboratoire Modélisation et Exploration des Matériaux**

dans l'**École Doctorale Physique**

Modélisation de la manipulation électrique des qubits de trou dans le silicium

Modeling of the electrical manipulation of hole silicon qubits

Thèse soutenue publiquement le 25 novembre 2020, devant le jury composé de :

Madame Fabienne MICHELINI

Maître de conférences, Aix-Marseille Université, Rapporteure

Monsieur Gabriel BESTER

Professeur, Universität Hamburg, Rapporteur

Monsieur Matthieu DELBECQ

Maître de conférences, École Normale Supérieure, Examinateur

Monsieur David FERRAND

Professeur des Universités, Université Grenoble Alpes, Président du jury



À ma famille

Remerciements

Cette thèse est l'aboutissement de trois ans de travaux de recherche au CEA Grenoble. Beaucoup de personnes ont affecté cette thèse de manière bénéfique. Je souhaite ainsi les remercier.

Tous d'abord, je remercie mon directeur de thèse et encadrant Yann-Michel. Il a toujours pris de son temps pour discuter de recherche avec moi ou avec les autres membres de l'équipe. À chaque question que je me posais, il apportait une réponse claire ou encore les éléments clefs nécessaires pour la trouver.

Merci Daniel de m'avoir fait découvrir cette thèse. Merci à Léo d'avoir toujours accepté de répondre à mes questions concernant les qubits (et les documents administratifs de l'école doctorale). Merci Jing pour ton énergie et ton enthousiasme au quotidien. Merci à Vincent et à Biel pour les discussions qui m'ont permis de prendre du recul sur mon travail. Je remercie aussi les membres du LSM qui ont accueilli notre équipe dans leurs locaux. Je remercie en particulier François Triozon qui a supporté d'être entouré par des personnes de l'IRIG dans son petit bureau. Les pauses café/eau avec les doctorants et post-doctorants du LSM ont été très appréciables et motivantes ! De façon plus générale, merci aux chercheurs permanents, aux post-doctorants, et aux doctorants de l'IRIG, du LETI, et de l'Institut Néel pour leurs interactions constructives.

Merci à ces années passées avec les Racoons. Finalement, un grand merci à ma famille, et en particulier à Marion, pour leur soutien sans faille.

Table des matières

Table des matières	7
1 Introduction	11
1.1 Système quantique à deux niveaux : le qubit	12
1.1.1 Dynamique intrinsèque d'un qubit de spin	12
1.1.2 Oscillations cohérentes de spin	13
1.1.3 Perte de l'information	14
1.1.4 Réalisations de qubits de spin	15
1.2 Silicium	16
1.2.1 Cristal de silicium	17
1.2.2 Structure de bandes du silicium	17
1.3 Qubit de spin silicium	20
1.3.1 Manipulation magnétique de spin	20
1.3.2 Manipulation électrique de spin	21
1.4 Conclusions	23
1.5 Objectifs de la thèse	23
2 Méthodes théoriques et numériques	25
2.1 Description empirique : la méthode $k \cdot p$	25
2.1.1 Bandes de valence sans spin	26
2.1.2 Bandes de valence avec couplage spin-orbite	27
2.1.3 Nanostructure : fonctions enveloppes	31
2.2 Effet du champ magnétique	32
2.2.1 Effet du potentiel vecteur	32
2.2.2 Effet Zeeman	32
2.2.3 Effet total du champ magnétique sur les fonctions de Bloch	32
2.3 Physique numérique : dispositif réel	33
2.3.1 Présentation d'une géométrie	33
2.3.2 Fonctionnement du code TB_Sim	33
2.4 Conclusions	37
3 Expériences sur les qubits de trou	39
3.1 Double boîte quantique	39
3.1.1 Remplissage des boîtes quantiques	40
3.1.2 Courant drain-source	42
3.2 Dispositif expérimental	43
3.2.1 Manipulation électrique de spin	44
3.2.2 Contrôle électrique : oscillations cohérentes de spin	45
3.3 Anisotropie des facteurs gyromagnétiques	46
3.3.1 Formalisme de la matrice gyromagnétique	46
3.3.2 Caractérisation expérimentale du tenseur gyromagnétique	47

3.4	Anisotropie de la fréquence de Rabi	49
3.4.1	Mécanismes des oscillations de Rabi	49
3.4.2	Caractérisation expérimentale de la fréquence de Rabi	52
3.5	Conclusions	53
4	Formalismes de calcul de la fréquence de Rabi et applications	55
4.1	Formalismes de calcul de la fréquence de Rabi	55
4.1.1	Présentation générale	55
4.1.2	Traitement du champ magnétique en perturbation	57
4.1.3	Formalisme de la matrice gyromagnétique	58
4.2	Effets des symétries sur la matrice gyromagnétique et la fréquence de Rabi	59
4.2.1	Forme de la matrice gyromagnétique	60
4.2.2	Anisotropie de la fréquence de Rabi	62
4.3	Application à un qubit spin-orbite de trou	63
4.3.1	Dispositif SOI et modèle	63
4.3.2	Fréquence de Rabi d'un qubit de trou	64
4.3.3	Interprétation	66
4.3.4	Analyses des facteurs gyromagnétiques	72
4.3.5	Comparaison avec les données expérimentales	74
4.4	Conclusions	77
5	Impact du matériau sur les performances du qubit	79
5.1	Modèle simplifié pour une boîte quantique	79
5.1.1	Structure et hamiltonien	79
5.1.2	Base minimale pour les fonctions enveloppes	81
5.2	Fréquence de Rabi	84
5.2.1	Équations générales	84
5.2.2	... dans la base minimale	85
5.3	Validation des hypothèses du modèle	89
5.3.1	Traitement du champ électrique statique	90
5.3.2	Limite de la couche mince	90
5.3.3	Base minimale	90
5.3.4	Intensité du couplage spin-orbite	91
5.3.5	Limitations du modèle	92
5.4	Physique des oscillations de Rabi	93
5.4.1	Ingrédients nécessaires aux oscillations de Rabi	93
5.4.2	Orientation du champ magnétique	94
5.5	Effet de l'orientation et choix du matériau	95
5.6	Conclusions	96
6	Interaction spin-phonon	97
6.1	Temps de relaxation assisté par des phonons	97
6.1.1	Expression générale	98
6.1.2	Structure de bandes isotropes des phonons	99
6.1.3	Application à une méthode $k \cdot p$ six bandes	100
6.2	Application à un qubit spin-orbite de trou sur SOI	101
6.2.1	Effet de la fréquence de Larmor	102
6.2.2	Termes dominants	102
6.2.3	Effet du champ électrique	103
6.2.4	Effet de l'orientation du champ magnétique	105
6.2.5	Retour sur le modèle de la boîte quantique	105

6.2.6	Limite du modèle	107
6.3	Conclusions	107
7	Conclusions et perspectives	109
7.1	Conclusions générales	109
7.2	Code développé	110
7.3	Perspectives	111
Bibliographie		113
Annexe A	Paramètres de la méthode $k \cdot p$	119
Annexe B	Hamiltonien effectif : rotation de la base de spin	121
Annexe C	Résonance électrique de spin iso-Zeeman dans un potentiel harmonique	122
Annexe D	Équivalence entre le formalisme de la matrice \hat{g} et la série de perturbation	123
Annexe E	Calcul numérique de la dérivée de la matrice \hat{g}	124
Annexe F	Théorie des groupes pour les matrices \hat{g} et \hat{g}'	125
Annexe G	Contraintes et fréquence de Rabi pour un trou léger	127
Annexe H	Décomposition de la fréquence de Rabi	131
Résumé/Abstract		133

Chapitre 1

Introduction

L'ordinateur, tel que nous le connaissons aujourd'hui, est né des travaux du mathématicien Alan Turing dans les années 1940 concernant la science de l'information. L'invention du transistor par J. Bardeen et W. H. Brattain en 1947 [1] a permis, quelques années plus tard, de concevoir des ordinateurs se basant sur cette technologie pour encoder et traiter l'information classique, ce qui a révolutionné le quotidien et la recherche scientifique. La puissance de ces ordinateurs classiques n'a pas cessé de croître depuis les années 1970 selon la loi de Moore [2] qui stipule que la densité de transistors sur les puces informatiques (et donc leur puissance) double tous les 2 ans comme la figure 1.1 peut l'attester jusqu'aux années 2010. Depuis quelques années, il est difficile de réduire les tailles caractéristiques des transistors car celles-ci sont limitées par des effets quantiques [3] (fuites par effet tunnel par exemple) et thermodynamiques limitant les performances de cette technologie.

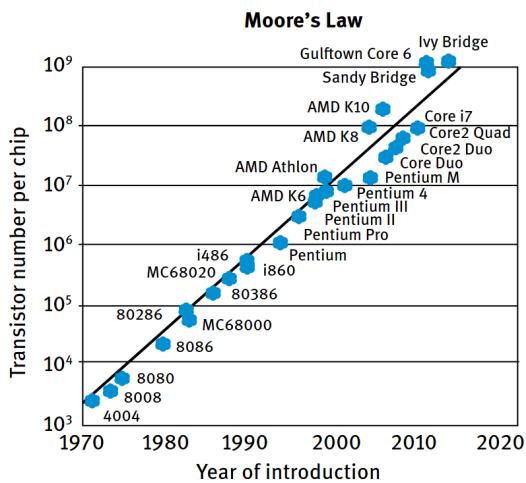


FIGURE 1.1 – Loi de Moore prédictive par G. Moore dans les années 1970 montrant le nombre de transistors par puce en fonction de l'année de son lancement. Tiré de la référence [4].

Dans les années 1980, le physicien Richard Feynman introduit le concept du simulateur quantique [5] qui utilise les propriétés quantiques de la matière pour simuler un autre système quantique plus rapidement qu'avec un ordinateur classique. L'ordinateur quantique est une déclinaison plus générale de ce concept [6]. Cet ordinateur hypothétique serait plus efficace qu'un ordinateur classique pour certaines tâches bien spécifiques [7] en tirant parti de la parallélisation massive permise par le principe de superposition de la mécanique quantique. En 1994, Peter Shor [8] introduit un algorithme quantique permettant de factoriser plus rapidement de grands nombres avec un ordinateur quantique qu'avec une machine classique. En 1996, Lov Grover [9] construit un algorithme quantique réduisant le temps de recherche d'un objet dans une liste non ordonnée en utilisant la parallélisation massive intrinsèque aux machines quantiques.

1.1 Système quantique à deux niveaux : le qubit

La parallélisation massive d'un ordinateur quantique est permise par un des principes fondamentaux de la mécanique quantique : la superposition d'états quantiques [10]. Tandis que l'information élémentaire stockée dans un bit classique peut être représentée soit par la valeur $\mathbb{1}$ (courant passant pour un transistor), soit par la valeur $\mathbb{0}$ (courant bloqué), celle d'un bit quantique est encodée comme la superposition des états $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ d'un système quantique à deux niveaux (qubit). L'état $|\psi\rangle$ de ce qubit peut donc s'écrire :

$$|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle, \quad (1.1)$$

où $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, et $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. La quantité $|\alpha|^2$ (respectivement $|\beta|^2$) correspond à la probabilité d'obtenir l'état $|1\rangle$ (respectivement $|0\rangle$) lors d'une mesure du système.

Nous pouvons généraliser cette construction à un système de N bits. L'état de deux bits classiques doit ainsi être une des quatre configurations suivantes : $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$, ou $(1, 1)$, tandis que l'état $|\psi\rangle$ d'un système de deux qubits est une superposition de ces quatre états :

$$|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|10\rangle + \gamma|01\rangle + \delta|11\rangle, \quad (1.2)$$

où, cette fois-ci, $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}$, et $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$. De manière générale l'expression (1.2) ne peut pas se factoriser $|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ où $|\psi_i\rangle$ serait la fonction d'onde du qubit i [voir éq. (1.1)]. Les états de chaque qubit sont donc entremêlés, et nous parlons ainsi d'intrication quantique.

De façon générale, N bits classiques sont caractérisés par N variables d'état, tandis que N qubits sont caractérisés par 2^N variables d'état. Ainsi, pour stocker dans une mémoire classique toutes les variables d'état d'un système se composant, par exemple, de 64 bits quantiques, il faudrait environ 100 000 petaoctets¹ (1 petaoctet = 10^{15} octets), ce qui est gigantesque ! Il y a donc une très grande quantité d'information contenue dans un système quantique.

L'intérêt de l'ordinateur quantique se trouve notamment dans les possibilités d'effectuer des opérations en parallèles offertes par le principe de superposition de la mécanique quantique, et la quantité d'information stockée dans un système quantique. En effet, pour toute opération logique caractérisée par une transformation unitaire \hat{U} sur deux qubits nous obtenons par exemple :

$$\hat{U}|\psi\rangle = \alpha[\hat{U}|00\rangle] + \beta[\hat{U}|10\rangle] + \gamma[\hat{U}|01\rangle] + \delta[\hat{U}|11\rangle]. \quad (1.3)$$

Ainsi, si l'entrée est une superposition d'états, la sortie est de même une superposition des opérations correspondantes. Le calcul peut donc progresser en parallèle sur cette superposition de solutions. Cette superposition doit être manipulée de façon adéquat avant sa mesure de façon à fournir un résultat pertinent plus rapidement qu'un ordinateur classique [8, 9].

Concrètement, tout système quantique à deux niveaux peut définir un qubit. Il existe ainsi différentes technologies pour concevoir un qubit. Un qubit peut ainsi être défini par deux états de polarisations (horizontale ou verticale) d'un photon unique [11] ou encore, dans des systèmes supraconducteurs, par des états de charge [12], de flux [13], ou de phase [14]. En 1998, Loss et Di Vincenzo [15] proposèrent d'encoder l'information quantique dans le spin d'un électron dans des boîtes quantiques. Nous allons discuter la dynamique d'un tel qubit de spin et la manipulation de son état.

1.1.1 Dynamique intrinsèque d'un qubit de spin

Nous allons discuter la dynamique intrinsèque d'un qubit. Nous détaillons, par exemple, un qubit de spin mais les résultats peuvent être généralisés à tout type de qubit.

Considérons un système portant un spin. Un champ magnétique statique et homogène B_0 est appliqué à ce système, et sépare l'état fondamental $|0\rangle$ et l'état excité $|1\rangle$ d'une énergie E_z . Cette énergie, appelée énergie Zeeman, s'écrit :

$$E_z = \mu_B g_{\parallel} B_0 \quad (1.4)$$

1. Chacune des variables d'état est un nombre complexe caractérisé par deux réels, et nous supposons que chaque réel peut être stocké sur 4 octets (float)

avec μ_B le magnéton de Bohr, et g_{\parallel} le facteur gyromagnétique. Ainsi, l'hamiltonien H de ce système s'écrit dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$H = \begin{pmatrix} -hf_L/2 & 0 \\ 0 & hf_L/2 \end{pmatrix}, \quad (1.5)$$

où $f_L = E_z/h$ est la fréquence de Larmor et h est la constante de Planck.

Un état initial $|\psi\rangle$ quelconque peut se décomposer sur les deux états $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ [éq. (1.1)]. En résolvant l'équation de Schrödinger dépendante du temps, nous obtenons cet état au temps t :

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi(t)} |0\rangle, \quad (1.6)$$

où l'angle θ défini le poids des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ dans $|\psi\rangle$, et $\varphi(t) = 2\pi f_L t$ décrit la pulsation intrinsèque du qubit. Cet état, entièrement caractérisé par les angles θ et φ , peut donc se représenter à la surface d'une "sphère de Bloch" dont les pôles correspondent aux états $|1\rangle$ ($\theta = 0$) et $|0\rangle$ ($\theta = \pi$). Au cours du temps, il décrit une trajectoire circulaire sur la surface de la sphère de Bloch (voir figure 1.2) à la fréquence de Larmor f_L : il précessse ainsi autour de l'axe des pôles à cette fréquence (précession de Larmor). La fréquence de Larmor correspond donc à l'horloge "intrinsèque" du qubit.

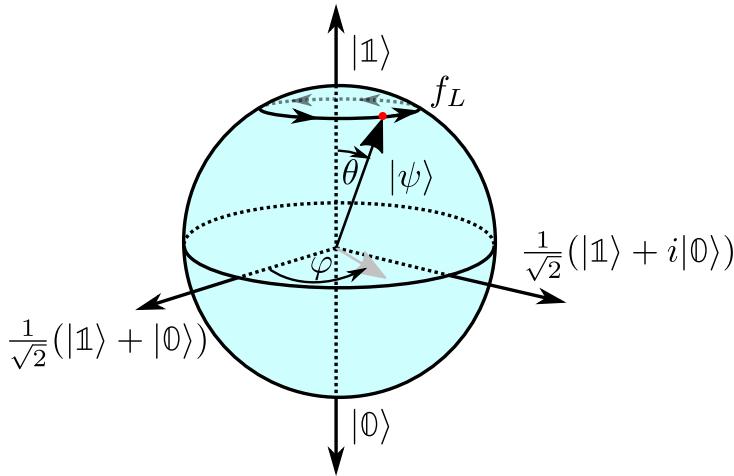


FIGURE 1.2 – Représentation de l'état d'un qubit sur la surface d'une sphère de Bloch (point rouge). L'angle $\varphi(t) = 2\pi f_L t$ caractérise la dynamique intrinsèque du qubit. L'état $|\psi(t)\rangle$, représenté à la surface de la sphère de Bloch, précesser à la fréquence f_L autour de l'axe reliant les pôles : ce mouvement est la précession de Larmor.

1.1.2 Oscillations cohérentes de spin

L'état d'un qubit de spin peut être contrôlé via l'application d'un champ magnétique oscillant (ac) résonnant avec la transition entre deux états de spin $|0\rangle$ et $|1\rangle$. Nous appliquons ainsi un champ magnétique ac perpendiculaire au champ magnétique statique B_0 d'amplitude B_{ac} , et de fréquence f_{ac} . De manière générale, ce champ ac couple les spins entre eux, et ainsi, dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ l'hamiltonien H' du qubit sous champ magnétique ac s'écrit :

$$H' = \begin{pmatrix} -hf_L/2 & K^* \sin(2\pi f_{\text{ac}} t) \\ K \sin(2\pi f_{\text{ac}} t) & hf_L/2 \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

où $K \equiv \mu_B g_{\perp} B_{\text{ac}}^2$ caractérise le couplage entre les deux états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ induit par le champ magnétique ac. Lorsque la fréquence de l'excitation f_{ac} est proche de la fréquence de Larmor f_L du qubit, des oscillations cohérentes sont entretenues entre les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$.

2. De façons générales, les facteurs gyromagnétiques g_{\parallel} et g_{\perp} peuvent être différents dans des systèmes anisotropes. De plus, K peut aussi caractériser un couplage à un champ électrique ac lorsqu'une interaction spin-orbite permet une manipulation électrique du spin (voir sous-sections 1.2.2 et 1.3.2).

Ces oscillations peuvent être mises en évidence en résolvant l'équation de Schrödinger dépendante du temps associée à l'hamiltonien (1.7) dans une approximation d'onde tournante (RWA pour *Rotating Wave Approximation*). La RWA tient compte des variations les plus lentes des coefficients α et β de la fonction d'onde (1.1) quand $f_{ac} \sim f_L$.

À la résonance $f_{ac} = f_L$, les oscillations entre les états sont complètes, et en supposant $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, l'état $|\psi(t)\rangle$ s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{|K|}{2\hbar}t\right)|1\rangle + \sin\left(\frac{|K|}{2\hbar}t\right)e^{i(2\pi f_L t + \varphi_0)}|0\rangle, \quad (1.8)$$

où φ_0 est la phase initiale. Cette fois-ci, le poids de l'état $|\psi\rangle$ sur les états $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ varie au cours de temps. En particulier, l'état $|\psi\rangle$ oscille entre les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ de sorte que la probabilité de mesurer l'état $|0\rangle$ est :

$$P_{|0\rangle} = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = [1 - \cos(2\pi f_R t)]/2. \quad (1.9)$$

Ces oscillations sont caractérisées par une fréquence appelée fréquence de Rabi $f_R = |K|/\hbar$. La figure 1.3 a) représente la probabilité $P_{|0\rangle}$ [éq. (1.9)] d'obtenir l'état $|0\rangle$ lors de la mesure du spin en fonction du temps d'application du champ magnétique ac résonnant.

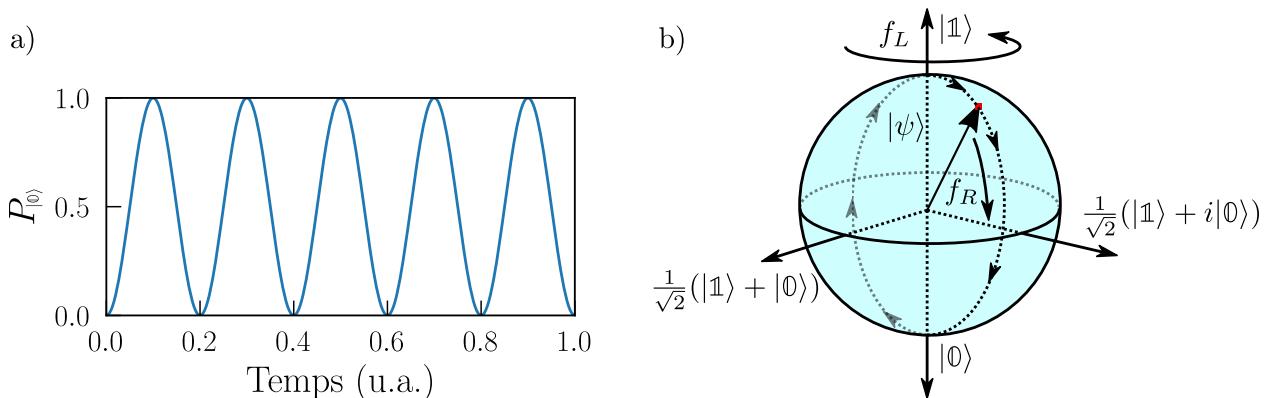


FIGURE 1.3 – a) Probabilité $P_{|0\rangle}$ [éq. (1.9)] d'obtenir l'état $|0\rangle$ lors de la mesure du spin en fonction de temps d'application du champ magnétique ac résonnant avec le qubit; oscillations cohérentes entre les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$. L'unité de l'axe des abscisses est arbitraire (u.a.). b) Trajectoire circulaire de l'état $|\psi\rangle$ sur la sphère de Bloch tournante, allant de pôle en pôle à la fréquence de Rabi lorsque un champ magnétique ac résonnant est appliqué sur le qubit de spin.

Nous pouvons introduire une sphère de Bloch tournant à la fréquence de Larmor f_L , c'est à dire que l'état du qubit (1.6) sans champ magnétique ac est immobile sur cette sphère. Sous champ magnétique ac résonant, l'état du qubit (1.8) décrit une trajectoire circulaire allant de pôle en pôle à la fréquence de Rabi sur cette sphère de Bloch tournante. La figure 1.3 b) représente cette trajectoire sur la sphère de Bloch tournante. Nous pouvons donc programmer un spin par des impulsions ac résonantes.

Nous venons de discuter la dynamique d'un qubit de spin idéal, c'est à dire un qubit sans interaction non intentionnelle avec l'environnement extérieur. Cependant, comme nous allons le montrer dans le paragraphe suivant, il existe en pratique des interactions parasites entre l'environnement et le qubit.

1.1.3 Perte de l'information

Le stockage et la manipulation de l'information encodés dans des qubits nécessitent de préserver la cohérence des états. La cohérence est intrinsèquement fragile, et l'interaction non intentionnelle du qubit avec l'environnement tend à la détruire. En pratique, nous pouvons distinguer deux mécanismes de décoherence.

Le premier est la relaxation du qubit correspondant à la transition de l'état excité vers l'état fondamental. Il peut être associé à la perte d'information classique du qubit, et se manifeste par des variations

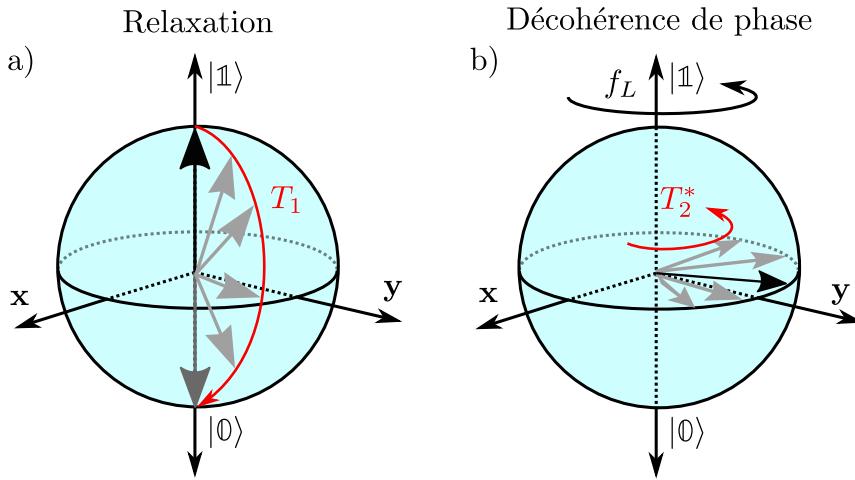


FIGURE 1.4 – a) Relaxation de l'état excité $|1\rangle$ vers l'état fondamental $|0\rangle$, dans un temps caractéristique T_1 . b) Dérive de phase d'un état dans le plan équatorial de la sphère de Bloch tournant à la fréquence de Larmor f_L associée à un temps caractéristique T_2^* . Nous définissons les états $x = (|1\rangle + |0\rangle)/\sqrt{2}$ et $y = (|1\rangle - i|0\rangle)/\sqrt{2}$.

de l'angle θ [voir figure 1.2] avec un temps caractéristique T_1 [voir figure 1.4 a)]. Ce processus de relaxation est inélastique, et nécessite l'émission ou l'absorption de phonons ou de photons. Le second mécanisme, purement quantique, correspond à la perte de cohérence de phase de l'état du qubit. Il correspond à des dérives de l'angle φ [voir figure 1.2] avec un temps caractéristique T_2^* [voir figure 1.4 b)].

Finalement, le temps de cohérence total T_2 est donné par $1/T_2 = 1/(2T_1) + 1/T_2^*$ [16]. Nous notons que généralement $T_1 \gg T_2^*$. Il est ainsi possible de contrôler le qubit pendant ce temps de cohérence. De plus, ce temps de cohérence T_2 dépend fortement du protocole expérimental utilisé pour le mesurer. Des expériences, comme par exemple les échos de spin de Hahn [17], permettent de compenser dynamiquement des dérives lentes de φ , et d'allonger T_2 .

La décohérence limite ainsi les opportunités d'exploiter les propriétés d'un qubit de spin. Nous allons voir qu'il est néanmoins possible d'implémenter un qubit de spin dans des matériaux semiconducteurs.

1.1.4 Réalisations de qubits de spin

Comme discuté précédemment, Loss et Di Vincenzo [15] proposèrent d'utiliser le spin d'un électron dans des boîtes quantiques de matériaux semiconducteurs pour encoder l'information quantique.

La première manipulation de spin dans des matériaux semiconducteurs a été démontrée dans des hétérostructures à base d'arsénure de gallium (GaAs) [18, 19]. Typiquement, les boîtes quantiques sont construites à partir d'un gaz 2D d'électrons créé aux interfaces GaAs/AlGaAs. Ce gaz est ensuite dépeuplé en appliquant des tensions négatives appropriées aux grilles métalliques le surplombant. La figure 1.5 a) représente un exemple de boîtes quantiques définies dans des hétérostructures GaAs/AlGaAs. Un champ magnétique statique modéré $B_0 \sim 0.1$ T ($f_L \sim 0.5$ GHz) permet de séparer les états de spin dans ces boîtes et créer des qubits. Cependant, il est difficile de détecter directement le moment magnétique d'un seul électron car celui-ci est très faible. Néanmoins, il est possible de le mesurer indirectement par l'intermédiaire d'une conversion spin-charge ; l'état de spin peut alors être détecté par la transition d'un électron d'une boîte à un réservoir [20] ou encore, dans un système de double boîte quantique, d'une boîte à l'autre [18, 19]. Ces transitions peuvent en effet être bloquées par le principe d'exclusion de Pauli et donc dépendre du spin de l'électron (blocage de Pauli, voir chapitre 3). Dans ce dernier système, l'état de spin est mesuré par détection d'un courant entre les boîtes quantiques [18] ou encore par un changement de conductance dans un transistor à un électron proche de la boîte quantique de mesure [19].

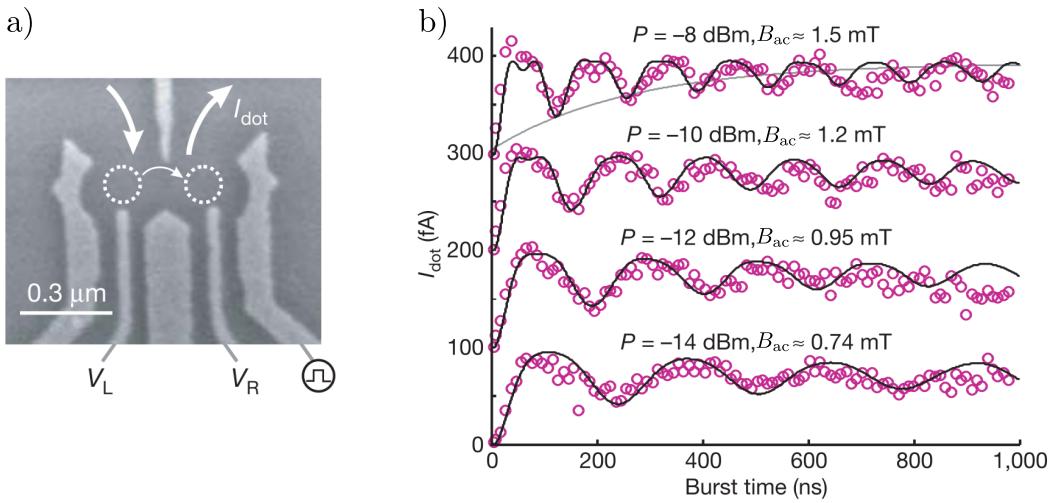


FIGURE 1.5 – a) Deux boîtes quantiques (en cercles pointillés blancs) définies dans des hétérostructures GaAs/AlGaAs par des grilles de déplétion (en gris clair). La conversion spin-charge permet de détecter l'état de spin d'une des deux boîtes par l'intmédiaire du courant I_{dot} à travers les boîtes quantiques. b) Oscillations du courant à travers les deux boîtes quantiques en fonction du temps d'application d'un champ magnétique ac résonant pour différentes puissances d'excitation. Ce courant reflète l'état de spin et ces oscillations sont caractéristiques des oscillations de Rabi. Tirés de la référence [18].

Le qubit est, en pratique, initialisé dans son état fondamental par équilibre avec l'environnement (à champ magnétique de l'ordre du Tesla, et à faible température ~ 100 mK). Son état peut être ensuite manipulé directement par un champ magnétique ac B_{ac} perpendiculaire à B_0 . Ce champ ac peut être créé par une ligne de courant à proximité du qubit. Cette résonance magnétique de spin (ESR pour *Electron Spin Resonance*) entraîne des oscillations de Rabi comme illustré dans la figure 1.5 b) pour différentes amplitude de champ magnétique oscillant B_{ac} .

Les qubits de spin dans ces hétérostructures présentent des temps de relaxations T_1 supérieurs à la seconde à faible champ magnétique et faible température [21]. Cependant le temps de cohérence T_2 dans ces systèmes est très faible, de l'ordre de quelques dizaines de nanosecondes, ce qui limite leur propriétés quantiques. La source principale de cette décohérence est l'interaction hyperfine entre les spins nucléaires des noyaux atomiques du matériau hôte et le spin du qubit [19]. Il est donc pertinent de choisir un matériau présentant une faible interaction hyperfine pour accroître la durée de vie des qubits de spin.

Le couplage spin-orbite peut aussi contribuer à la décohérence et à la relaxation. Cet effet relativiste intrinsèque au matériau, couple en effet le spin des électrons à leur mouvement orbital, donc aux champs électriques. Il s'interprète de façon semi-classique comme l'effet d'un champ magnétique produit par les noyaux en mouvement dans le référentiel de l'électron sur son spin (voir chapitre 2). Le couplage spin-orbite offre néanmoins également des opportunités de manipulation électrique des qubits de spin (voir 1.3.2).

1.2 Silicium

Le silicium, un des matériaux les plus répandus en microélectronique classique, est à priori un excellent matériau hôte pour accueillir un qubit de spin. Ce semiconducteur est composé d'un isotope naturel majoritaire (^{28}Si) ne présentant pas de spin nucléaire, et seul l'isotope ^{29}Si , présent en faible quantité dans la nature (5 %), en porte un [22]. Ainsi la décohérence entraînée par le bain environnement de spin nucléaires des atomes de silicium est faible. De plus, il peut être isotopiquement purifié en ^{28}Si , ce qui allonge drastiquement la durée de vie des qubits silicium [23]. Par la suite nous détaillerons la structure de bandes et les propriétés du silicium, puis nous présentons les différentes implémentations

des qubits de spin dans le silicium.

1.2.1 Cristal de silicium

Le silicium est un matériau semiconducteur de structure cristallographique de type diamant. La figure 1.6 a) représente la maille conventionnelle cubique à faces centrées du silicium, de coté $a_0 = 0.543 \text{ nm}$, et définit les axes cristallographiques $x = [100]$, $y = [010]$, et $z = [001]$. La maille primitive se compose de deux atomes de silicium : un premier atome en $(0, 0, 0)$, et un second en $a_0(x + y + z)/4$. Les vecteurs de la maille primitive du réseau direct ne sont pas orthogonaux entre eux, et sont $\mathbf{a}_1 = a_0(y + z)/2$, $\mathbf{a}_2 = a_0(z + x)/2$, et $\mathbf{a}_3 = a_0(x + y)/2$. Ils sont représentés sur la figure 1.6 b).

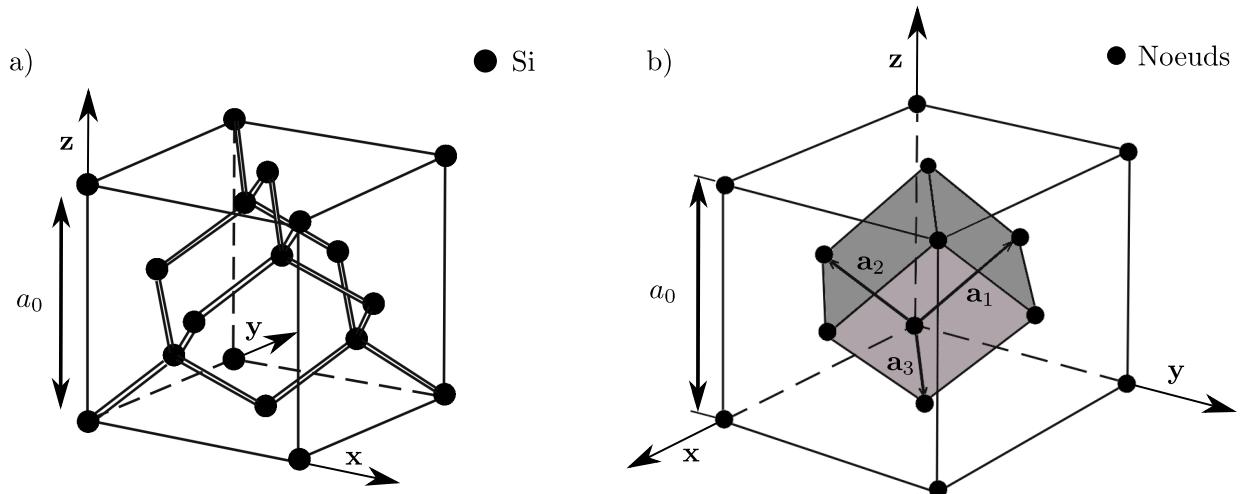


FIGURE 1.6 – a) Maille conventionnelle du silicium. Les axes du cristal sont $x = [100]$, $y = [010]$, $z = [001]$. La structure est de type diamant; structure cubique à faces centrées ayant deux atomes de silicium par maille primitive positionnés en $(0, 0, 0)$ et en $a_0(x + y + z)/4$. Les doubles traits montrent les liaisons entre les différents atomes de silicium. b) Réseau de Bravais cubique faces centrées associé à la maille du silicium. Les vecteurs de la maille primitive sont $\mathbf{a}_1 = a_0(y + z)/2$, $\mathbf{a}_2 = a_0(z + x)/2$, et $\mathbf{a}_3 = a_0(x + y)/2$ où $a_0 = 0.543 \text{ nm}$ est le paramètre de maille du silicium. Adaptés de la référence [24].

Le réseau réciproque du silicium est de structure cubique centré de paramètre de maille $4\pi/a_0$. Nous repérons les vecteurs d'onde dans les axes cristallographiques $\mathbf{k}_x = [100]$, $\mathbf{k}_y = [010]$, $\mathbf{k}_z = [001]$. La première zone de Brillouin est un octaèdre tronqué (voir figure 1.7) ayant pour centre le point Γ . Les points X $[2\pi/a_0 \mathbf{k}_x]$ et L $[\pi/a_0(\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y + \mathbf{k}_z)]$ sont des points particuliers de bord de zone auxquels nous ferons référence plus tard.

1.2.2 Structure de bandes du silicium

La figure 1.8 représente la structure de bandes du silicium. Elle comporte, comme pour tous les semiconducteurs, une bande de valence et une bande de conduction séparées par une bande interdite. Le maximum de la bande de valence est situé en Γ comme pour tous les semiconducteurs conventionnels. Une des particularités du silicium est sa bande interdite indirecte (c'est à dire que le minimum de la bande de conduction se situe à $\mathbf{k} \neq 0$). Nous allons discuter brièvement la structure de la bande de conduction puis celle de la bande de valence.

Bande de conduction

Le minimum de la bande de conduction du silicium se situe le long le chemin $\Gamma \rightarrow X$ à une distance $k_0 \sim 0.85 \cdot 2\pi/a_0$ du point Γ . Compte tenu de la symétrie de la zone Brillouin [voir figure 1.7], il y a

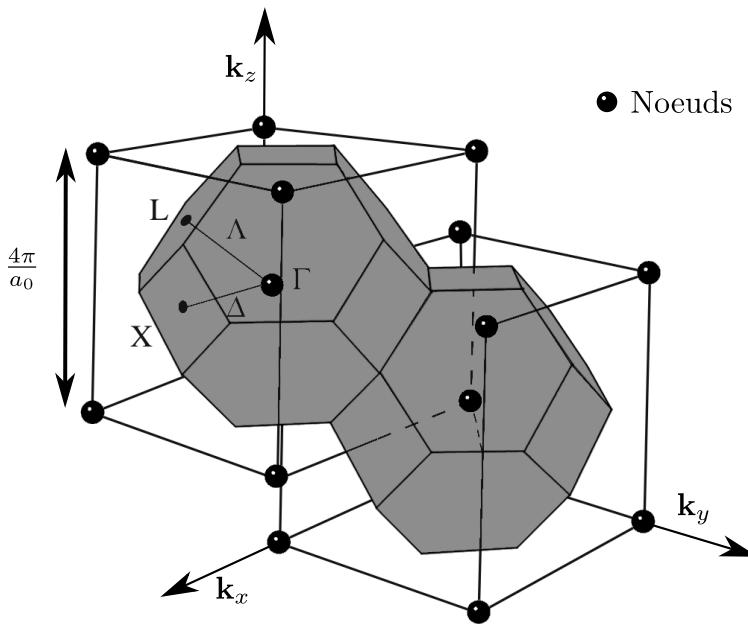


FIGURE 1.7 – Réseau réciproque cubique centré de paramètre de maille $4\pi/a_0$ et première zone de Brillouin (octaèdre tronqué) du réseau réel cubique à faces centrées. Γ est le centre de zone. X [$2\pi/a_0 \mathbf{k}_x$] et L [$\pi/a_0(\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y + \mathbf{k}_z)$] sont des points en bord de zone. $a_0 = 0.543$ nm pour le silicium. Adapté de la référence [24].

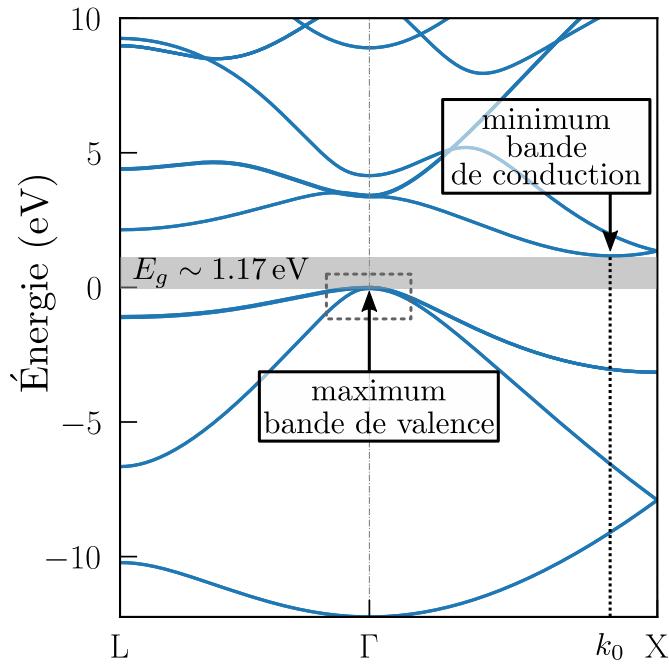


FIGURE 1.8 – Structure de bandes du silicium. Cette structure est tracée le long du chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$ de la première zone de Brillouin. Le maximum de la bande de valence se situe en Γ (l'énergie à ce point est nulle par convention). Le minimum de la bande de conduction se situe sur le chemin $\Gamma \rightarrow X$ à une distance $k_0 = 0.85 \cdot 2\pi/a_0$ du point Γ . La bande interdite du silicium $E_g = 1.17$ eV à $T = 0$ K [25] est donc indirecte. La zone rectangulaire délimitée par des pointillés est agrandie dans la figure 1.10. La structure de bandes est calculée avec une méthode de liaisons fortes $sp^3d^5s^*$ par le code TB_Sim du CEA.

six points équivalents au point X . Le minimum de la bande de conduction est donc six fois dégénérés. Ces six vallées sont notées $\{\pm X, \pm Y, \pm Z\}$, et correspondent respectivement aux minimums présents en $\pm k_0 \mathbf{k}_x, \pm k_0 \mathbf{k}_y, \pm k_0 \mathbf{k}_z$ (voir figure 1.9)

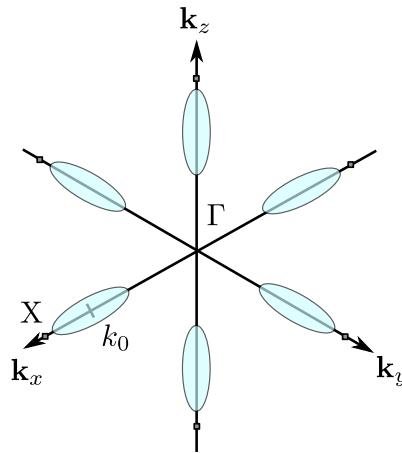


FIGURE 1.9 – Six minima d'énergie équivalents dans la bande de conduction du silicium massif. Les surfaces de niveaux dans l'espace réciproque sont des ellipsoïdes centrées en $k_0 = 0.85 \cdot 2\pi/a_0$ sur chaque axe $\pm k_x, \pm k_y$ et $\pm k_z$.

Autour de ces minima, la structure de bandes peut être décrite par une théorie de masse effective [26] où, par exemple, l'énergie E associée aux vallées $\pm X$ s'écrit :

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_{||}}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}}(k_y^2 + k_z^2), \quad (1.10)$$

où $m_{||} = 0.92m_0$ correspond à la masse effective "longitudinale" d'un électron selon l'axe x , $m_{\perp} = 0.19m_0$ à la masse effective "transverse" d'un électron selon les axes y et z , et m_0 est la masse d'un électron libre. Ces masses effectives résultent du couplage entre la bande de conduction et les bandes éloignées [26]. Compte tenu de l'expression de l'énergie (1.10), et de l'anisotropie des masses, les surfaces d'énergie constante dans la première zone de Brillouin sont des ellipsoïdes centrées sur chaque minimum et dont le grand axe est aligné selon le vecteur d'onde k_0 correspondant (voir la figure 1.9).

Dans les nanostructures, le confinement structural lève la dégénérescence des vallées. Si la direction de confinement est $z = [001]$ par exemple, alors les deux états de vallées de plus basse énergies sont $\pm Z$. La dégénérescence résiduelle entre les vallées $\pm Z$ est en général levée de quelques dizaines de μeV à quelque meV par les champs électriques à l'interface Si/SiO₂. La séparation entre les vallées $\pm Z$ peut donc être comparable à l'énergie Zeeman (1.4). Ainsi, le degré de liberté "vallée" peut être limitant puisqu'il est parfois difficile d'isoler proprement les deux états de spin du qubit des excitations de vallées. Cependant, le couplage spin-orbite est faible dans la bande de conduction, et limite donc la décohérence, mais aussi les opportunités de manipuler électriquement le spin d'un électron.

Bandes de valence

Précédemment, nous avons mentionné que le maximum de la bande de valence est atteint en Γ . En ce point, cette bande est six fois dégénérée en l'absence de couplage spin-orbite (les fonctions de Bloch étant en première approximation des combinaisons liantes des orbitales $3p_x$, $3p_y$, et $3p_z$ du silicium toutes équivalentes dans la structure cubique). En prenant en compte le couplage spin-orbite, elle se sépare en deux bandes dégénérées et une bande plus profonde distante de $\Delta_{so} \sim 44 \text{ meV}$. Ces deux premières bandes se nomment trous lourds et trous légers, et la troisième se nomme bande de split off. La figure 1.10 représente ces différentes bandes. Les bandes de valence peuvent être décrites autour de Γ en utilisant des méthodes $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ qui sont des généralisations de la masse effective [éq. 1.10]. Le chapitre 2 est consacré à ces méthodes. À l'inverse de la bande de conduction, le couplage spin-orbite est fort dans la bande de valence. Au cours de cette thèse, nous allons montrer comment exploiter ce couplage pour manipuler électriquement le spin d'un trou.

Certaines des propriétés du silicium sont exploitées pour définir des qubits de spin. Par la suite, nous allons discuter des différents qubits de spin qui ont été implémentés dans le silicium.

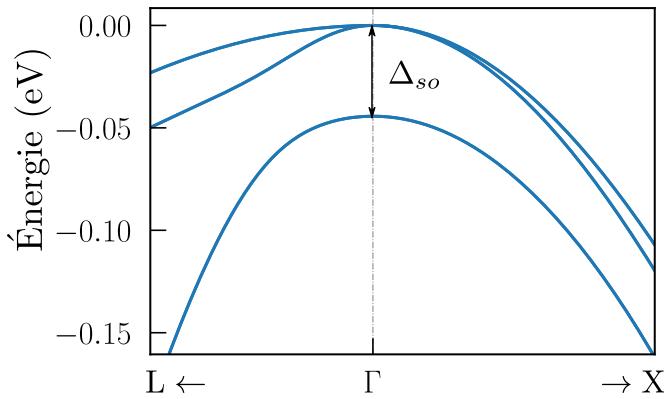


FIGURE 1.10 – Structure du maximum des bandes de valence du silicium. Cette figure est un agrandissement de l'encadré en pointillés de la figure 1.8. Nous notons $\rightarrow X$ la direction vers le point X (idem avec le point L).

1.3 Qubit de spin silicium

De façon similaire aux dispositifs basés sur des hétérostructures GaAs/AlGaAs décrits dans le paragraphe 1.1.4, des boîtes quantiques peuvent être obtenues par déplétion de charges à partir d'un gaz 2D d'électrons dans des hétérostructures Si/SiGe [27, 28]. Là encore, la manipulation de l'état d'un qubit a été démontrée dans ces systèmes avec des temps de cohérences T_2 de deux ordres de grandeurs plus grand que ceux dans les hétérostructures GaAs/AlGaAs [28] compte tenue de la faible interaction hyperfine du silicium avec le spin du qubit.

1.3.1 Manipulation magnétique de spin

Dans les années 2010, une équipe australienne à Sydney (UNSW pour *University of New South Wales*) a démontré l'implémentation d'un qubit de spin à partir d'un électron lié à un donneur de phosphore implanté dans un substrat de silicium [29, 30]. Dans ces expériences, le donneur de phosphore et un électron sont couplés à un transistor à un électron (SET pour *Single Electron Transistor*) servant à la fois de détecteur de charge pour la mesure du spin et de réservoir d'électrons. La figure 1.11 a) représente un donneur implanté intentionnellement dans un substrat de silicium. Un champ magnétique B_0 est appliqué au dispositif, ce qui permet de séparer les deux états de spin de l'électron. L'état de spin électronique peut être mesuré en positionnant le potentiel chimique du SET, situé à proximité du donneur, entre les deux niveaux " \uparrow " et " \downarrow " du qubit [voir figure 1.11 b)]. Le courant à travers le SET dépend de son environnement électrostatique, et, en particulier, de l'occupation du donneur. La figure 1.11 b) représente ce courant source-drain I_{SET} en fonction de l'état de spin du qubit où seul l'électron " \uparrow " sur le donneur peut transiter vers le SET, entraînant un pic de courant qui perdure jusqu'à ce qu'un nouvel électron se lie au donneur. Dans ce système, une ligne de courant ESR permet de créer un champ magnétique ac qui, en résonance, entraîne des rotations de spin. Aussi des oscillations de Rabi ont été démontrées dans ce dispositif.

Cependant, il est difficile de contrôler des qubits individuellement avec un champ magnétique ac (ce champ étant généralement non local). De plus, la production de ce champ oscillant nécessite la présence d'une ligne de courant "volumineuse" pour le contrôle d'un seul spin. Cette ligne peut entre autres dissiper une certaine quantité de chaleur au voisinage du qubit, ce qui dégrade ses propriétés. À l'opposé, un champ électrique ac local est facilement obtenu en faisant varier les tensions de grilles ciblant le spin à manipuler. Ce champ électrique ac peut engendrer des oscillations de spins via une interaction spin-orbite [31] ou via un gradient de champ magnétique [27, 32, 33]. La manipulation électrique offre donc des solutions intéressantes pour le contrôle d'un grand nombre de qubits sur une puce.

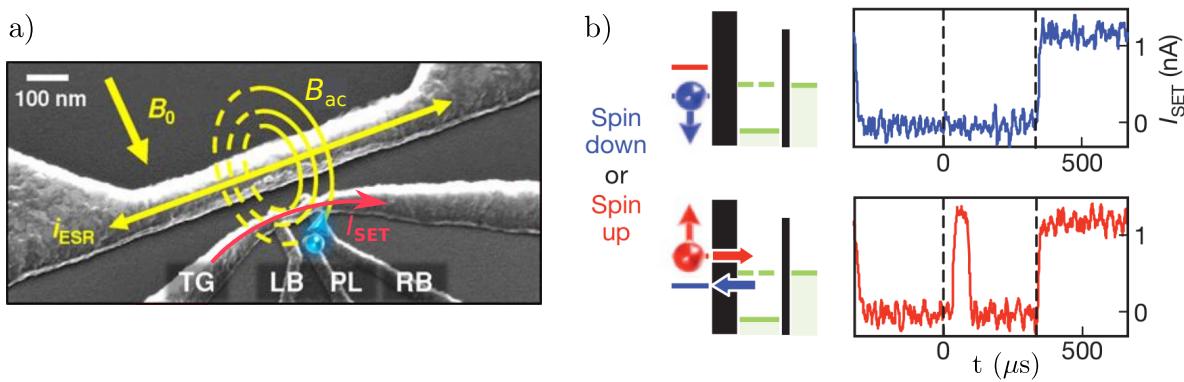


FIGURE 1.11 – a) Dispositif implémentant un électron lié à un donneur de phosphore à proximité d'un SET dans un substrat de silicium. Une ligne de courant permet de générer un champ magnétique ac pour manipuler l'état du qubit à la résonance. Le courant source-drain à travers le SET détecte le spin du qubit par l'intermédiaire d'une conversion spin-charge. Adapté de la référence [29]. b) Schéma des niveaux d'énergie du qubit et du SET. L'état du qubit peut être mesuré en positionnant le potentiel chimique du SET entre les deux niveaux d'énergie " \uparrow " et " \downarrow " du qubit. Le courant source-drain I_{SET} montre un pic lors de la détection d'un spin " \uparrow ". Tiré de la référence [30].

1.3.2 Manipulation électrique de spin

Le groupe japonais de Tarucha (CEMS pour *Center for Emergent Matter Science*) a été un des groupes de recherche à avoir réalisé un qubit de spin dont l'état est manipulé par un champ électrique oscillant [32]. Ce qubit, défini dans des hétérostructures GaAs/AlGaAs, est soumis à un gradient de champ magnétique. Typiquement, un champ électrique oscillant vient déplacer un électron dans ce gradient. Dans son référentiel, l'électron ressent un champ magnétique oscillant, ce qui entraîne la rotation de son spin.

Le groupe de l'université de Delft a adopté cette méthode de manipulation électrique dans des hétérostructures Si/SiGe en utilisant un micro-aimant pour générer le gradient de champ magnétique [34]. Ce groupe a montré des temps de cohérence T_2 du qubit de spin de plusieurs centaines de nanosecondes. La figure 1.12 montre le dispositif utilisé qui se compose de grilles définissant deux boîtes quantiques dans un gaz 2D d'électrons dans des hétérostructures Si/SiGe. Les grilles, à proximité des boîtes quantiques sont également utilisées pour contrôler électriquement le qubit.

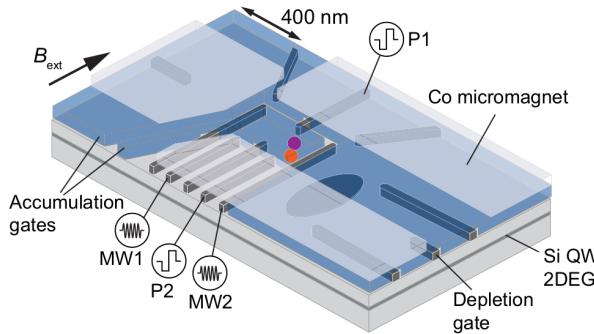


FIGURE 1.12 – Schéma d'un dispositif formant deux boîtes quantiques dans un gradient de champ magnétique dans des hétérostructures Si/SiGe. Tiré de la référence [27].

Une des idées des groupes du CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives) a été de s'affranchir du micro-aimant qui crée le gradient de champ magnétique en exploitant le couplage spin-orbite intrinsèque du silicium. Bien que ce couplage soit faible dans la bande de conduction, la résonance électrique dipôle-spin (EDSR pour *Electric Dipole Spin Resonance*) a été démontrée expérimentalement [35] et théoriquement [36] dans des dispositifs d'électrons dans des nanofils de silicium.

cium. Les compétences du CEA pour élaborer des transistors classiques à partir des technologies CMOS (*Complementary Metal Oxyde Semiconductor*) ont permis d'en décliner des versions quantiques. Un dispositif typique est représenté dans la figure 1.13. Le système se compose d'un nanofil de silicium connecté à une source et à un drain jouant le rôle de réservoir d'électrons. Deux grilles métalliques positionnées au dessus du nanofil de silicium localisent un électron sous chacune d'elles. Sous champ magnétique, le qubit est défini par le spin d'un des deux électrons, l'autre servant de filtre de spin pour la conversion spin-charge-courant via le blocage de Pauli (voir chapitre 3).

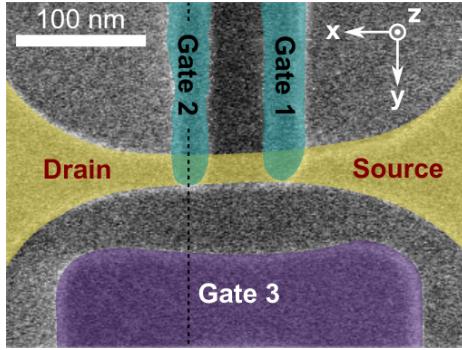


FIGURE 1.13 – Nanofil de silicium connecté à une source et à un drain surplombé par deux grilles métalliques attirant un électron sous chacune d'elles. Tiré de la référence [35].

Cependant, l'interaction spin-orbite dans la bande de conduction est plus faible que celle dans la bande de valence. De ce fait, les trous sont plus faciles à manipuler électriquement dans le silicium ou le germanium [37, 38] que les électrons. Ces qubits, manipulés électriquement en tirant parti de l'interaction spin-orbite sont appelés qubits spin-orbite. Des qubits spin-orbite de trou ont été implémentés récemment au CEA dans des dispositifs CMOS [39, 40, 41, 42]. Un exemple de dispositif CMOS de trous est représenté dans la figure 1.14, où, typiquement, les grilles sont polarisées pour localiser des trous dans un nanofil de silicium. Comme nous allons le détailler dans le chapitre 3, ce système montre une forte dépendance des facteurs gyromagnétiques avec la polarisation des grilles [39], et une forte anisotropie de la fréquence de Rabi et des facteurs gyromagnétiques avec l'orientation du champ magnétique statique [41].

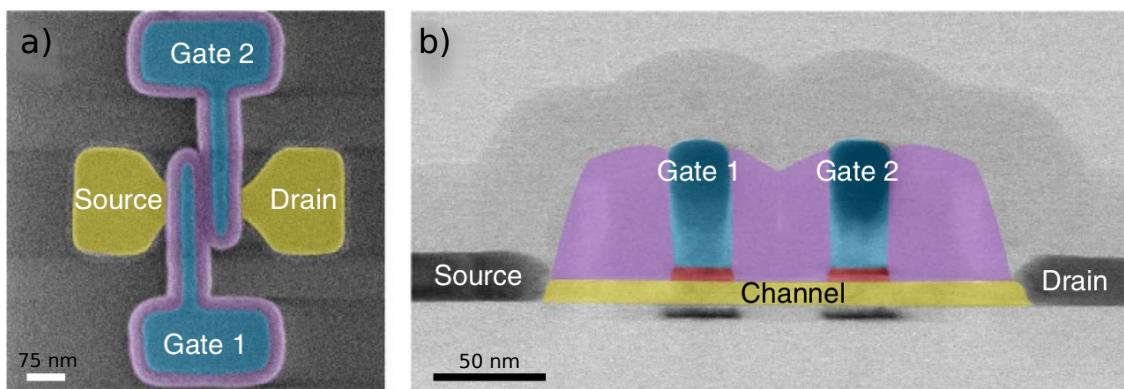


FIGURE 1.14 – Nanofil de silicium connecté à une source et à un drain surplombé par deux grilles métalliques attirant un trou sous chacune d'elles. La source et le drain sont des réservoirs de trous. a) Vue du dessus. b) Vue latérale. Tiré de la référence [40].

Dans ces dispositifs, le spin du qubit peut être lu par plusieurs techniques. Ces techniques se basent sur le blocage de Pauli pour la détection de la transition de charge d'une boîte à l'autre qui dépend du spin. En effet, la transition d'un trou d'une des deux boîtes vers l'autre sur une même orbitale n'est pas permise si les spins de chaque boîte sont identiques : le principe d'exclusion de Pauli stipule que deux trous sur une même orbitale doivent posséder un spin différent. La première technique consiste

à mesurer le courant à travers ces boites. En pratique, ce courant est un courant moyen sur un grand nombre de transition de charge (voir chapitre 3). Ensuite, la seconde technique est une technique de réflectométrie [42]. Elle consiste à coupler un qubit à une boite de mesure qui est contrôlée par une grille connectée à un circuit radio-fréquence extérieur. Le signal réfléchi sur cette grille peut varier en amplitude et en phase. Ce changement de phase dépend de la capacité quantique de cette grille, et en particulier, de l'environnement électrostatique de la boite quantique de mesure. Ainsi, l'état de spin peut être détecté par un changement de phase du signal lors de la transition d'un trou d'une boite à l'autre (qui peut être bloquée par le principe d'exclusion de Pauli et dépendre du spin des trous). Cette technique permet en principe de détecter la transition d'un seul trou (*single-shot readout* en anglais).

1.4 Conclusions

Depuis la proposition de Loss et Di Vincenzo [15], plusieurs groupes de recherche à travers le monde ont implémenté des qubits de spin dans des semiconducteurs. Les premières manipulations magnétiques d'un qubit de spin ont été réalisées par l'équipe de Delft dans des hétérostructures GaAs où des oscillations cohérentes de spin ont été mesurées. Cependant le temps de cohérence de ce système est court à cause de l'interaction entre les spins nucléaires des atomes du matériau hôte et le spin du qubit. Ainsi, un des choix possibles pour limiter cette interaction est d'utiliser le silicium comme matériau hôte. En effet, le silicium naturel se compose à plus de 90% d'un isotope ne portant pas de spin nucléaire, ce qui entraîne une bien plus faible interaction hyperfine que dans GaAs/AlGaAs, où tous les atomes en portent. Le silicium peut aussi être purifié isotopiquement pour diminuer cette interaction et accroître encore la durée de vie du qubit. L'équipe de l'UNSW a d'abord montré le contrôle magnétique d'un spin d'un électron lié à un donneur de phosphore implanté dans un substrat de silicium. Cependant, il est préférable de manipuler électriquement l'état d'un qubit dans la perspective de concevoir des puces comportant un grand nombre de qubits. Le groupe de Delft a ainsi montré des oscillations cohérentes de spin engendrées par un champ électrique oscillant, dans des hétérostructures Si/SiGe dans un gradient de champ magnétique. Ce couplage spin-orbite artificiel créé par le gradient de champ magnétique nécessite cependant la présence d'un micro-aimant à proximité du qubit. Les compétences du CEA a élaborer des transistors classiques à partir des technologies CMOS leur ont permis de construire des qubits de spin basés sur cette technologie. En particulier, l'équipe du CEA a démontré la manipulation électrique du spin d'un trou dans un nanofil de silicium via le couplage spin-orbite intrinsèque du matériau.

1.5 Objectifs de la thèse

Dans ce manuscrit, nous modélisons un qubit spin-orbite de trou similaire aux dispositifs CMOS du CEA pour comprendre la physique et prédire le comportement de ce type de dispositif, afin d'optimiser ses performances, et en particulier, d'améliorer la vitesse de manipulation du spin. Ainsi, ce manuscrit porte sur la modélisation de la manipulation électrique des qubits de trou dans le silicium.

La manuscrit se construit comme suit. Tous d'abord, le chapitre 2 discute de la méthode $k \cdot p$ décrivant, en particulier, le sommet des bandes de valence dans des matériaux massifs de type diamant tels que le silicium ou le germanium. Nous détaillons l'impact du couplage spin-orbite sur les bandes de valence. Ensuite, nous discutons de l'approximation des fonctions enveloppes pour décrire une nanostructure, et de l'effet du champ magnétique sur les fonctions d'ondes. Puis nous présentons le fonctionnement du code numérique utilisé aux chapitres 4 et 6, basé sur la théorie précédemment décrite. Ensuite, le chapitre 3 démontre expérimentalement la manipulation cohérente de spin de trou dans des dispositifs silicium CMOS réalisés au CEA. Il introduit, en particulier, un formalisme de matrices gyro-magnétiques permettant d'interpréter les résultats expérimentaux, et d'extraire les mécanismes qui entretiennent les oscillations de Rabi. Le chapitre 4 présente différents formalismes de calculs de la fréquence de Rabi et souligne l'efficacité des calculs numériques avec le formalisme de la matrice gyro-magnétique. Ensuite, il discute l'effet des symétries dans ce dernier. Nous détaillons, en particulier,

l'impact de plans miroirs d'un qubit sur l'anisotropie de sa fréquence de Larmor et de sa fréquence de Rabi. Nous terminons ce chapitre par l'application de ces différents formalismes et par l'étude des symétries d'un qubit spin-orbite de trou sur SOI. Nous calculons numériquement la fréquence de Rabi, comparons les différents formalismes entre eux, et interprétons les observations numériques telles que la quasi-extinction des oscillations de Rabi pour une polarisation électrique particulière ou pour des orientations de champ magnétique particulières. Finalement nous discutons des ingrédients manquants pour décrire quantitativement le comportement du qubit expérimental discuté au chapitre 3. Pour continuer, le chapitre 5 introduit un modèle simple de boîte quantique rectangulaire dans un matériau semi-conducteur, dont les hypothèses sont basées sur les conclusions du précédent chapitre. Il permet d'expliciter la dépendance de la fréquence de Rabi avec les paramètres et l'orientation cristalline du matériau hôte. Nous montrons, en particulier, que le silicium est un matériau très bien adapté à la réalisation de ce type de qubit grâce à ses bandes de valence très anisotropes. Ensuite, dans le chapitre 6 nous établissons l'expression des temps de relaxation d'un qubit spin-orbite dus aux processus à un phonon, et nous l'appliquons au dispositif étudié numériquement au chapitre 4. Finalement, le chapitre 7 conclut, et mentionne les perspectives de cette thèse.

Chapitre 2

Méthodes théoriques et numériques

Ce chapitre introduit la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes qui permet de décrire la structure de bandes de valence d'un semiconducteur massif au voisinage du point Γ . Nous introduisons les paramètres de Luttinger qui décrivent l'anisotropie de cette structure de bandes et résultent du traitement en perturbation d'un terme $\propto \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ couplant les fonctions de Bloch des bandes de valence à celles des bandes de conductions éloignées. Nous montrons comment le couplage spin-orbite sépare les bandes de valence en trous "lourds", "légers" et "split-off". Ensuite nous introduisons le formalisme des fonctions enveloppes qui permet de décrire les fonctions d'ondes des bandes de valence dans des potentiels lentement variables. Puis nous discutons l'effet du champ magnétique sur ces fonctions enveloppes, et sur les fonctions de Bloch. Dans un second temps, nous présentons le code TB_Sim développé au CEA Grenoble qui permet de calculer les propriétés électroniques de nanostructures de semiconducteurs (et en particulier de qubits de silicium) dans différentes approximations dont la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes pour les trous. Nous décrivons brièvement son fonctionnement général en nous appuyant sur un exemple de dispositif pouvant être étudié avec ce code.

2.1 Description empirique : la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

La méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ permet de décrire la structure de bandes d'une grande variété de semiconducteurs en se basant sur une approche perturbative autour d'un vecteur d'onde particulier. Dans toute cette partie, nous allons discuter le cas d'un semiconducteur massif dont la structure cristallographique est de type diamant. Nous allons développer la structure de bandes au voisinage de $\mathbf{k} = 0$ mais la méthode peut être appliquée autour de n'importe quel vecteur d'onde [43].

Dans un premier temps, nous considérons un hamiltonien \hat{H}_0 à une particule sans spin :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_c(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

où $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ est l'opérateur impulsion, et $V_c(\mathbf{r})$ est le potentiel créé par les noyaux du cristal. Ce potentiel a la même période que le cristal, i.e. $V_c(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V_c(\mathbf{r})$ pour tout vecteur \mathbf{R} du réseau de Bravais. Ainsi, d'après le théorème de Bloch, les états propres $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de l'hamiltonien (2.1) prennent la forme d'ondes de Bloch :

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

où n est un indice de bandes, \mathbf{k} est un vecteur d'onde, et pour tout point de l'espace \mathbf{r} , nous avons $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. En injectant cette expression dans l'équation aux valeurs propres pour les énergies $E_{n\mathbf{k}}$ [$\hat{H}_0 \Psi_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}$], nous obtenons une nouvelle équation pour les fonctions de Bloch $u_{n\mathbf{k}}$:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

avec l'hamiltonien $\hat{H}(\mathbf{k})$ dépendant du vecteur d'onde \mathbf{k} :

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \hat{H}_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0}. \quad (2.4)$$

Nous pouvons voir apparaître un terme proportionnel à $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ qui donne son nom à la méthode. En pratique, nous pouvons écrire une représentation matricielle de l'hamiltonien $H(\mathbf{k})$ dans la base $\{u_{n0}\}$ des fonctions de Bloch en Γ (supposées connues) :

$$H(\mathbf{k}) = H_0 + E_c(\mathbf{k}^2) + H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}, \quad (2.5)$$

avec $H_0 = \text{diag}(E_0, E_1, \dots)$ et $E_n = E_{n0}$ les énergies propres de H_0 (elles aussi supposées connues), $E_c(\mathbf{k}^2) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \cdot \mathbb{1}$ où $\mathbb{1}$ est la matrice identité, et $(H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}})_{ij} = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \langle u_{i0} | \mathbf{p} | u_{j0} \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \langle i | \mathbf{p} | j \rangle$. En diagonalisant exactement l'hamiltonien $H(\mathbf{k})$ ci-dessus, nous sommes en mesure d'établir la structure de bandes du matériau pour tout vecteur d'onde \mathbf{k} .

Par la suite nous allons étudier la structure de bandes au voisinage du maximum des bandes de valence au point Γ . Ainsi, les vecteurs d'onde \mathbf{k} considérés sont petits, ce qui permet de traiter le terme $H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}$ comme une perturbation. Nous allons étudier la structure de bandes pour des particules sans spin, puis nous introduirons le couplage spin-orbite, et nous verrons l'impact d'un tel couplage sur la structure de bandes.

2.1.1 Bandes de valence sans spin

Nous considérons le sommet des bandes de valence sans spin au point Γ . En ce point les états sont trois fois dégénérés, et nous notons $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\} = \{u_{n0}\}$ ces trois états (cette notation vient du fait que ces états ont des symétries similaires aux orbitales p_x, p_y , et p_z respectivement). Nous pouvons tout d'abord écrire la matrice $H(\mathbf{k})$ dans la base $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$. Toutefois, le terme $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ n'a aucun effet dans cette base ; compte tenu de la symétrie d'inversion du cristal tous les termes $\propto \mathbf{k} \cdot \langle i | \mathbf{p} | j \rangle$ sont nuls pour tout i , et j parcourant $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$. Ainsi, la dispersion des bandes obtenue est positive, ce qui n'est pas correct. Il est donc nécessaire de prendre en compte le couplage aux bandes éloignées. Pour faire cela deux solutions s'offrent à nous.

La première consiste à travailler dans une base plus grande contenant les états $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ mais aussi des états des bandes éloignées : nous parlons alors de méthodes $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 8, 15, ou 30 bandes [26], qui sont utilisées pour décrire la structure de bandes sur des larges gammes d'énergies, mais qui sont complexes à manipuler.

La deuxième solution, que nous allons utiliser dans cette thèse, consiste à garder la base dégénérée $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ en incorporant les effets des bandes éloignées en perturbation dans cette même base (transformation de Lowdin [44]) : il est pertinent de faire cela pour décrire localement la structure de bandes autour du point Γ (où se joue la physique que nous étudions). Par conséquent en incorporant ces corrections, l'hamiltonien effectif s'écrit, à l'ordre le plus bas en \mathbf{k} , dans la base $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{XX} & H_{XY} & H_{XZ} \\ H_{YX} & H_{YY} & H_{YZ} \\ H_{ZX} & H_{ZY} & H_{ZZ} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

où la matrice $H(\mathbf{k})$ a pour éléments :

$$H_{ij} = \sum_{\alpha, \beta} k_\alpha k_\beta H_{ij}^{\alpha\beta}, \quad (2.7)$$

avec

$$H_{ij}^{\alpha\beta} = \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_l \frac{\langle i | p_\alpha | l \rangle \langle l | p_\beta | j \rangle}{E_v - E_l} \right]. \quad (2.8)$$

Les indices i, j parcourent les états $\{|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ d'énergie E_v , l'indice l parcourt les fonctions de Bloch des bandes éloignées (i.e. autres que $|X\rangle, |Y\rangle$, et $|Z\rangle$) d'énergie E_l , et $p_\alpha = -i\hbar\partial_\alpha$.

Ensuite, l'idée est d'utiliser les symétries des éléments de $H(\mathbf{k})$, pour simplifier sa forme [45]. Nous pouvons ainsi identifier quels éléments $\langle i | p_\alpha | l \rangle$ sont nuls et lesquels sont identiques. Par conséquent

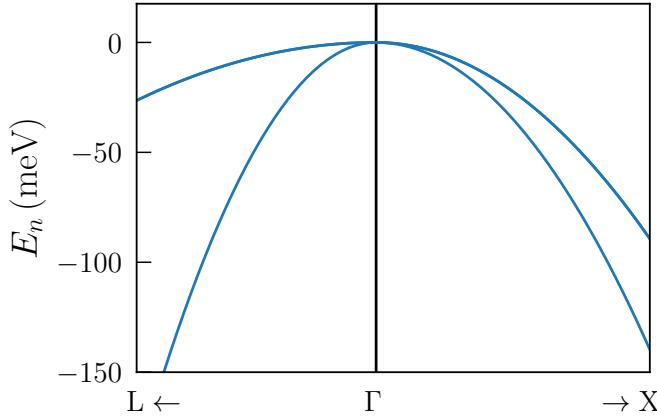


FIGURE 2.1 – Structure de bandes du silicium en l’absence de couplage spin-orbite suivant le chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$ autour de Γ , avec $L = -5.641$, $M = -3.607$, $N = -8.676$ en unité de $\hbar^2/(2m_0)$ [46, 47]. Les deux bandes de plus hautes énergies sont deux fois dégénérées sur ce chemin. Au point Γ , les états sont trois fois dégénérés (six fois avec le spin). Nous notons $\rightarrow X$ la direction vers le point X (idem avec le point L). Environ 7% de la première zone de Brillouin est représentée.

l’hamiltonien à trois bandes $H_{3\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{k}) \equiv H(\mathbf{k})$ prend la forme [45] :

$$H_{3\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_xk_y & Nk_xk_z \\ Nk_yk_x & Lk_y^2 + M(k_z^2 + k_x^2) & Nk_yk_z \\ Nk_zk_x & Nk_zk_y & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

où les coefficients L , M , et N peuvent être exprimés en fonction des termes de la série en perturbation (voir la référence [45] et l’annexe A pour les détails). En pratique ces coefficients sont ajustés sur des mesures expérimentales des masses des trous [26]. Le vecteur d’onde \mathbf{k} est exprimé dans le système d’axes cristallographiques $\mathbf{x} \parallel [100]$, $\mathbf{y} \parallel [010]$, $\mathbf{z} \parallel [001]$. La figure 2.1 montre la structure de bandes du silicium à partir d’une description $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ trois bandes le long du chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$. Généralement, pour un \mathbf{k} donné non nul, les états sont non dégénérés. Cependant, sur des chemins de hautes symétries, les états peuvent rester dégénérés. Par exemple, deux des trois états sont dégénérés le long du chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$.

2.1.2 Bandes de valence avec couplage spin-orbite

Dans cette partie nous prenons en compte le spin des particules, et en particulier l’effet du couplage spin-orbite. Le couplage spin-orbite est un effet relativiste qui lie le spin d’une particule à son mouvement dans l’espace réel. En effet, un électron orbitant autour de noyaux voit des charges positives en mouvement dans son référentiel. Il perçoit donc un courant dépendant du temps qui induit un champ magnétique agissant directement sur le spin attaché au référentiel de l’électron.

L’hamiltonien de couplage spin-orbite s’obtient à partir de l’équation relativiste de Schrödinger (équation de Dirac), dont le terme dominant s’écrit [48] :

$$\hat{H}_{so} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\nabla}V) \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (2.10)$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sont les matrices de Pauli, et $\boldsymbol{\nabla}V$ est le gradient de l’énergie potentielle électrique (généralement $\boldsymbol{\nabla}V$ devient grand proche des noyaux atomiques). Avec ce nouveau terme, l’hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (2.4) devient :

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \hat{H}_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \hat{H}_{so}, \quad (2.11)$$

où le terme de couplage spin-orbite dépendant du vecteur d'onde \mathbf{k} a été négligé [45]. Ainsi, le couplage spin-orbite intervient à l'ordre zéro en \mathbf{k} via le terme \hat{H}_{so} .

Dans un premier temps, nous allons établir les états au point Γ avec le couplage spin-orbite avant d'introduire l'effet d'un vecteur d'onde non nul.

Couplage spin-orbite au point Γ

Au point Γ , l'équation (2.11) devient :

$$\hat{H}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{so}. \quad (2.12)$$

En introduisant le spin, nous notons la nouvelle base $\{|\alpha\sigma\rangle\}$ où $|\alpha\sigma\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\sigma\rangle$ avec $\alpha \in \{X, Y, Z\}$ les fonctions de Bloch, et $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ le spin de la particule. Le couplage spin-orbite est traité exactement dans cette base. Par des arguments de symétrie sur les différents éléments de la matrice spin-orbite dans cette base, nous pouvons écrire [45] :

$$H_{so} = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

avec Δ_{so} le paramètre caractérisant l'intensité du couplage spin-orbite, qui peut s'écrire en fonction des états de Bloch (voir la référence [48] et l'annexe A pour des détails).

Nous pouvons remarquer que cet hamiltonien peut se mettre sous la forme $H_{so} = \lambda_{so} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, avec \mathbf{L} une représentation matricielle du moment cinétique orbital $l = 1$, \mathbf{S} une représentation matricielle du moment cinétique de spin, et $\lambda_{so} = 2\Delta_{so}/(3\hbar^2)$. Comme $[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L} + \mathbf{S}] = 0$, nous pouvons caractériser les états propres de H_{so} par leur moment cinétique total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Nous pouvons donc introduire la base $\{|j, m_j\rangle\}$, où $j = 1/2$ ou $3/2$ le moment total $[\mathbf{J}^2 |j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle]$ et m_j sa composante le long de \mathbf{z} ¹ $[J_z |j, m_j\rangle = \hbar m_j |j, m_j\rangle, |m_j| < j]$:

$$|3/2, +3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \quad (2.14a)$$

$$|3/2, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[|(X + iY) \downarrow\rangle - 2|Z \uparrow\rangle \right] \quad (2.14b)$$

$$|3/2, -1/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} \left[|(X - iY) \uparrow\rangle + 2|Z \downarrow\rangle \right] \quad (2.14c)$$

$$|3/2, -3/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \quad (2.14d)$$

$$|1/2, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[|(X + iY) \downarrow\rangle + |Z \uparrow\rangle \right] \quad (2.14e)$$

$$|1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[|(X - iY) \uparrow\rangle - |Z \downarrow\rangle \right]. \quad (2.14f)$$

Dans cette même base, l'hamiltonien de couplage spin-orbite est bien diagonal :

$$H'_{so} = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

1. Le choix d'un axe de quantification pour \mathbf{J} est en principe arbitraire. Le choix $\mathbf{z} = [001]$ s'avère pertinent pour les structures que nous allons décrire dans ce manuscrit et qui sont fortement confinées le long de cette axe.

L'effet du couplage spin-orbite est donc de lever la dégénérescence au point Γ : les quatre états de moment cinétique total $j = 3/2$ sont dégénérés à une énergie $\Delta_{so}/3$, et les deux autres états de moment cinétique total $j = 1/2$ sont dégénérés à une énergie $-2\Delta_{so}/3$. Ainsi, la séparation en énergie entre les états de spin total $j = 3/2$ et $j = 1/2$ est Δ_{so} . Les états correspondant à un spin total $j = 1/2$ forment la bande de split-off.

Couplage spin-orbite proche du point Γ ($\mathbf{k} \neq 0$)

Dans la base $\{| \alpha \sigma \rangle\}$, le terme de couplage spin-orbite est traité exactement, et le couplage $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ avec les autres bandes est traité en perturbation à l'ordre deux comme au paragraphe 2.1.1. Donc l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes total est :

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{3\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} & \mathbb{0}_3 \\ \mathbb{0}_3 & H_{3\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} \end{pmatrix} + H_{so}, \quad (2.16)$$

avec $H_{3\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$ défini dans l'équation (2.9), et H_{so} défini dans l'équation (2.13). Dans la base $\{| j, m_j \rangle\}$, cet hamiltonien prend la forme :

$$H_{6\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{k}) = - \begin{pmatrix} P + Q & -S & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}S & -\sqrt{2}R \\ -S^* & P - Q & 0 & R & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P - Q & S & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P + Q & \sqrt{2}R^* & \frac{1}{\sqrt{2}}S^* \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S & \sqrt{2}R & P + \Delta_{so} & 0 \\ -\sqrt{2}R^* & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P + \Delta_{so} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

où les coefficients P, Q, R et S peuvent s'exprimer en fonction des coefficients L, M, N définis dans l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ trois bandes (2.9) (le bloc 4×4 délimité par des pointillés sera discuté plus tard). Il est pertinent d'introduire les paramètres sans dimension de Luttinger $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, tel que :

$$P = P(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.18a)$$

$$Q = Q(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \quad (2.18b)$$

$$R = R(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} (-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y) \quad (2.18c)$$

$$S = S(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z. \quad (2.18d)$$

Ces paramètres de Luttinger peuvent s'exprimer en fonction des coefficients L, M, N :

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 = -\frac{1}{3} (L + 2M) \quad (2.19a)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 = -\frac{1}{6} (L - M) \quad (2.19b)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 = -\frac{1}{6} N. \quad (2.19c)$$

Les paramètres de Luttinger sont donnés pour quelques semiconducteurs dans la table 2.1. Les paramètres γ_2 , et γ_3 caractérisent l'anisotropie des bandes de valence. La figure 2.2 montre la structure de bandes du silicium le long du chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$ avec une description $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes prenant en compte le couplage spin-orbite Δ_{so} .

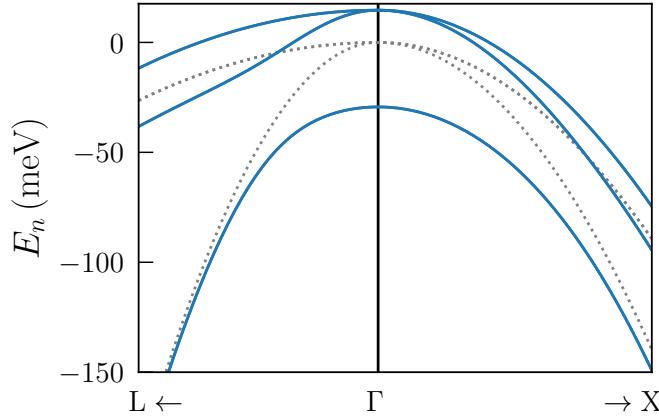


FIGURE 2.2 – Structure de bandes du silicium en présence du couplage spin-orbite (traits pleins), et sans couplage spin-orbite (traits pointillés) le long du chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$. Au point Γ , les états dégénérés sans couplage spin-orbite sont séparés en deux groupes : états quatre fois dégénérés et états deux fois dégénérés. Les paramètres du silicium sont $\gamma_1 = 4.285$, $\gamma_2 = 0.339$, $\gamma_3 = 1.446$ [46][47], et $\Delta_{so} = 0.044$ eV. Nous notons $\rightarrow X$ la direction vers le point X (idem avec le point L). Environ 7% de la première zone de Brillouin est représentée.

	Si	Ge	InP	GaAs	InAs	InSb
Δ_{so} (eV)	0.044	0.29	0.11	0.34	0.41	0.80
γ_1	4.285	13.38	4.95	6.85	20.40	37.10
γ_2	0.339	4.24	1.65	2.10	8.30	16.50
γ_3	1.446	5.69	2.35	2.90	9.10	17.70
$m_z^h (m_0)$	0.277	0.204	0.606	0.377	0.263	0.244
$m_{xy}^h (m_0)$	0.216	0.057	0.152	0.112	0.035	0.019
κ	-0.42	3.41	0.97	1.20	7.60	15.60

TABLE 2.1 – Énergie spin-orbite Δ_{so} dans les bandes de valence, paramètres de Luttinger, masses des trous lourds selon l’axe z [$m_z^h = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$], dans le plan (xy) [$m_{xy}^h = m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$], et paramètre κ [48] pour différents semiconducteurs.

Trous lourds, trous légers

Selon l’hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes (2.17), l’énergie d’un pur état $|3/2, \pm 3/2\rangle$ est $E_h = P + Q$, ou encore :

$$E_h = \frac{\hbar^2}{2m_{xy}^h}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{m_z^h}k_z^2, \quad (2.20)$$

avec $m_{xy}^h = m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$, et $m_z^h = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$. De même, l’énergie d’un pur état $|3/2, \pm 1/2\rangle$ prend une forme similaire avec $m_{xy}^h \rightarrow m_{xy}^l = m_0/(\gamma_1 - \gamma_2)$, et $m_z^h \rightarrow m_z^l = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma_2)$. Ainsi, typiquement $m_z^h > m_z^l$, et par convention nous appelons trous lourds les états $|3/2, \pm 3/2\rangle$, et trous légers les états $|3/2, \pm 1/2\rangle$. Ainsi, Les fonctions de Bloch de trous lourds vont naturellement dominer l’état fondamental de trou des nanostructures fortement confinées le long de $\mathbf{z} = [001]$.

Fort couplage spin-orbite : $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes

Lorsque le couplage spin-orbite Δ_{so} est grand, il est pertinent de ne travailler qu’avec les trous lourds et les trous légers, et de négliger le mélange à la split-off. Dans ce cas, l’hamiltonien qui décrit le

système est le sous bloc 4×4 à l'intersection des 4 premières lignes et colonnes de l'équation (2.17), délimité par des pointillés. Cet hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes sera étudié et détaillé dans le chapitre 5.

2.1.3 Nanostructure : fonctions enveloppes

Dans des nanostructures, lorsque le système est soumis à un potentiel extérieur $U(\mathbf{r})$ lentement variable à l'échelle atomique, il est possible de décomposer la fonction d'onde totale ψ comme une somme de fonctions enveloppes F_n multipliées par des fonctions de Bloch u_{n0} [45] :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n F_n(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

Ce potentiel lentement variable ne couple pas les différentes bandes entre elles, et nous pouvons en général découpler l'action sur les fonctions de Bloch de l'action sur les fonctions enveloppes car celles-ci ont des longueurs caractéristiques très différentes. La figure 2.3 schématise ces différentes longueurs caractéristiques.

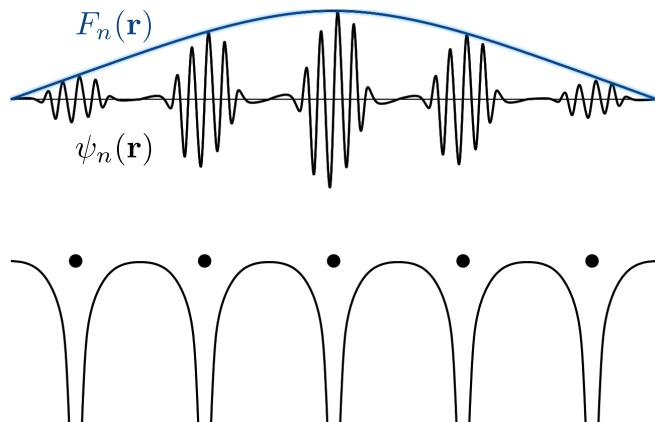


FIGURE 2.3 – Représentation schématique de la fonction d'onde $\psi_n(\mathbf{r}) = F_n(\mathbf{r})u_{n0}(\mathbf{r})$ et de la fonction enveloppe $F_n(\mathbf{r})$. En haut, la fonction enveloppe F_n varie lentement par rapport aux variations de u_{n0} . En bas, le potentiel périodique d'un cristal créé par des noyaux atomiques (cercles noirs). Adapté de la référence [48].

Dans le cas d'une description $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes la fonction d'onde totale peut s'écrire :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{jm_j} F_{jm_j}(\mathbf{r}) \otimes |j, m_j\rangle. \quad (2.22)$$

L'équation de Schrödinger associée à ces fonctions enveloppes est :

$$\left[H_{6\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(-i\nabla) + U(\mathbf{r}) \cdot \mathbb{1}_6 \right] \tilde{F} = E \tilde{F}, \quad (2.23)$$

où $H_{6\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$ est l'hamiltonien (2.17), le vecteur d'onde \mathbf{k} a été remplacé par l'impulsion $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$, $\mathbb{1}_6$ est la matrice identité de taille 6, et \tilde{F} est le vecteur des six fonctions enveloppes des trous lourds, trous légers et de la split-off [$\tilde{F} = (F_{3/2,\pm 3/2}, F_{3/2,\pm 1/2}, F_{1/2,\pm 1/2})$].

En pratique, le potentiel $U(\mathbf{r})$ peut inclure aussi bien les champs électriques appliqués au dispositif que les potentiels de confinement structuraux imposés par les décalages de bandes entre les matériaux, même si ceux-ci ne sont pas habituellement lentement variables au voisinage des interfaces.

2.2 Effet du champ magnétique

Dans cette section, nous établissons l'effet du champ magnétique sur la fonction d'onde d'une nanostructure. Plus précisément, nous détaillons son impact sur les fonctions enveloppes et sur les fonctions de Bloch. Nous verrons que le potentiel vecteur couple les différentes fonctions enveloppes d'une part, et la partie orbitale des fonctions de Bloch d'autre part, et que le champ magnétique agit directement sur le spin physique des fonctions de Bloch.

2.2.1 Effet du potentiel vecteur

Nous allons tout d'abord établir l'effet du potentiel vecteur en Γ sur la partie spatiale de la fonction d'onde (fonctions enveloppes et partie orbitale des fonctions de Bloch). Le potentiel vecteur \mathbf{A} [$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ où \mathbf{B} est le champ magnétique statique et homogène] est habituellement introduit en remplaçant $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}$ ce qui entraîne la non commutativité des composantes de \mathbf{k} . Ainsi, l'idée de Luttinger [49] est de séparer les différents termes $k_\alpha k_\beta$ ($\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$) de l'équation (2.7) en contributions "symétriques" $\{k_\alpha, k_\beta\} = (k_\alpha k_\beta + k_\beta k_\alpha)/2$, et en contributions "antisymétriques" $[k_\alpha, k_\beta] = k_\alpha k_\beta - k_\beta k_\alpha$. La contribution symétrique agit sur les fonctions enveloppes et s'obtient en remplaçant $k_\alpha k_\beta \rightarrow \{k_\alpha, k_\beta\}$ dans les hamiltoniens $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ avant de faire la substitution $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}$ [éqs. (2.9) et (2.17)]. En utilisant la relation $\mathbf{k} \times \mathbf{k} = -ie\mathbf{B}/\hbar$, la contribution antisymétrique fait apparaître le terme :

$$H_A = -(3\kappa + 1)\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad (2.24)$$

où \mathbf{L} est une représentation matricielle du moment cinétique orbital des fonctions de Bloch de nombre quantique $l = 1$, et où κ peut s'exprimer en fonction des termes de la série en perturbation de l'équation (2.8) (voir annexe A), et est donc dépendant du matériau. Cet hamiltonien décrit ainsi l'effet du potentiel vecteur sur les fonctions de Bloch.

2.2.2 Effet Zeeman

L'effet Zeeman est l'action du champ magnétique statique et homogène \mathbf{B} sur les spins des fonctions de Bloch, et l'hamiltonien associé à cet effet peut s'écrire :

$$H_z = \frac{1}{2}g_0\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (2.25)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le vecteur des matrices de Pauli dans la base des spins physiques.

2.2.3 Effet total du champ magnétique sur les fonctions de Bloch

L'hamiltonien total décrivant l'action du champ magnétique sur les fonctions de Bloch est $H_B = H_z + H_A$ avec H_z (respectivement H_A) défini par l'équation (2.25) [respectivement par l'équation (2.24)]. Comme les fonctions de Bloch peuvent s'identifier à des spins ($j = 3/2, j = 1/2$), nous appelons par extension cet hamiltonien l'hamiltonien Zeeman $H_Z \equiv H_B$. Celui-ci peut se mettre sous la forme :

$$H_Z = \mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{K} \quad (2.26)$$

avec $\mathbf{K} = -(3\kappa + 1)\mathbf{L} + 2\mathbf{S}$ en approximant $g_0 \sim 2$. Les matrices de \mathbf{K} dans la base $\{|j, m_j\rangle\}$ sont données en annexe A. Nous négligeons l'effet du terme $\propto q$ de la référence [49]. Par le suite, nous discutons brièvement la réponse des trous lourds et des trous légers au champ magnétique.

Réponse des trous lourds et trous légers au champ magnétique

Dans le sous-espace $j = 3/2$ (trous lourds, trous légers), l'hamiltonien Zeeman (2.26) prend la forme :

$$H_Z = -2\kappa\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{J}, \quad (2.27)$$

où $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ est le moment angulaire total des fonctions de Bloch [49]. Les matrices de \mathbf{J} dans la base $\{|j, m_j\rangle\}$ sont également données en annexe A. Nous pouvons alors établir la réponse gyromagnétique des trous lourds et légers en négligeant dans un premier temps l'action du potentiel vecteur sur les enveloppes.

Trous lourds Dans le sous espace $\{|3/2, \pm 3/2\rangle\}$ (trous lourds), l'hamiltonien (2.27) se réduit à $H_Z = -3\kappa\mu_B B_z \sigma_3$, ce qui se met sous la forme $H_Z = \frac{1}{2}\mu_B {}^t\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{g}_d \cdot \mathbf{B}$ où $\hat{g}_d = \text{diag}(0, 0, 6|\kappa|)$ sont les facteurs gyromagnétiques et ${}^t\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ les matrices de Pauli. Ainsi, les trous lourds répondent exclusivement à la composante z du champ magnétique.

Trous légers Dans le sous espace $\{|3/2, \pm 1/2\rangle\}$ (trous légers), l'hamiltonien (2.27) se réduit, cette fois, à $H_Z = \frac{1}{2}\mu_B {}^t\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{g}_d \cdot \mathbf{B}$ où $\hat{g}_d = \text{diag}(4|\kappa|, 4|\kappa|, 2|\kappa|)$. Ainsi, la réponse des trous légers au champ magnétique est moins anisotrope que celle des trous lourds.

2.3 Physique numérique : dispositif réel

Dans cette partie, nous détaillons l'implémentation numérique de la théorie précédemment décrite. Nous allons présenter le fonctionnement du code TB_Sim développé au CEA (qui préexistait à ma thèse) permettant notamment de calculer la structure de bandes de semiconducteurs avec des méthodes de liaisons fortes et des méthodes $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Ce code permet de simuler différentes structures réelles de qubit semiconducteur, et en particulier des géométries linéaires et des géométries planaires.

2.3.1 Présentation d'une géométrie

Nous introduisons brièvement un exemple de dispositif en géométrie linéaire, tel que modélisé avec ce code. Ce dispositif se compose d'un nano-fil de silicium orienté selon l'axe [110], gravé dans la couche de silicium d'un substrat SOI. Le substrat du silicium massif sous l'oxyde enterré peut servir de grille arrière après dopage. Une grille avant recouvre à moitié le nano-fil. Elle est séparée électriquement du fil par du SiO₂ et du HfO₂. Deux grilles latérales imitent les qubits voisins. L'ensemble est encapsulé dans du Si₃N₄. La figure 2.4 représente un tel dispositif et le système d'axes utilisé ($x = [110]$, $y = [\bar{1}10]$, et $z = [001]$). Cette géométrie (taille du nanofil, épaisseur des oxydes, tensions de grille, ...) sera détaillée au chapitre 4.

Il est important aussi de noter que le code offre la possibilité de construire d'autres géométries et d'autres configurations de grilles et d'oxydes que celles montrées dans cet exemple [50].

2.3.2 Fonctionnement du code TB_Sim

Concrètement, nous voulons établir certaines propriétés du qubit (par exemple la fréquence de Rabi entre deux états). Pour cela, nous devons connaître les états et énergies propres de l'hamiltonien du qubit. Cet hamiltonien, en l'absence de champ magnétique, s'écrit :

$$H = H_{6\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} + U_{\text{struct}}(\mathbf{r}) + U_{\text{elec}}(\mathbf{r}), \quad (2.28)$$

où $H_{6\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}$ est l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes. En se plaçant dans le système d'axes ci-dessus, et en choisissant une phase appropriée pour chaque fonction de Bloch $\{|j, m_j\rangle\}$, l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes

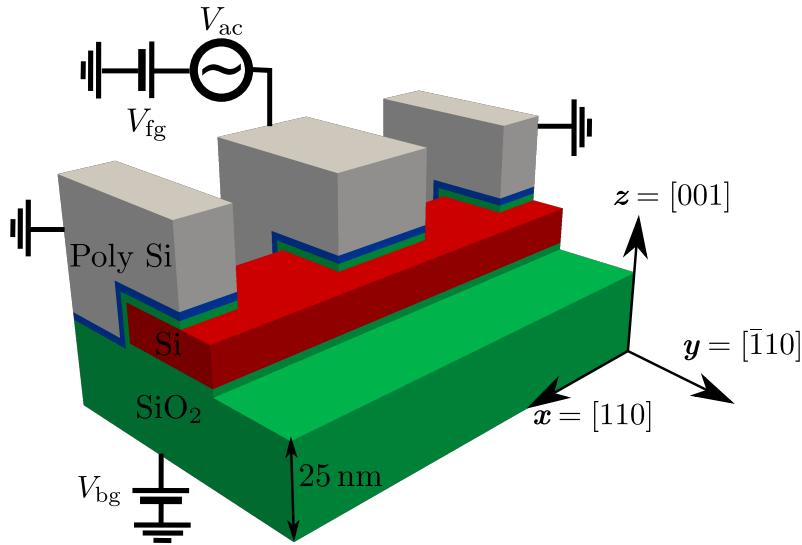


FIGURE 2.4 – Exemple de géométrie pouvant être générée avec le code TB_Sim.

dans le silicium massif [26] prend une forme identique à celui de l'équation (2.17) avec cette fois-ci $R \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [-\gamma_3 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_2 k_x k_y]$ (k_x , k_y et k_z étant les composantes du vecteur d'onde dans les axes $x = [110]$, $y = [1-10]$, et $z = [001]$). L'énergie potentielle de confinement structural U_{struct} est obtenue à partir de la géométrie du nanofil de silicium, et l'énergie potentielle électrique U_{elec} est obtenue en résolvant l'équation de Poisson dans le dispositif (voir les prochains paragraphes). La figure 2.5 représente les différentes étapes de calcul du code TB_Sim pour établir les propriétés du qubit.

Discrétisation

Tous d'abord, nous discrétonissons l'ensemble du dispositif sur un maillage parallélépipédique. Typiquement, le maillage est plus fin (~ 0.3 nm) dans le nanofil sous la grille que dans le reste du dispositif. La figure 2.6 montre un exemple de maillage dans le plan (xz) dont la densité a été réduite d'un facteur ~ 6 dans chaque direction par souci de clarté.

Confinement structural

Nous appliquons des conditions périodiques le long de l'axe x du nanofil, et des conditions de confinement "dur" à la surface du fil (les fonctions d'onde ne pénètrent ni les oxydes, ni Si_3N_4). À ce stade, la rugosité de surface peut être introduite mais ce n'est pas le cas dans le dispositif exemple. Ces conditions définissent le potentiel de confinement structural U_{struct} provenant de l'équation (2.28).

Confinement électrique

Puis, nous calculons l'énergie potentielle électrique U_{elec} sur le maillage de la simulation pour un ensemble de tensions de grilles données. Pour cela, nous résolvons l'équation de Poisson pour le potentiel électrique $V_{\text{elec}} = U_{\text{elec}}/(-e)$ en utilisant la méthode des volumes finies en supposant les constantes diélectriques relatives suivantes pour les matériaux : $\epsilon_{\text{Si}} = 11.7$, $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3.9$, $\epsilon_{\text{HfO}_2} = 20$ et $\epsilon_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 7.5$. L'équation de Poisson en présence d'une densité de charge ρ , dans un milieu de permittivité électrique ϵ s'écrit :

$$\nabla(\epsilon \nabla V_{\text{elec}}) = -\rho \quad (2.29)$$

avec les conditions aux limites appropriées :

- $V_{\text{elec}}(\mathbf{r}_g) = V_g$ pour tout point de l'espace \mathbf{r}_g où la tension de grille V_g est appliquée,
- Conditions aux limites périodiques le long de l'axe x .

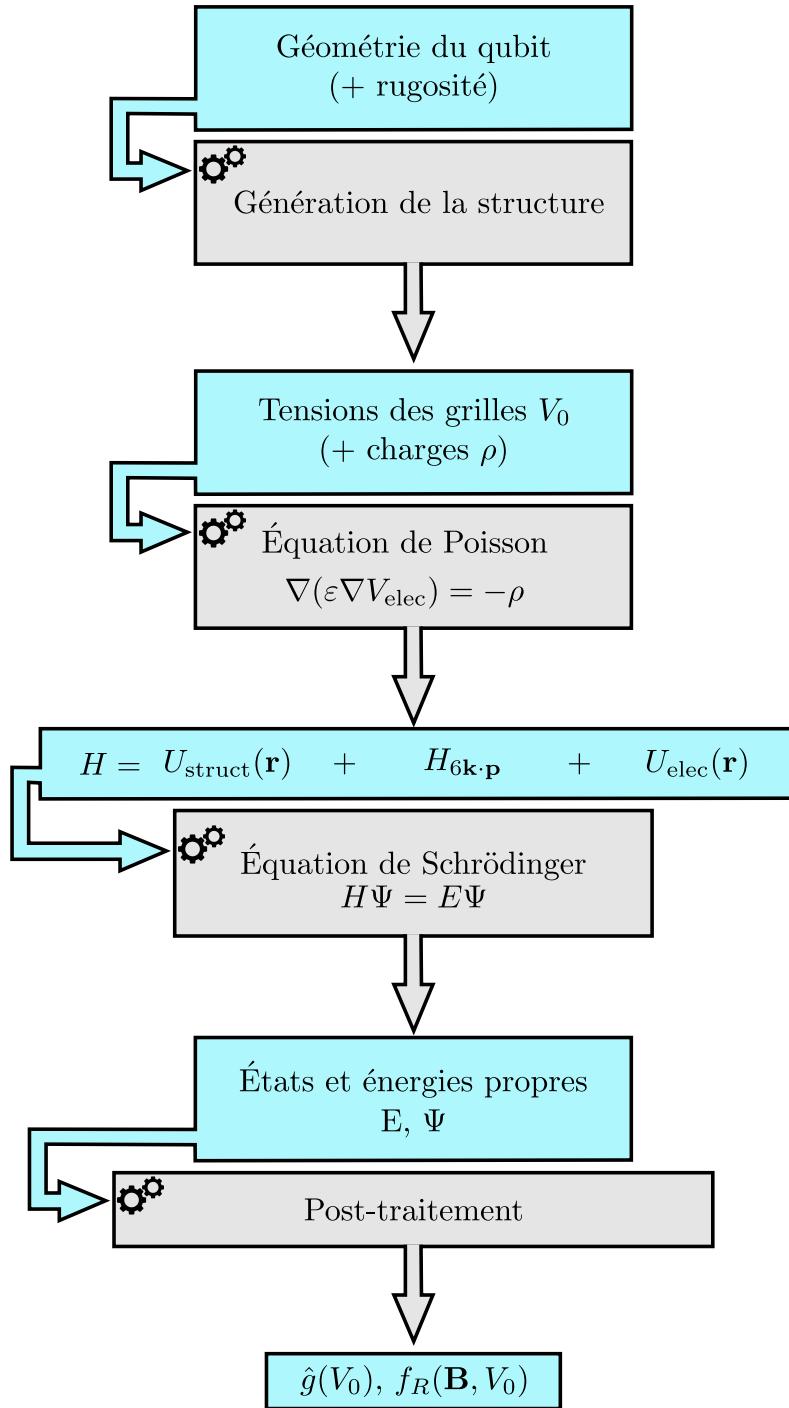


FIGURE 2.5 – Schéma du fonctionnement simplifié du code TB_Sim appliquée au calcul des états quantiques d'un qubit. Lorsque qu'un champ magnétique est présent, l'hamiltonien Zeeman des fonctions de Bloch et l'effet du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes sont incorporés à l'hamiltonien H avant la résolution de l'équation de Schrödinger. Il en est de même pour les contraintes dont les effets peuvent être incorporés à l'hamiltonien H . Par exemple, la matrice gyromagnétique \hat{g} et, la fréquence de Rabi f_R sont obtenues à partir du post-traitement. Les bulles, où les engrenage sont présents, représentent des parties du code TB_Sim.

- Composante normale du champ électrique nulle sur les faces (xy) et (xz) de la boîte de simulation contenant l'ensemble du dispositif (hors grilles avant et arrière).

Des défauts chargés positivement ou négativement peuvent être ajoutés à la simulation pour rendre compte de l'effet du désordre de charge. Leur nombre et leur position peuvent être définis par l'utilisateur ou caractérisés avec une fonction de distribution et une densité surfacique (pour les charges aux

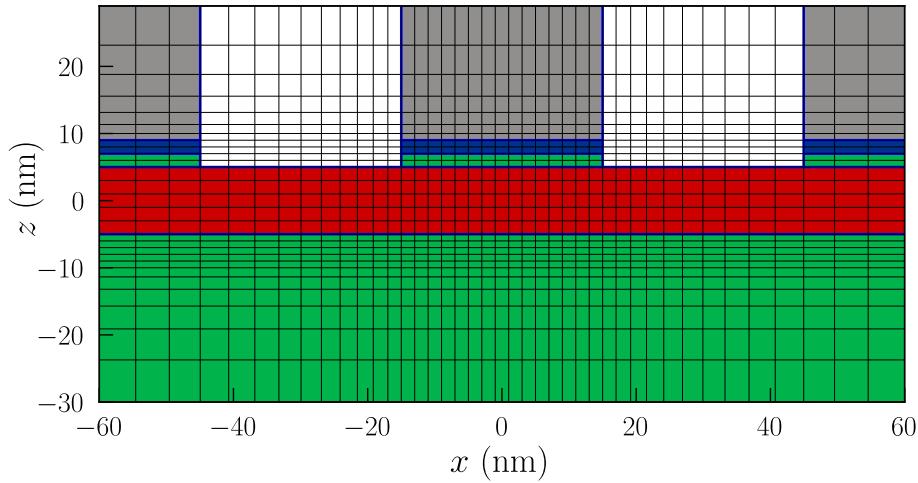


FIGURE 2.6 – Représentation du maillage utilisé pour résoudre l’équation de Poisson (volumes finis) et l’équation de Schrödinger (différences finies). Par souci de clarté, le nombre de point de maillage est divisé par six dans chaque direction. Le plan de coupe est perpendiculaire au substrat et contient l’axe du fil nanofil. Le code couleur des différents matériaux est identique à celui de la figure 2.4.

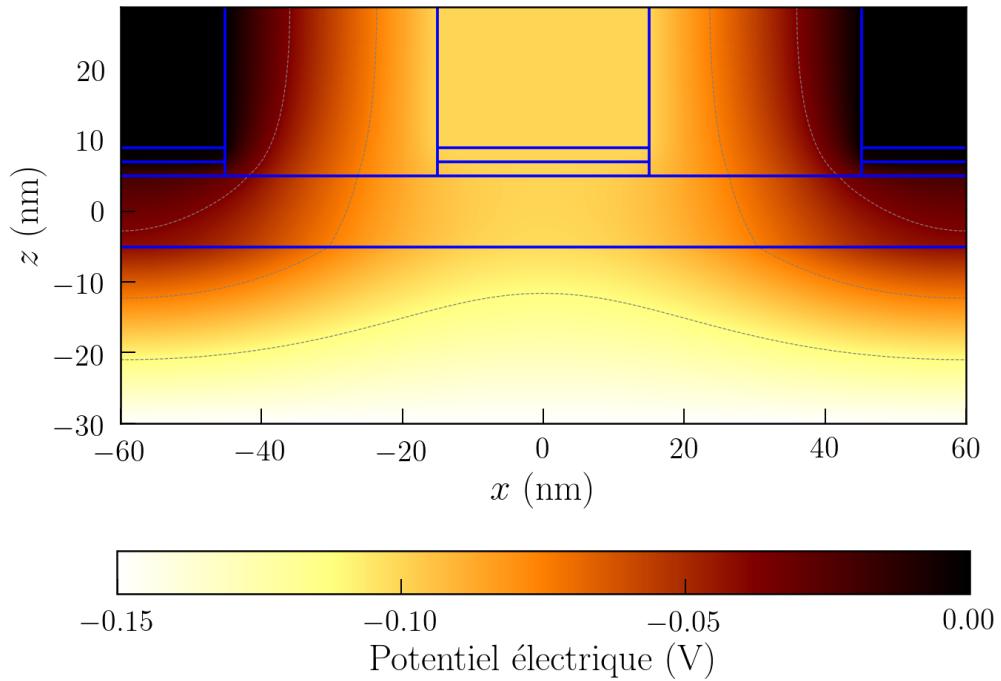


FIGURE 2.7 – Potentiel électrique V_{elec} créée par les grilles dans le plan (zx) passant par l’axe du nanofil, et calculé en résolvant l’équation de Poisson. La grille centrale est polarisée à $V_{\text{fg}} = -0.100 \text{ V}$, la grille arrière à $V_{\text{bg}} = -0.150 \text{ V}$, et les grilles latérales sont à la masse.

interfaces Si/SiO₂), ou volumique (pour les charges en volume dans les espaces Si₃N₄). La figure 2.7 montre un exemple de carte de potentiel électrique obtenue en résolvant Poisson dans la géométrie de la figure 2.4.

États quantiques

Une fois que l’énergie potentielle électrique, et l’énergie potentielle structurale sont calculées, l’hamiltonien total du système (2.28) peut être construit, et l’équation de Schrödinger pour les fonctions enveloppes est résolue en utilisant une méthode de différences finies. Les équations pour les fonctions enveloppes sont discrétisées sur le même maillage que précédemment. Les états propres du dispositif

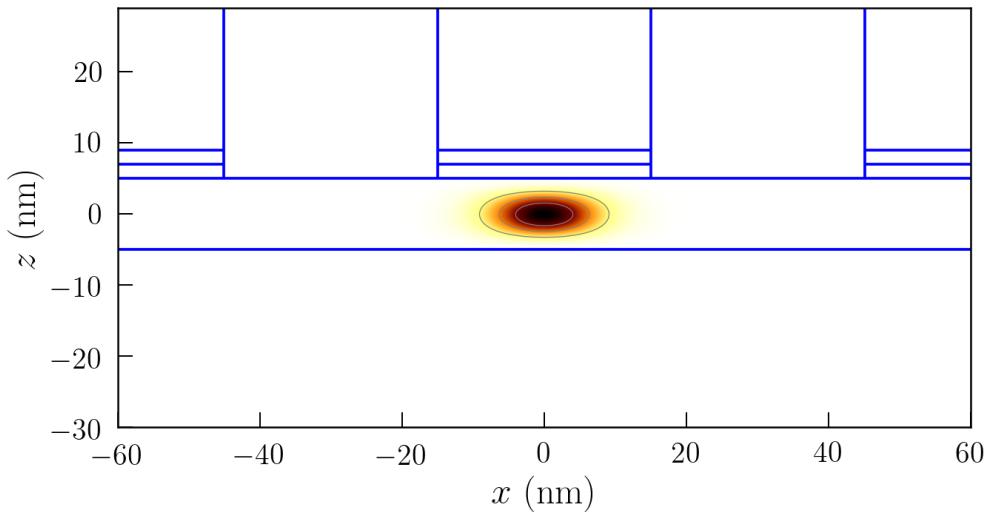


FIGURE 2.8 – Exemple de calcul de la probabilité de présence d'un trou dans le nanofil de silicium, soumis au potentiel électrique représenté dans la figure 2.7. Une couleur sombre indique une probabilité de présence élevée.

sont calculés avec une méthode itérative de type Jacobi-Davidson [51, 52]. Un exemple de fonction d'onde obtenue est représenté sur la figure 2.8.

L'effet du champ magnétique sur les fonctions de Bloch et sur leur spin est décrit par l'hamiltonien Zeeman (2.26) [49]. L'effet du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes est décrit par une substitution de Peierls similaire aux méthodes de liaisons fortes [53].

Post-traitement

Finalement, une fois les états quantiques du dispositif calculés, nous pouvons établir divers propriétés physiques, tel que la fréquence de Rabi entre deux états de la boîte quantique, ou calculer des matrices gyromagnétiques (voir la section 4.1.3).

2.4 Conclusions

Nous avons montré comment la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes permet de décrire la structure de bandes d'un matériau massif autour du point Γ avec peu de paramètres. L'énergie spin-orbite Δ_{so} caractérise la force du couplage spin-orbite dans la base des fonctions de Bloch, et sépare les bandes de trous lourds et de trous légers de la bande de split off. Les paramètres de Luttinger caractérisent l'énergie cinétique et l'anisotropie des bandes de valence. Dans une nanostructure, l'effet du champ magnétique sur les fonctions de Bloch est capturé par le paramètre κ (effet Zeeman) et son effet sur les fonctions enveloppes par les paramètres de Luttinger (effet du potentiel vecteur).

Nous avons introduit le code TB_Sim qui permet d'étudier des nanostructures de géométries réalistes. Il utilise des méthodes de volumes finis sur un maillage parallélépipédique pour calculer le potentiel électrique dans le dispositif, et ce même maillage pour résoudre l'équation de Schrödinger avec une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes. Les propriétés du qubit telles que sa réponse au champ magnétique, ou encore la vitesse des oscillations de spin peuvent être déduites du post-traitement de ces solutions.

Chapitre 3

Expériences sur les qubits de trou

L'objectif de ce chapitre est de présenter les expériences récentes menées au CEA sur un qubit spin-orbite de trou défini à partir d'une boîte quantique dans un nanofil de silicium. L'état de ce qubit est mesuré en utilisant une seconde boîte quantique qui joue le rôle de filtre de spin par une conversion spin-courant. Pour cette raison, nous introduisons tout d'abord, de manière générale, la notion de diagramme de stabilité et de triangle de courant dans un dispositif de double boîte quantique connecté à une source et à un drain, et nous présentons les phénomènes de blocage de Coulomb et de blocage de Pauli. Ensuite, après avoir décrit le dispositif expérimental, nous détaillons les expériences réalisées sur ce qubit de trou. L'objectif est de caractériser la fréquence de Larmor et de Rabi du qubit en fonction de l'orientation du champ magnétique afin, notamment d'optimiser ces performances. De plus, l'anisotropie des facteurs gyromagnétiques de ce qubit permet de sonder et d'explorer sa physique, et en particulier la nature des trous. Finalement, nous introduisons un formalisme de matrice gyromagnétique qui nous permet de distinguer différents mécanismes de manipulation électrique du spin, et de préciser la localisation de la fonction d'onde du qubit dans ce dispositif.

3.1 Double boîte quantique

Dans ce paragraphe, nous étudions un système de deux boîtes quantiques pour introduire les éléments clefs nécessaires à la compréhension de la partie 3.2 portant sur le dispositif expérimental. Nous considérons un système de deux boîtes quantiques en série dont les potentiels chimiques sont contrôlés par deux grilles portées aux tensions V_{G_1} et V_{G_2} auxquelles sont connectées ces boîtes. Une tension V_d peut être appliquée entre le drain et la source. La figure 3.1 représente ce système. Un ou plusieurs trous peuvent être transférés entre la source, le drain et les boîtes quantiques.

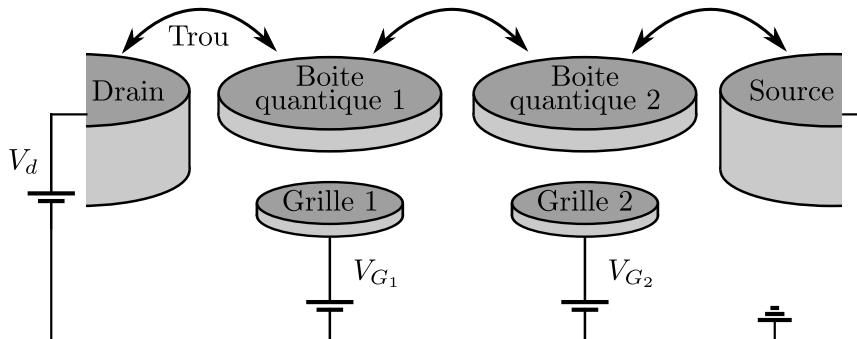


FIGURE 3.1 – Schéma de deux boîtes quantiques connectées à un drain et à une source. V_d est la tension appliquée au drain, et la source est à la masse. Les tensions de grilles V_{G_1} et V_{G_2} contrôlent les potentiels chimiques des boîtes quantiques. Les flèches noires indiquent les transferts possibles de trous. Inspiré des références [54, 55].

Dans un premier temps, nous allons décrire le mécanisme de remplissage de ces boîtes en construisant le diagramme de stabilité du système. Puis nous expliquerons comment un courant peut circuler à travers ces boîtes quantiques à faible tension drain-source, ainsi que les conditions de son blocage.

3.1.1 Remplissage des boîtes quantiques

Le remplissage de ces deux boîtes quantiques disposées en série repose sur le principe du blocage de Coulomb. Tout d'abord nous discutons brièvement du remplissage d'une boîte quantitative, puis nous généralisons cette physique au système de la double boîte quantitative. Dans cette partie, nous travaillons à une tension drain-source nulle.

Blocage de Coulomb

Tout d'abord, une boîte quantitative de N particules peut être caractérisée par son potentiel électrochimique $\mu(N)$. L'énergie à fournir pour ajouter une particule dans cette boîte est :

$$\mu(N+1) - \mu(N) = E_c + \Delta E, \quad (3.1)$$

où E_c est l'énergie d'interaction coulombienne et ΔE est la différence d'énergie entre états quantiques dans cette boîte [55]. Cette énergie de Coulomb E_c augmente le potentiel chimique des boîtes quantiques à chaque ajout de particule, et en particulier lors de l'ajout d'une particule de spin différent sur une orbitale déjà occupée ($\Delta E = 0$ sans champ magnétique). Cela permet de remplir la boîte particule par particule (blocage de Coulomb).

Dans un transistor à un électron, la boîte quantitative est en contact avec une source et un drain. À tension drain-source nulle, cette boîte quantitative accueille une particule supplémentaire quand le potentiel chimique $\mu(N+1)$, contrôlé par la grille, descend sous le niveau de Fermi du drain (ou de la source). À l'inverse, la boîte perd une particule si le potentiel chimique $\mu(N)$ monte au dessus du niveau de Fermi. Tant que $\mu(N) < E_F < \mu(N+1)$, le nombre de particules dans la boîte est stable.

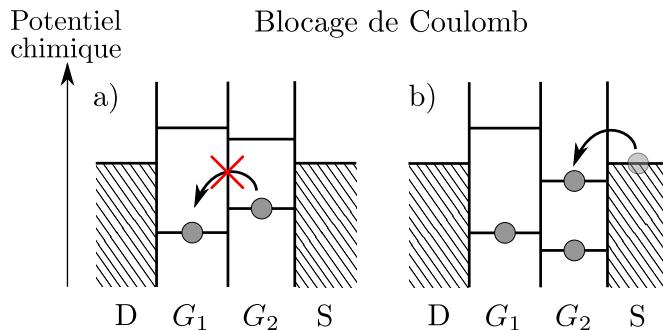


FIGURE 3.2 – Schéma des potentiels chimiques dans deux boîtes quantiques connectées à une source et à un drain mettant en évidence a) le blocage de Coulomb, et b) le transfert d'une particule entre les boîtes. La tension drain/source est nulle dans les deux cas.

Dans le cas de deux boîtes quantiques en série (comme représenté sur la figure 3.1), la physique de remplissage des boîtes est similaire au cas précédemment décrit. La figure 3.2 a) représente une configuration de charge stable correspondant au blocage de Coulomb des deux boîtes quantiques en série. Une particule de la boîte quantitative 2 ne peut pas être transférée vers la boîte 1 car le potentiel chimique de la boîte ainsi chargée est trop élevé. La figure 3.2 b) représente le transfert d'une particule de la source vers la boîte quantitative 2 lorsque le potentiel chimique correspondant à la boîte 2 descend sous le niveau de Fermi des réservoirs.

Diagramme de stabilité

Dans le cas de deux boîtes quantiques en série, les potentiels chimiques de ces boîtes quantiques sont contrôlés électrostatiquement par les tensions des grilles V_{G_1} et V_{G_2} définissant les boîtes quantiques. La figure 3.1 représente ces grilles.

Ainsi, les potentiels chimiques varient avec les tensions de grilles ce qui permet de remplir ou de vider les boîtes quantiques grâce aux effets de blocage de Coulomb. Nous pouvons alors construire un diagramme représentant le nombre stable de particules présentes dans ces boîtes quantiques en fonction des tensions de grilles $\{V_{G_i}\}$: ce diagramme se nomme diagramme de stabilité. La figure 3.3 représente des diagrammes de stabilité possibles du système où le nombre de charges dans les boîtes est représenté par le couple (N_1, N_2) où N_1 (respectivement N_2) est le nombre de charges dans la boîte quantitative 1 (respectivement boîte quantitative 2). Les lignes correspondent aux tensions de grilles pour lesquelles le nombre de charges dans les boîtes varie (passant d'une configuration (N_1, N_2) à $(N_1 + 1, N_2)$ par exemple). Autrement dit, ces lignes correspondent à l'alignement des potentiels chimiques des boîtes avec celui du drain (ou de la source).

Idéalement, le potentiel chimique de la boîte quantitative i est contrôlé exclusivement par la tension de la grille i où $i \in \{1, 2\}$. La figure 3.3 a) représente un tel diagramme de stabilité idéal où les différents domaines de stabilité sont séparées par des lignes soit verticales, soit horizontales.

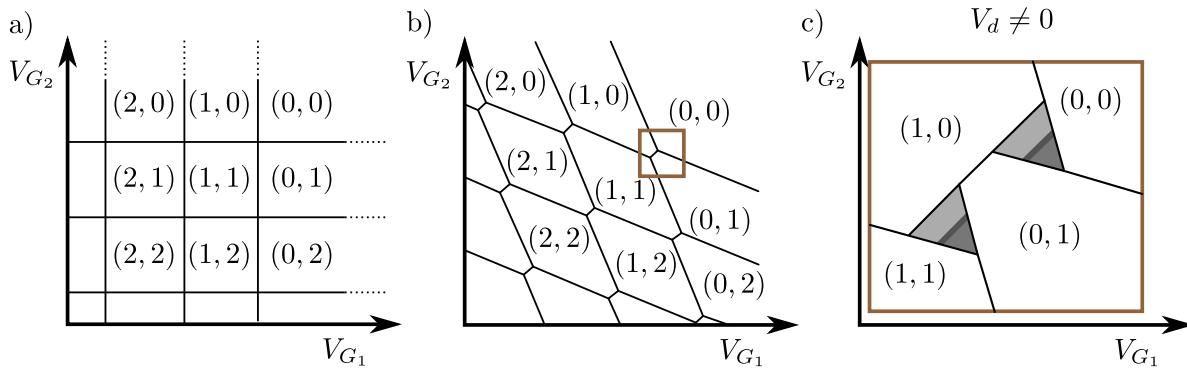


FIGURE 3.3 – Diagramme de stabilité en fonction des tensions de grilles V_{G_1} et V_{G_2} . a) Cas idéal : Chacun des potentiels chimiques des boîtes quantiques est contrôlé exclusivement par une grille. b) Cas pratique : les boîtes quantiques sont couplées. Le carré marron encadre deux points triples. c) Triangles de courant théoriques aux points triples encadrés dans b) à une tension source-drain non nulle. Les niveaux de gris correspondent à différentes intensités de courant à travers les deux boîtes quantiques. Inspiré des références [54, 55]

Cependant, en pratique les potentiels chimiques de ces boîtes quantiques ne sont pas découpés et des effets croisés peuvent apparaître ; c'est à dire que la tension de la grille 1 (respectivement de la grille 2) influence le potentiel chimique de la boîte quantitative 2 (respectivement grille 1). Le diagramme de stabilité présente alors, non plus des lignes horizontales ou verticales, mais des lignes obliques (nous discuterons du lien entre la pente de ces lignes et le couplage des grilles avec les boîtes quantiques dans la sous section suivante). La figure 3.3 b) montre un tel diagramme de stabilité. Ce diagramme présente des points particuliers appelés points triples où trois configurations de charge sont dégénérées avec un potentiel chimique aligné sur celui de la source et du drain.

Pour conclure, les interactions de Coulomb permettent de séparer les potentiels chimiques associés à des nombres de particules différents dans chacune des boîtes quantiques, ce qui permet de contrôler leur remplissage par l'intermédiaire de grilles agissant sur leurs potentiels chimiques. Typiquement, nous pouvons construire un diagramme de stabilité représentant le nombre de particules (N_1, N_2) dans chaque boîte en fonction des tensions de grilles V_{G_1} et V_{G_2} .

3.1.2 Courant drain-source

Dans cette partie, nous considérons deux boîtes quantiques en série en contact avec une source et un drain comme illustré dans la figure 3.1.

Triangles de courant

Une faible tension V_d est appliquée entre le drain et la source de sorte qu'un courant puisse circuler au travers des boîtes au voisinage des points triples [54, 56]. Dans ce cas, les potentiels chimiques de plusieurs états de charge sont dans la fenêtre ouverte entre les niveaux de Fermi de la source et du drain [via par exemple des processus de la forme $(N, M) \xrightarrow{\text{drain}} (N + 1, M) \rightarrow (N, M + 1) \xrightarrow{\text{source}} (N, M)$]. Le courant est non nul à l'intérieur de triangles centrés sur les points triples [voir figure 3.3 b)] et dont l'extension est proportionnelle à V_d . La physique dans ces triangles de courant est très riche, car une étude de l'intensité du courant mesuré et de ses variations permettent de sonder les énergies des états des boîtes quantiques [54, 55]. De plus, la "taille" des triangles et la pente de leurs cotés permettent de quantifier l'influence des grilles sur le potentiel chimique des boîtes quantique [57]. Nous pouvons introduire des bras de leviers $\alpha_{ij} = \partial\mu_j / \partial V_{G_i}$ ($0 \leq \alpha_{ij} \leq 1 \text{ eV/V}$) caractérisant le contrôle du potentiel chimique de la boîte j par la grille i . En particulier, si $\alpha_{ij} = 1 \text{ eV/V}$, la grille i contrôle de manière optimale la boîte quantique j , et si $\alpha_{ij} = 0 \text{ eV/V}$, la grille i n'a aucun effet sur le potentiel chimique de cette même boîte quantique [voir figure 3.3 a)].

Blocage de Pauli

La boîte quantique i peut être remplie avec N_i trous. Si N_i est pair alors le spin total porté par cette boîte quantique est nul, tandis que si N_i est impair, alors le spin total est $1/2$. Nous supposons maintenant que les deux boîtes sont remplies avec un nombre impair de trous et nous nous intéressons à la transition inter-boîtes $(N_1, N_2) \rightarrow (N_1 - 1, N_2 + 1)$. Celle-ci est équivalente à la transition générique $(1, 1) \rightarrow (0, 2)$, les niveaux restant doublement occupés étant "spectateur" des processus en première approximation. Nous appliquons un champ magnétique fini de sorte à séparer les états de spin " \uparrow " des états de spin " \downarrow "¹, et un petit potentiel positif sur le drain de sorte que le courant circule via le cycle $(1, 1) \rightarrow (0, 2) \xrightarrow{\text{source}} (0, 1) \xrightarrow{\text{drain}} (1, 1)$. Dans cette configuration, la configuration relative de spin entre les deux boîtes 1 et 2 peut bloquer la transition $(1, 1) \rightarrow (0, 2)$ (blocage de Pauli, voir figure 3.4). Sous réserve qu'il n'y ait qu'un seul état (\uparrow ou \downarrow) de la boîte 2 accessible depuis la boîte 1 :

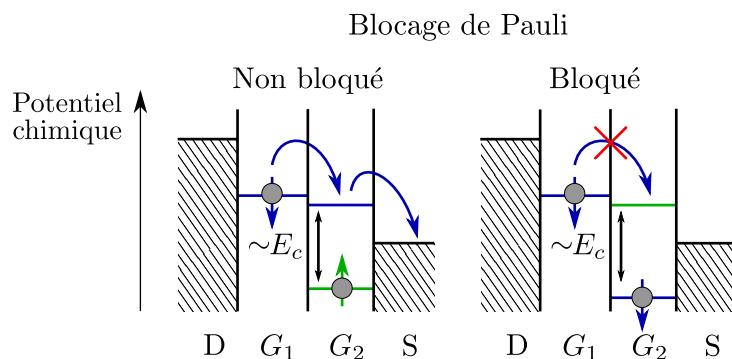


FIGURE 3.4 – Distribution des potentiels chimiques pour le blocage de Pauli. Le potentiel chimique d'une particule de spin " \uparrow " est représenté en vert, tandis que celui d'un spin " \downarrow " est en bleu. a) Les états de spin sont non bloqués : une charge peut être transférée à la source. b) Les états de spin sont dans un état bloqué : aucune charge ne peut être transférée du drain à la source.

1. En présence de couplage spin-orbite, les états " \uparrow " et " \downarrow " sont des pseudo-spins comme c'est le cas dans la section 3.2.

- Si l'état $(1, 1)$ est (\downarrow, \downarrow) [ou (\uparrow, \uparrow)] alors le principe d'exclusion de Pauli interdit les configurations $(0, \downarrow\downarrow)$ [ou $(0, \uparrow\uparrow)$], et l'état $(0, 2)$ reste interdit. Le système est bloqué dans l'état $(1, 1)$. Il n'y a pas de courant.
- Sinon si l'état $(1, 1)$ est (\downarrow, \uparrow) [ou (\uparrow, \downarrow)] alors la configuration $(0, \uparrow\downarrow)$ [ou $(0, \downarrow\uparrow)$] est possible, et ainsi l'état de charge $(0, 2)$ est accessible. Il en résulte un transfert de charge de la boîte quantique 1 vers la boîte quantique 2 puis vers la source. Finalement la boîte quantique 1 est remplie à partir du drain avec une autre charge et le système se retrouve une nouvelle fois dans la configuration de charge $(1, 1)$ qui est soit bloquée, soit non bloquée suivant l'état de spin de cette configuration. Au moins une charge a été transférée entre la source et le drain.

En pratique, le système relaxe dans son état fondamental (\downarrow, \downarrow) où le courant est bloqué (ou minimal, si nous tenons compte de processus de déblocages parasites). En manipulant le spin du qubit (boîte 2), nous pouvons alors débloquer le courant jusqu'à ce que le système retourne dans l'état (\downarrow, \downarrow) . Le courant moyen qui circule dans le dispositif est donc représentatif de l'évolution de l'état de spin du qubit, comme illustré aux paragraphes 3.2.1 et 3.2.2. La boîte 1 agit ici comme un "filtre de spin" vis à vis du qubit afin de réaliser une conversion spin-courant.

3.2 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental étudié est représenté dans la figure 3.5 a). Il se compose d'un nano-fil de silicium orienté $[110]$ d'épaisseur 8 nm et de largeur 25 nm gravé dans la couche de silicium (Si) d'un substrat de silicium-sur-isolant (SOI pour *Silicon-On-Insulator*). Cette couche repose sur 145 nm d'oxyde enterré (BOX pour *Burried oxyde*). Deux grilles métalliques recouvrantes de longueur 35 nm séparées par 30 nm, sont définies en série le long du nanofil. Elles se composent d'un empilement de 5 nm de nitrate de titane (TiN) et de 50 nm de silicium polycristallin (PolySi) et elles sont séparées électriquement du nanofil par quelques nanomètres de dioxyde de silicium (SiO_2) et d'oxyde d'hafnium (HfO_2) de forte permittivité électrique. Des espaces isolants en nitrate de silicium (Si_3N_4) sont déposés autour de ces grilles. La source et le drain sont fortement dopés p par implantation en bore et agissent donc comme réservoir de trous. Pendant cette implantation, les espaces protègent le nano-fil pour qu'il reste non dopé. L'axe $x = [\bar{1}10]$ est dans le plan du substrat et perpendiculaire à l'axe $y = [110]$ du nanofil. L'axe $z = [001]$ est perpendiculaire au substrat.

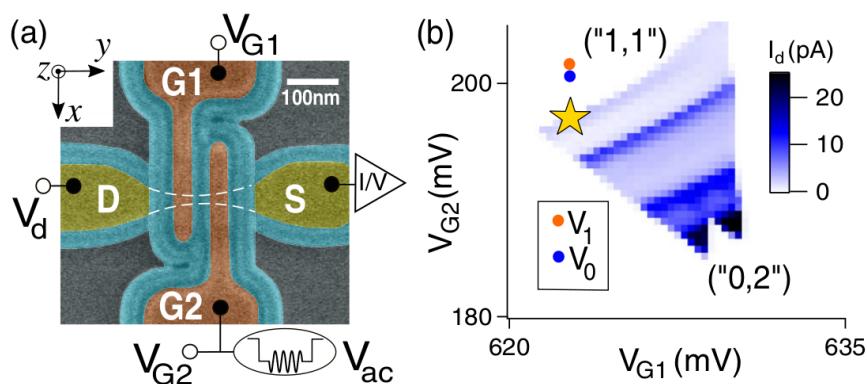


FIGURE 3.5 – a) Image du dispositif obtenue par microscopie électronique à balayage. b) Triangles de courant mesurés dans le dispositif expérimental. Les polarisations électriques V_0 et V_1 correspondent à une configuration de blocage de Coulomb. La polarisation électrique représentée par une étoile jaune correspond à une configuration de blocage de Pauli possible. La tension drain-source est $V_d = 5$ mV. Tiré de la référence [41].

À basse température (~ 15 mK), les boîtes quantiques de trous sont définies par accumulation de charges sous les deux grilles recouvrantes. Ce dispositif permet de former deux boîtes quantiques en série : une boîte quantique 1 sous la grille 1, et une boîte quantique 2 sous la grille 2. Le nombre de

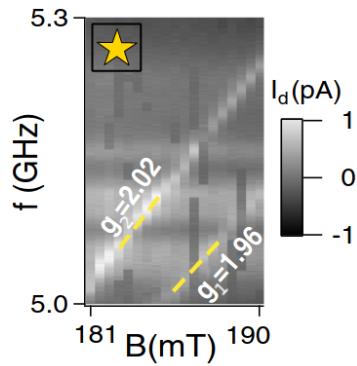


FIGURE 3.6 – Courant source-drain I_d mesuré en fonction de la fréquence f_{ac} de l’onde radio-fréquence et de l’amplitude du champ magnétique B en blocage de Pauli [au point de polarisation indiqué par une étoile jaune dans la diagramme tension-courant de la figure 3.5 b)]. Une ligne de courant correspond à la levée du blocage de Pauli, et donc à la manipulation du spin à la résonance $hf_{ac} = \mu_B g B$. La modulation radio-fréquence est appliquée en continu sur la grille 2. Adapté de la référence [41].

charges dans ces boîtes est contrôlé par les tensions des grilles V_{G_1} (tension appliquée sur la grille 1) et V_{G_2} (tension appliquée sur la grille 2). Ces tensions sont ajustées de sorte que les boîtes contiennent un faible nombre de trous.

La figure 3.5 b) représente des triangles de courant obtenus dans ce dispositif expérimental à faible tension drain-source $V_d = 5$ mV. Les bras de leviers sont extraits à partir de cette figure où $\alpha_{11} \sim 0.70$ eV/V, $\alpha_{22} \sim 0.26$ eV/V, $\alpha_{12} \sim 0.18$ eV/V, et $\alpha_{21} \sim 0.0022$ eV/V ce qui laisse penser que la boîte quantique 1 se situe sous la grille 1 et que l’autre boîte quantique est localisée entre les deux grilles (les deux grilles contrôlent de manière équivalente le potentiel chimique de cette boîte).

Nous notons deux polarisations électriques V_0 et V_1 correspondant à une configuration de blocage de Coulomb, et un blocage de Pauli (blocage du transfert de charge $(1, 1) \rightarrow (0, 2)$) dépendant de l’état de spin $(1, 1)$) est représenté par une étoile jaune. En pratique, et par la suite, nous appliquons un champ magnétique pour définir un qubit de spin dans la boîte quantique 2 utilisé en tant que qubit pour le stockage de l’information quantique, et un second dans la boîte quantique 1 utilisé pour la lecture de cette information.

Tout d’abord nous allons montrer la manipulation électrique de spin dans ce dispositif puis nous allons mettre en évidence le contrôle électrique d’oscillations cohérentes de spin.

3.2.1 Manipulation électrique de spin

Dans cette partie nous montrons la manipulation électrique du spin des trous dans le dispositif précédemment décrit. Nous travaillons dans la configuration de blocage de Pauli indiquée par une étoile jaune dans la figure 3.5 b). Le système relaxe naturellement vers une configuration de spin bloqué (\downarrow, \downarrow) : il n’y a pas de courant au travers du nano-fil. Nous appliquons en continu une modulation sur la grille 2, de fréquence f_{ac} . Quand cette fréquence est résonnante avec les états d’une boîte, son spin tourne et le blocage de Pauli est levé. Le système ne reste donc jamais longtemps piégé dans l’état (\downarrow, \downarrow) , et un courant fini I_d circule dans le nano-fil. La figure 3.6 représente le courant moyen I_d mesuré en fonction de la fréquence de modulation f_{ac} et de l’amplitude du champ B orienté suivant l’axe z. Nous observons une ligne de courant de forte intensité correspondant à la résonance avec les états du qubit de la boîte quantique 2. Cette résonance vérifie donc la condition :

$$hf_{ac} = \mu_B g B, \quad (3.2)$$

où h est la constante de Planck, μ_B est le magnéton de Bohr, et g est le facteur gyromagnétique du qubit. Nous observons une seconde ligne de résonance de plus faible intensité qui correspond à la manipulation

du spin de la boîte quantique 1. À partir des pentes de ces lignes de courant, nous extrayons les facteurs g des boîtes qui sont respectivement $g_1 = 1.96 \pm 0.02$ et $g_2 = 2.02 \pm 0.02$.

Pour conclure, nous avons montré la manipulation électrique d'un qubit spin-orbite de trou. À la résonance, la modulation radio-fréquence, appliquée en continue, modifie l'état de spin du qubit, et lève ainsi le blocage de Pauli ce qui permet à un courant de traverser le nano-fil. Un tel couplage du spin au champ électrique implique l'existence d'un mécanisme de couplage spin-orbite, ici intrinsèque aux bandes de valence du silicium.

3.2.2 Contrôle électrique : oscillations cohérentes de spin

Précédemment, nous avons montré qu'il est possible de manipuler électriquement un qubit de spin. Dans cette partie nous mettons en évidence des oscillations cohérentes de l'état du qubit dans la boîte quantique 2.

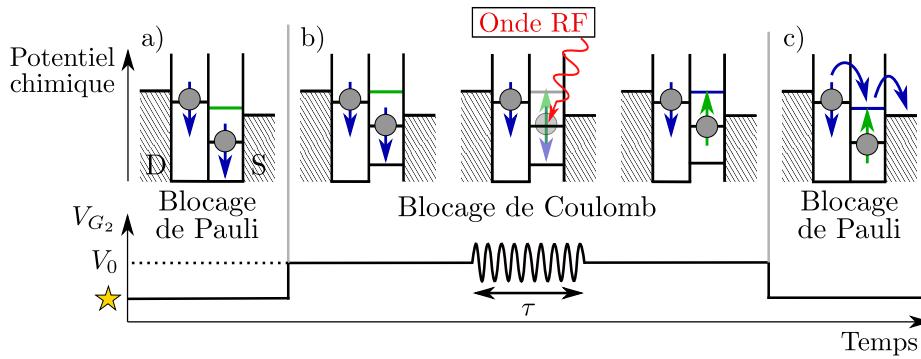


FIGURE 3.7 – Schéma d'un cycle initialisation/manipulation/lecture avec un retournement complet du spin. a) Initialisation en blocage de Pauli. b) Contrôle électrique du spin en appliquant une modulation radio-fréquence résonante sur la grille 2 pendant un temps τ en blocage de Coulomb. c) Lecture en blocage de Pauli. En pratique la lecture et l'initialisation se confondent. Ce cycle est répété en continu, et le courant moyen mesuré. Ce courant est maximal quand le spin est totalement débloqué après manipulation, et il est minimal si le spin reste bloqué.

La connaissance de l'état de spin après manipulation du qubit dans la boîte quantique 2 se fait par mesure du courant moyen sur plusieurs cycles initialisation/manipulation/lecture. Tous d'abord, les spins sont initialisés dans la configuration de blocage de Pauli indiquée par une étoile jaune sur la figure 3.5 b). Ensuite nous polarisons la grille 2 en configuration de blocage de Coulomb au point V_0 . Puis nous appliquons une modulation de tension résonante avec les états du qubit sur la grille 2 pendant un temps τ . Le blocage de Coulomb évite un saut du spin de la boîte quantique 2 vers la boîte quantique 1 pendant la manipulation. Après la manipulation du spin, le système est ramené en blocage de Pauli pour lire son état. La figure 3.7 représente un tel cycle. Ce cycle initialisation/manipulation/lecture est répété en continu, et en pratique la lecture et l'initialisation se confondent. Il circule donc un courant moyen représentatif de l'état du spin de la boîte quantique 2 après manipulation.

La figure 3.8 représente ce courant moyen I_d mesuré en fonction du temps de manipulation τ à un champ magnétique $B = (0, 0, -0.36)$ T. La fréquence de ces oscillations du spin dans la boîte 2, qui ont été caractérisées dans un dispositif similaire [40], est proportionnelle à l'amplitude de la modulation radio-fréquence, ce qui est une signature des oscillations de Rabi.

Pour conclure, nous avons mis en évidence l'excitation électrique d'oscillations cohérentes de spin dans la boîte quantique 2.

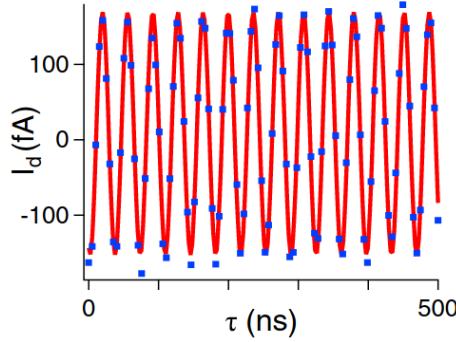


FIGURE 3.8 – Courant moyen détecté I_d en fonction du temps τ de manipulation du qubit à un champ magnétique $\mathbf{B} = (0, 0, -0.36)$ T. Le courant est centré en zéro par souci de clarté. Tiré de la référence [41].

3.3 Anisotropie des facteurs gyromagnétiques

Cette section introduit les concepts théoriques nécessaires à l’interprétation de l’anisotropie des facteurs gyromagnétiques (facteurs g). Puis nous discutons la mesure des facteurs g expérimentaux que nous analysons.

3.3.1 Formalisme de la matrice gyromagnétique

Cette partie introduit le formalisme de la matrice gyromagnétique \hat{g} qui est une généralisation du concept de ‘tenseur g ’ [58]. Tout système quantique à deux niveaux, dont la séparation en énergie est linéaire en champ magnétique, peut être décrit de manière générique par un hamiltonien effectif (à une translation diagonale près) :

$$H(V, \mathbf{B}) = \frac{1}{2} \mu_B {}^t \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{g}(V) \cdot \mathbf{B}, \quad (3.3)$$

où $\boldsymbol{\sigma} = {}^t(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ est le vecteur des matrices de Pauli, \hat{g} est une matrice 3×3 réelle (pas nécessairement symétrique) qui peut dépendre de la polarisation V des grilles, et $\mathbf{B} = {}^t(B_x, B_y, B_z)$ est le champ magnétique. Le chapitre 4 décrit le calcul numérique de cet hamiltonien. Par construction, cette matrice \hat{g} dépend du choix des axes magnétiques dans lesquels le champ magnétique est exprimé, et dépend aussi du choix d’une base $\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ ² pour les états du système à deux niveaux (défini à une transformation unitaire près) à champ magnétique nul. Cette matrice \hat{g} n’est pas toujours diagonalisable mais elle peut se décomposer en valeurs singulières :

$$\hat{g} = \hat{U} \cdot \hat{g}_d \cdot {}^t \hat{V}, \quad (3.4)$$

où \hat{U} et \hat{V} sont des matrices orthogonales directes ($\det \hat{U} = \det \hat{V} = 1$) et $\hat{g}_d = \text{diag}(g_1, g_2, g_3)$ est une matrice diagonale. Par la suite nous allons détailler le sens physique de ces trois matrices en introduisant l’énergie Zeeman de ce qubit, puis en discutant l’effet de la matrice \hat{U} sur les matrices de Pauli.

Énergie Zeeman

L’hamiltonien effectif (3.3) peut s’écrire $H = \sum_{i,j} \sigma_i g_{ij} B_j$ où $\{g_{ij}\}$ sont les éléments de la matrice \hat{g} , soit encore :

$$H = \frac{1}{2} \mu_B \begin{pmatrix} \sum_j g_{3j} B_j & \sum_j (g_{1j} - ig_{2j}) B_j \\ \sum_j (g_{1j} + ig_{2j}) B_j & -\sum_j g_{3j} B_j \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

2. \uparrow et \downarrow sont des indices de pseudo spin, utilisés pour labelliser les états du système à deux niveaux.

Ses énergies propres $E_{\pm} = \pm \frac{1}{2}\mu_B\varepsilon$ vérifient $\varepsilon^2 - (\sum_j g_{3j}B_j)^2 = (\sum_j g_{1j}B_j)^2 + (\sum_j g_{2j}B_j)^2$. L'énergie Zeeman, $E_Z = E_+ - E_- = 2E_+$, peut donc finalement s'écrire :

$$(E_Z)^2 = \mu_B^2 |\hat{\mathbf{g}}\mathbf{B}|^2 = \mu_B^2 {}^t\mathbf{B} \cdot \hat{G} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.6)$$

où $\hat{G} = {}^t\hat{\mathbf{g}} \cdot \hat{\mathbf{g}}$ est une matrice symétrique réelle. Le tenseur \hat{G} peut être diagonalisé à partir de la décomposition en valeurs singulières (3.4) de la matrice $\hat{\mathbf{g}}$:

$$\hat{G} = V \cdot \hat{\mathbf{g}}_d^2 \cdot {}^t\hat{V}. \quad (3.7)$$

Par conséquent le carré des éléments de la matrice $\hat{\mathbf{g}}_d$, g_1^2 , g_2^2 et g_3^2 sont les valeurs propres de \hat{G} et définissent les facteurs g principaux. De plus, les colonnes de \hat{V} sont les vecteurs propres de \hat{G} et définissent les axes magnétiques principaux correspondants.

Rotation des matrices de Pauli

La décomposition en valeurs singulières fait apparaître une matrice \hat{U} agissant dans l'espace des spins. En substituant l'expression de la matrice $\hat{\mathbf{g}}$ décomposée en valeurs singulières dans l'hamiltonien effectif (3.3), celui-ci s'écrit :

$$H = \frac{1}{2}\mu_B {}^t\tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{g}}_d \cdot \tilde{\mathbf{B}}, \quad (3.8)$$

où $\tilde{\mathbf{B}} = {}^tV \cdot \mathbf{B}$ sont les coordonnées du champ magnétique dans les axes magnétiques principaux, et où $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = {}^t\hat{U} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Nous pouvons montrer (voir annexe B) qu'il existe une transformation unitaire $R(\hat{U})$ dans l'espace $\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ telle que $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = {}^t(R^\dagger \sigma_1 R, R^\dagger \sigma_2 R, R^\dagger \sigma_3 R)$. Autrement dit, la matrice $\hat{\mathbf{g}} \equiv \hat{\mathbf{g}}_d$ est diagonale dans la base $\{| \uparrow_d \rangle, | \downarrow_d \rangle\} = R\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ pour le système à deux niveaux, et pour un champ magnétique exprimé dans les axes magnétiques principaux. Réciproquement, une rotation de la base du système à deux niveaux $\{| \uparrow_d \rangle, | \downarrow_d \rangle\} = R\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ entraîne une rotation $\hat{\mathbf{g}}' = A(R)\hat{\mathbf{g}}$ de la matrice $\hat{\mathbf{g}}$ où A est une matrice 3×3 unitaire de déterminant +1. Il est important de remarquer que la matrice $\hat{\mathbf{g}}$ est définie par le tenseur \hat{G} à une transformation unitaire près [car $\hat{G} = {}^t\hat{\mathbf{g}}\hat{\mathbf{g}} = {}^t(\hat{A}\hat{\mathbf{g}})(\hat{A}\hat{\mathbf{g}})$ pour toute matrice unitaire \hat{A}]. En particulier, une rotation de la base du système à deux niveaux $\{| \uparrow_d \rangle, | \downarrow_d \rangle\} = R\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ laisse donc invariant le tenseur \hat{G} , mais pas la matrice $\hat{\mathbf{g}}$. Le tenseur \hat{G} est bien indépendant de la matrice \hat{U} de la décomposition en valeurs singulières, comme le montre l'équation (3.7).

Finalement, la connaissance du tenseur G permet de construire les facteurs (g_1, g_2, g_3) principaux (à un signe près) et les axes magnétiques principaux mais laisse la matrice \hat{U} inconnue.

3.3.2 Caractérisation expérimentale du tenseur gyromagnétique

Cette section présente le protocole de mesure des facteurs gyromagnétiques du qubit pour différentes orientations de champ magnétique ainsi que la détermination expérimentale du tenseur \hat{G} introduit dans la sous-section précédente.

Mesure des facteurs g

Nous travaillons à une orientation de champ magnétique \mathbf{B} et à une polarisation V données. Le courant source-drain moyen est mesuré en fonction de la fréquence f_{ac} de la modulation radio-fréquence pour un temps τ de manipulation fixé (voir insert de la figure 3.9). Il présente un pic à la résonance $f_{ac} = f_L = E_Z/h$ permettant d'estimer la fréquence de Larmor f_L . Ces mesures sont répétées 400 fois et reportées sur un histogramme des fréquences de Larmor. Cet histogramme est représenté dans la figure 3.9 à un champ magnétique $\mathbf{B} = (0, 0.216, 0.216)$ T, et à deux polarisations électriques V_0 et V_1 définies dans la figure 3.5 b). La fréquence de Larmor moyenne \bar{f}_L est alors calculée ainsi que le facteur gyromagnétique $g(V) = h\bar{f}_L/(\mu_B B)$. En particulier, $g(V_0) = 2.013 \pm 0.001$ et $g(V_1) = 2.010 \pm 0.001$ à cette même orientation de champ magnétique.

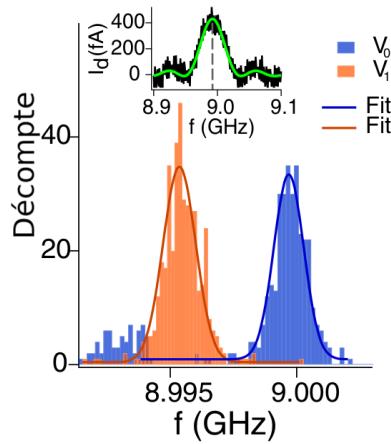


FIGURE 3.9 – Histogramme des fréquences de Larmor à deux polarisations électriques V_0 et V_1 [définies dans la figure 3.5 b)]. Cet histogramme est construit à partir de 400 mesures de la fréquence de Larmor extraites du pic du courant I_d (insert) mesuré en fonction de la fréquence f_{ac} de la modulation radiofréquence pour un temps de manipulation $\tau = 20$ ns dans un champ magnétique $\mathbf{B} = (0, 0.216, 0.216)$ T. Tiré de la référence [41].

Ce protocole expérimental permet donc de caractériser la dépendance du facteur $g(V, \mathbf{B})$ à l'orientation du champ magnétique et à la polarisation des grilles. En particulier, la figure 3.10 a) montre la carte du facteur g mesuré à $V = V_0$ en fonction des angles θ et φ définissant l'orientation du champ magnétique. Nous remarquons que le facteur g est très anisotrope et varie entre 1.6 et 2.5.

Mesure du tenseur \hat{G}

L'équation (3.6) montre que le facteur g s'écrit :

$$(g)^2 = |\hat{g}\mathbf{b}|^2 = {}^t\mathbf{b} \cdot \hat{G} \cdot \mathbf{b}, \quad (3.9)$$

avec $\mathbf{b} = \mathbf{B}/\|\mathbf{B}\|$. Ainsi, le tenseur \hat{G} permet de caractériser complètement l'anisotropie des facteurs gyromagnétiques. La mesure de l'énergie Zeeman suivant six orientations du champ magnétique permet de définir six équations indépendantes pour les six éléments inconnus de \hat{G} , et donc de construire \hat{G} . Ensuite, l'équation (3.9) peut être utilisée pour calculer le facteur gyromagnétique pour une orientation de champ magnétique arbitraire. La figure 3.10 b) représente la carte du facteur g calculée à partir du tenseur \hat{G} ainsi reconstruit en fonction de l'orientation du champ magnétique (nous supposons les facteurs g positifs).

Comme discuté précédemment, le tenseur \hat{G} peut être diagonalisé et a pour valeurs propres le carré des facteurs gyromagnétiques principaux g_1^2, g_2^2, g_3^2 . De plus, en notant B_1, B_2 , et B_3 les composantes du champ magnétique dans le système d'axe $\{\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}\}$ qui diagonalise \hat{G} , l'énergie Zeeman s'exprime :

$$E_Z = \mu_B \sqrt{g_1^2 B_1^2 + g_2^2 B_2^2 + g_3^2 B_3^2}. \quad (3.10)$$

Les surfaces de niveaux de l'énergie Zeeman sont donc simplement des ellipsoïdes. La figure 3.11 représente ces surfaces pour des facteurs g principaux $g_1 = 2.08, g_2 = 2.48$, et $g_3 = 1.62$ extraits à partir du tenseur \hat{G} mesuré à $V_{G_2} = V_0$. L'axe principal $\mathbf{Y} = (-0.22, 0.98, 0.01)$ correspond presque à l'axe \mathbf{y} du nanofil tandis que les deux autres axes principaux $\mathbf{X} = (0.82, 0.19, -0.53)$ et $\mathbf{Z} = (0.52, 0.11, 0.84)$ sont légèrement inclinés par rapport aux axes \mathbf{x} et \mathbf{z} du dispositif.

Les valeurs de facteurs g principaux mesurés suggèrent un fort mélange trous lourds/légers. En effet, comme montré dans la section 2.2.3, pour un qubit ayant un caractère presque pur trous lourds, les facteurs principaux sont $g_1 \sim g_2 \sim 0$, et $g_3 \sim 6|\kappa|$. Dans le cas d'un qubit ayant un caractère presque pur trous légers, l'anisotropie est moins prononcée et $g_1 \sim g_2 \sim 4|\kappa|$, et $g_3 \sim 2|\kappa|$. La nature de ce mélange sera discutée plus tard dans les chapitres 4 et 5.

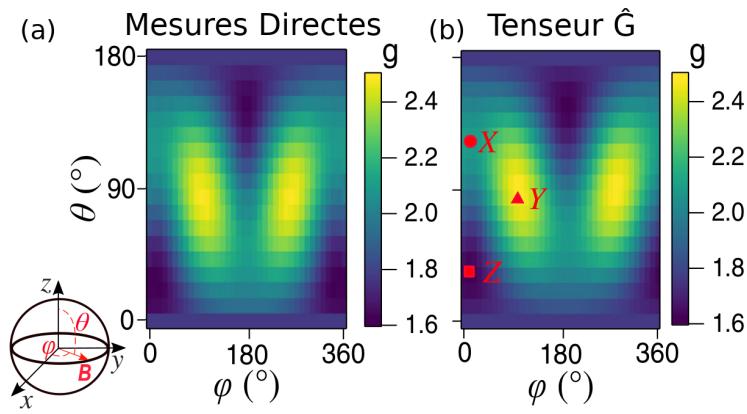


FIGURE 3.10 – a) Anisotropie du facteur g directement mesuré en fonction des angles θ et φ du champ magnétique. b) Anisotropie du facteur g calculé à partir du tenseur \hat{G} reconstruit à partir de a). Les angles θ et φ varient par pas de 10° de 0° à 180° . Le reste de la carte est construit par symétrie $g(\theta, \varphi) = g(\pi - \theta, \pi + \varphi)$ ($\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$). Adapté de la référence [41].

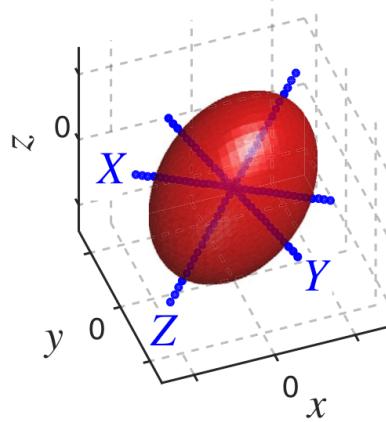


FIGURE 3.11 – Axes magnétiques principaux $\{\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}\}$ représentés dans les axes du dispositif $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\}$, et une surface de niveau de l'énergie Zeeman $E_Z = g^* \mu_B B$ à $V = V_0$. Tiré de la référence [41].

3.4 Anisotropie de la fréquence de Rabi

Dans cette partie, nous démontrons une expression de la fréquence de Rabi dans le cadre du formalisme de la matrice \hat{g} . Cette expression permet de distinguer deux mécanismes pour les oscillations de Rabi que nous caractériserons ensuite expérimentalement.

3.4.1 Mécanismes des oscillations de Rabi

Cette partie introduit une expression de la fréquence de Rabi à partir de l'hamiltonien effectif (3.3) faisant intervenir la matrice gyromagnétique \hat{g} et sa variation \hat{g}' par rapport à la tension modulée. Nous allons distinguer deux contributions aux oscillations de Rabi.

Fréquence de Rabi

Comme discuté précédemment, la matrice $\hat{g}(V)$ peut dépendre de la polarisation électrique V des grilles. Nous pouvons développer $\hat{g}(V)$ à l'ordre un en $\delta V = V - V_0$ autour du point de polarisation de référence V_0 :

$$\hat{g}(V) = \hat{g}(V_0) + \delta V \hat{g}'(V_0), \quad (3.11)$$

où $\hat{g}' = \partial\hat{g}/\partial V$ est la dérivée de la matrice \hat{g} par rapport à la tension qui est modulée. Nous introduisons le vecteur de Larmor $\hbar\Omega = \frac{1}{2}\mu_B\hat{g}(V_0)\mathbf{B}$, et sa dérivée $\hbar\Omega' = \frac{1}{2}\mu_B\hat{g}'(V_0)\mathbf{B}$, et ainsi l'hamiltonien effectif (3.3) peut s'écrire :

$$H(V_0 + \delta V, \mathbf{B}) = \hbar|\Omega|\sigma_\omega + \hbar|\Omega'|\delta V\sigma_{\omega'}, \quad (3.12)$$

avec $\omega = \Omega/|\Omega|$ et $\omega' = \Omega'/|\Omega'|$. En séparant $\Omega' = \Omega'_\parallel + \Omega'_\perp$ en ses composantes parallèles et perpendiculaires à Ω , nous obtenons :

$$H(V_0 + \delta V, \mathbf{B}) \approx \hbar(|\Omega| + |\Omega'_\parallel\delta V|)\sigma_\omega + \hbar|\Omega'_\perp|\delta V\sigma_{\omega'} . \quad (3.13)$$

Ω'_\parallel caractérise la modulation de la fréquence de Larmor par la tension de grille, tandis que Ω'_\perp caractérise la modulation de l'axe de précession. La fréquence de Rabi est définie par les éléments de matrice non-diagonaux de la modulation radio-fréquence dans la base des états propres de l'hamiltonien sans excitation. Pour un signal radio-fréquence $\delta V(t) = V_{\text{ac}} \sin(|\Omega|t + \varphi)$ resonant avec les états propres de $H(V_0, \mathbf{B})$, la fréquence de Rabi f_R est le module de [58, 59] :

$$\begin{aligned} f_R &= \frac{1}{2\pi}\Omega'_\perp V_{\text{ac}} \\ &= \frac{1}{2\pi}(\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\Omega}')V_{\text{ac}} , \\ &= \frac{\mu_B B V_{\text{ac}}}{2hg} [\hat{g}(V_0)\mathbf{b}] \times [\hat{g}'(V_0)\mathbf{b}] \end{aligned} \quad (3.14)$$

avec le facteur $g = |\hat{g} \cdot \mathbf{b}|$. Il est donc en principe possible de caractériser l'anisotropie de la fréquence de Rabi avec les mesures ou les calculs des matrices \hat{g} et \hat{g}' . Le formalisme de la matrice \hat{g} permet d'analyser et d'interpréter les oscillations de Rabi dans un cadre de réponse linéaire en champ magnétique, et en amplitude de la modulation radio-fréquence.

Kato *et al* [58] a introduit initialement ce formalisme pour décrire les variations des facteurs g principaux (soit la matrice diagonale g_d) par une modulation radio-fréquence. Comme discuté par la suite, le formalisme de la matrice \hat{g} permet de capturer d'autres mécanismes participant aux oscillations de Rabi.

Modulation du tenseur \hat{G} et résonance de spin iso-Zeeman

D'après la section 3.3.1, il est possible d'établir les facteurs g principaux à partir du tenseur \hat{G} , et ainsi d'écrire la matrice $\hat{g} = \hat{g}_d$ dans une base qui reste cependant inconnue. Toutefois, il est impossible de construire la matrice \hat{g}' dans la même base à partir de la seule dépendance électrique du tenseur \hat{G} . En effet :

$$\hat{G}' = {}^t\hat{g} \cdot \hat{g}' + {}^t\hat{g}' \cdot \hat{g} , \quad (3.15)$$

où G' est la dérivée du tenseur \hat{G} par rapport à la tension modulée, si bien que $\hat{G}' = 0$ implique ${}^t\hat{g} \cdot \hat{g}'$ antisymétrique mais n'impose en aucun cas $\hat{g}' = 0$. Cela signifie que les variations de la matrice \hat{g} ne sont pas totalement capturées par le tenseur \hat{G} . Par la suite nous distinguons donc deux mécanismes : un premier dans lequel la mesure du tenseur \hat{G} et de ses variations électriques caractérisent totalement les matrices \hat{g} et \hat{g}' ; et un second où le tenseur \hat{G} ne montre aucune dépendance électrique mais où la matrice \hat{g}' est non nulle.

Pour distinguer ces mécanismes, nous écrivons \hat{g}' et \hat{G}' dans le système d'axe magnétiques principaux et la base $\{|\uparrow_d\rangle, |\downarrow_d\rangle\}$ définies par la décomposition en valeurs singulières à $V = V_0$. Alors par construction $\hat{g} = \hat{g}_d$, $\hat{U} = \hat{V} = \hat{I}$, ${}^t\hat{V}' = -\hat{V}'$ (respectivement ${}^t\hat{U}' = -\hat{U}'$) puisque ${}^t\hat{V}\hat{V} = \hat{I}$ (respectivement ${}^t\hat{U}\hat{U} = \hat{I}$), et aussi [éqs. (3.4) et (3.15)] :

$$\hat{G}' = \hat{V}'\hat{g}_d^2 - \hat{g}_d^2\hat{V}' + 2\hat{g}_d\hat{g}'_d , \quad (3.16)$$

et :

$$\begin{aligned}\hat{g}' &= \hat{U}'\hat{g}_d - \hat{g}_d\hat{V}' + \hat{g}'_d \\ &= \frac{1}{2}\hat{g}_d^{-1}\hat{G}' - \frac{1}{2}\hat{g}_d^{-1}\left(\hat{g}_d^2\hat{V}' + \hat{V}'\hat{g}_d^2\right) + \hat{U}'\hat{g}_d.\end{aligned}\quad (3.17)$$

Il est donc clair que les modulations électriques de \hat{U} contribuent à \hat{g}' , mais pas à \hat{G}' . De même, les effets de la modulation électrique de \hat{V} ne sont pas totalement capturés par \hat{G}' .

En particulier, quand le système est suffisamment symétrique ($\hat{V}' = \hat{U}' = 0$) alors seulement les facteurs g principaux sont modulés par le champ électrique, et $\hat{g}' = \hat{g}'_d = \frac{1}{2}\hat{g}_d^{-1}\hat{G}'$ peut être complètement reconstruite à partir des mesures du tenseur Zeeman (\hat{G}), et de sa dépendance aux tensions de grilles (\hat{G}'). Ce cas de figure est le scénario de la *g-TMR* (*g-Tensor Modulation Resonance*) conventionnelle de la référence [58]. La *g-TMR* se manifeste principalement lorsque le potentiel de confinement est fortement anharmonique et que la modulation radio-fréquence change de manière significative sa forme sans briser ses symétries [voir figure 3.12 a)].

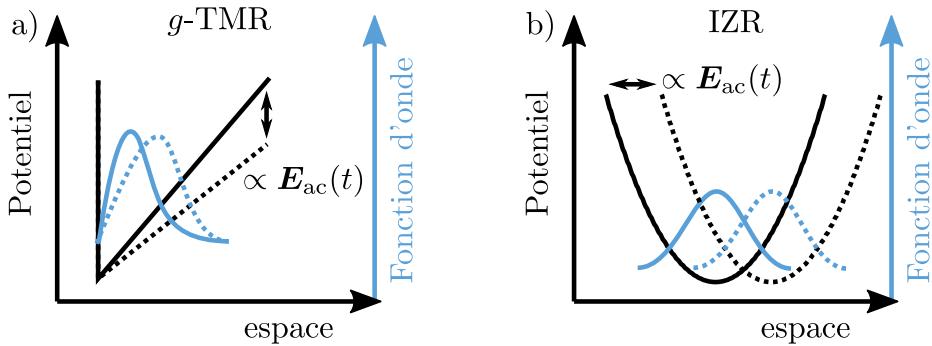


FIGURE 3.12 – Principes des deux paradigmes des mécanismes des oscillations de Rabi induites par un champ électrique oscillant E_{ac} . Ces oscillations de Rabi sont excitées via : a) un changement de forme de la fonction lors de l'excitation électrique variant les facteurs g_d principaux (*g-TMR*), b) un déplacement en bloc de la fonction d'onde dans un confinement harmonique laissant invariant les facteurs gyromagnétiques principaux (*IZR*)

En générale, \hat{g}' ne peut pas être reconstruite à partir de \hat{G} et \hat{G}' dès que les axes principaux magnétiques (\hat{V}), et la base de pseudo-spin (\hat{U}) dépendent des tensions de grilles. Par conséquent, nous séparons :

$$\hat{g}' = \hat{g}'_{\text{TMR}} + \hat{g}'_{\text{IZR}} \quad (3.18)$$

en deux contributions. L'une :

$$\hat{g}'_{\text{TMR}} = \hat{g}_d^{-1}\hat{G}'/2 \quad (3.19)$$

est la matrice *g-TMR* généralisée qui peut être extraite des variations du tenseur Zeeman, et l'autre :

$$\hat{g}'_{\text{IZR}} = -\hat{g}_d^{-1}(\hat{g}_d^2\hat{V}' + \hat{V}'\hat{g}_d^2)/2 + \hat{U}'\hat{g}_d \quad (3.20)$$

est la matrice *IZR* (*Iso-Zeeman Resonance*) qui laisse inchangée l'énergie Zeeman lorsque le champ électrique/les tensions de grilles varient. De façon correspondante, nous pouvons introduire deux mécanismes pour les oscillations de Rabi : la *g-TMR*, et l'*IZR*. Ainsi la fréquence de Rabi $f_R = |f_R|$, peut s'écrire :

$$f_R = f_{\text{TMR}} + f_{\text{IZR}}, \quad (3.21)$$

où f_{TMR} (respectivement f_{IZR}) est obtenue en remplaçant \hat{g}' par \hat{g}'_{TMR} (respectivement \hat{g}' par \hat{g}'_{IZR}) dans l'expression de f_R (3.14).

Un mécanisme de pur *IZR* se manifeste lors de la manipulation électrique d'un spin par un champ électrique radio-fréquence uniforme dans un potentiel de confinement harmonique [voir figure 3.12 b)]. En effet, sous l'effet du champ électrique, la forme du potentiel de confinement reste inchangée et

la fonction d'onde du qubit est déplacée comme un tout, et les facteurs g sont donc constants. Cette configuration n'entraîne aucune modulation du tenseur \hat{G} ($\hat{G}'' = 0$) mais induit bien des oscillations de Rabi ($\hat{g}' \neq 0$) [31]. L'annexe C discute de ce cas en détails. En général, g -TMR et IZR coexistent comme nous allons le voir par la suite.

3.4.2 Caractérisation expérimentale de la fréquence de Rabi

La fréquence de Rabi a été mesurée pour différentes orientations du champ magnétique. Elle est représentée sur la figure 3.13 a). Cette carte de Rabi est établie en variant l'amplitude du champ magnétique pour travailler à énergie Zeeman constante donc à fréquence de résonance fixe (9 GHz) de sorte que l'atténuation de la circuiterie autour du qubit ne varie pas d'une orientation à l'autre. La fréquence de Rabi est très anisotrope, et s'étale de 3 à 40 MHz.

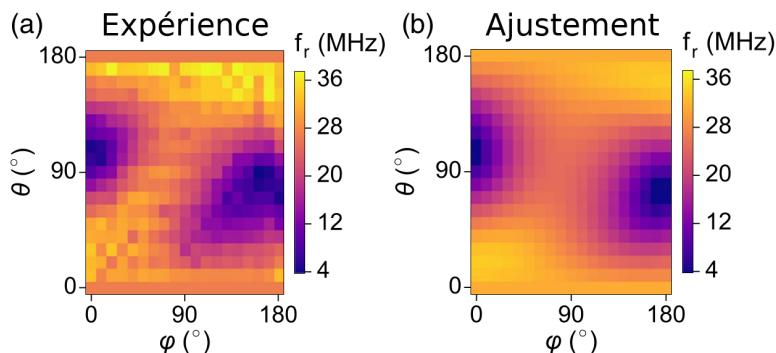


FIGURE 3.13 – a) Anisotropie de la fréquence de Rabi mesurée en fonction des angles θ et φ définissant l'orientation du champ magnétique à énergie Zeeman constante (9 GHz). b) Anisotropie de la fréquence de Rabi reproduite en ajustant les paramètres de l'équation (3.14). Adapté de la référence [41].

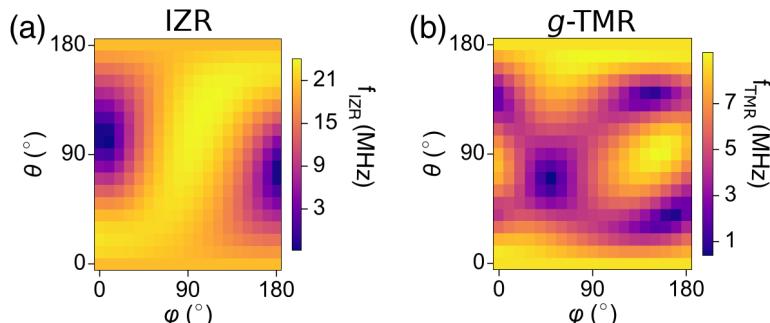


FIGURE 3.14 – a) Contribution iso-Zeeman EDSR à la fréquence de Rabi extraite des mesures expérimentales. b) Contribution g -TMR à la fréquence de Rabi extraite des mesures expérimentales. Adapté de la référence [41].

Nous rappelons que la matrice $\hat{g}_d = \text{diag}(2.08, 2.48, 1.62)$ a été caractérisée dans la sous-section 3.3.2. Le tenseur \hat{G}' est estimé à partir de deux tenseurs \hat{G} mesurés à des points de polarisations proches ($\delta V = V_1 - V_0 = 0.25$ mV). Dans les axes magnétiques principaux $\{\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}\}$ à $V = V_0$:

$$\hat{G}'(V_0) = \begin{pmatrix} -17.9 & 21.1 & 7.2 \\ 21.2 & 17.1 & -19.8 \\ 7.2 & -19.8 & 9.1 \end{pmatrix} V^{-1}. \quad (3.22)$$

\hat{G}' n'est pas diagonal ce qui suggère que les axes magnétiques principaux varient avec les tensions de grilles ($\hat{V}' \neq 0$). Ainsi, à partir de l'équation (3.19), dans la base $\{|\uparrow_d\rangle, |\downarrow_d\rangle\}$, la contribution g -TMR

est :

$$\hat{g}'_{TMR}(V_0) = \begin{pmatrix} -4.3 & 5.1 & 1.7 \\ 4.3 & 3.4 & -4.0 \\ 2.2 & -6.1 & 2.8 \end{pmatrix} V^{-1}. \quad (3.23)$$

Il se trouve que la matrice \hat{g}'_{IZR} [éq. (3.20)] peut se factoriser sous la forme $\hat{g}'_{IZR} = \hat{g}_d^{-1} \hat{A}$ où \hat{A} est une matrice anti-symétrique (${}^t A = -A$), ce qui laisse seulement trois degrés de liberté (sur 9) dans \hat{g}' , qui ne peuvent pas être déduits des mesures du tenseur Zeeman \hat{G} (et \hat{G}'). Ces trois inconnues peuvent être ajustées sur les mesures de la fréquence de Rabi pour quelques orientations de champ magnétique, et ainsi nous trouvons :

$$\hat{g}'_{IZR}(V_0) = \begin{pmatrix} 0 & -7.5 & -4.9 \\ 6.2 & 0 & -24.0 \\ 6.4 & 36.6 & 0 \end{pmatrix} V^{-1} \quad (3.24)$$

Finalement, dans les axes magnétiques principaux et dans la base $\{|\uparrow_d\rangle, |\downarrow_d\rangle\}$ dans laquelle la matrice $\hat{g}(V_0)$ est diagonale, la matrice \hat{g}' est :

$$\hat{g}'(V_0) = \begin{pmatrix} -4.3 & -2.4 & -3.2 \\ 10.5 & 3.4 & -28.0 \\ 8.6 & 30.5 & 2.8 \end{pmatrix} V^{-1}. \quad (3.25)$$

La fréquence de Rabi calculée à partir des matrices \hat{g}_d et \hat{g}' reconstruites expérimentalement est représentée dans la figure 3.13 b). L'amplitude de modulation estimée est $V_{ac} = 0.41$ mV. La figure 3.14 représente les contributions IZR ($|\mathbf{f}_{IZR}|$) et g-TMR ($|\mathbf{f}_{TMR}|$) à la fréquence de Rabi expérimentale. Les deux mécanismes coexistent mais l'IZR est plus importante ici.

La forte composante IZR suggère que la fonction d'onde du qubit est plutôt localisée entre les deux grilles que sous la grille 2. Cela permettrait en effet de la déplacer comme un tout le long de l'axe du nano-fil sous l'effet du champ électrique radio-fréquence sans trop changer les facteurs g principaux et la matrice \hat{G}' . Les bras de leviers extraits de la figure 3.5 b) montrent que la boîte 2 est contrôlée presque identiquement par les grilles 1 et 2 ce qui confirme cette hypothèse. Nous y reviendrons au chapitre 4.

3.5 Conclusions

Nous avons mis en évidence la résonance de spin et le contrôle d'oscillations cohérentes entre les états de spin d'un qubit de trou défini électrostatiquement par des grilles dans un nanofil de silicium.

Les mesures des facteurs gyromagnétiques de ce qubit montrent une forte anisotropie avec l'orientation du champ magnétique suggérant un fort mélange trous lourds/légers. Cette anisotropie est capturée par un tenseur \hat{G} extrait à partir d'un formalisme de matrice \hat{g} permettant de décrire le système à deux niveaux du qubit de façon linéaire avec le champ magnétique. À partir de la mesure de ce tenseur, ce formalisme a permis d'extraire les facteurs g principaux ainsi que les axes magnétiques principaux qui diagonalisent ce tenseur, ce qui permet d'écrire de façon diagonale la matrice $\hat{g} = \hat{g}_d$ dans une base de spin restant inconnue expérimentalement.

Ensuite, nous avons démontré que la fréquence de Rabi est caractérisée par la matrice \hat{g} et sa variation \hat{g}' par rapport à la tension de grille où la modulation radio-fréquence est appliquée. Cette expression permet de décrire les oscillations des états du qubit de manière compacte. Cependant, nous avons vu que la mesure de la matrice \hat{g}' n'est pas 'direct'. Une partie de cette matrice est caractérisée par les variations du tenseur \hat{G} ce qui correspond au mécanisme de résonance par modulation du tenseur \hat{G} (g-TMR) mis en évidence par Kato *et al* [58]. La dépendance électrique du tenseur \hat{G} (\hat{G}') peut être extraire à partir de la mesure du tenseur \hat{G} à deux polarisations électriques proches. La seconde partie de cette matrice \hat{g}' ne correspond à aucune variation du tenseur \hat{G} ; elle est donc appelée résonance iso-Zeeman (IZR). Cette matrice IZR a été ajustée pour correspondre à l'anisotropie de la fréquence de Rabi observée. Finalement la formalisme de la matrice \hat{g} a mis en évidence que le mécanisme de l'IZR est prépondérant

dans ce dispositif expérimental. Cela suggère que la fonction d’onde du qubit sondé est localisée entre les deux grilles plutôt que sous la grille 2 comme attendu.

Pour finir, le formalisme de la matrice \hat{g} est un outil d’interprétation des résultats expérimentaux mais, comme nous allons le voir dans le chapitre 4, permet aussi un calcul numérique rapide et efficace pour déterminer l’anisotropie des propriétés d’un qubit de spin dans les hypothèses de ce formalisme.

Chapitre 4

Formalismes de calcul de la fréquence de Rabi et applications

Dans ce chapitre, nous introduisons les éléments clefs de la manipulation électrique d'un qubit spin-orbite. Ensuite nous présentons trois formalismes qui permettent de caractériser la vitesse des oscillations de Rabi d'un tel qubit : le premier est la définition même de la fréquence de Rabi, le second est le formalisme de la matrice gyromagnétique introduite au chapitre 3, et le dernier, issu d'un développement en série de perturbations en champ magnétique, explicite les couplages électromagnétiques entre les états de la boîte quantique. Puis nous discutons l'impact des symétries d'un tel qubit sur l'anisotropie de ses facteurs gyromagnétiques et de la fréquence de Rabi par rapport à l'orientation du champ magnétique. Ensuite nous appliquons les éléments théoriques précédemment décrits à un qubit spin-orbite de trou dans un nanofil de silicium. Nous présentons le dispositif et nous montrons comment l'étude des symétries du système permet d'expliquer l'anisotropie de la fréquence de Rabi calculée dans ce dispositif. Finalement nous comparons les mesures expérimentales du chapitre 3 avec les simulations faites dans ce chapitre, et nous discutons la nature et la localisation du qubit dans le dispositif expérimental.

4.1 Formalismes de calcul de la fréquence de Rabi

Dans cette section, nous mettons en évidence les ingrédients nécessaires pour manipuler et contrôler le spin d'un qubit semiconducteur par un champ électrique radio-fréquence. La manipulation se manifeste par des oscillations de l'état du qubit entre deux états propres, dont la vitesse est caractérisée par la fréquence de Rabi. Ici, nous étudions un qubit spin-orbite dont le couplage spin-orbite est intrinsèque, mais le raisonnement peut se généraliser à un couplage spin-orbite artificiel créé par un micro-aimant [27] par exemple.

4.1.1 Présentation générale

Nous considérons une boîte quantique dont le potentiel de confinement est modulé par une grille métallique (en réalité, le potentiel du qubit peut être modulé par plusieurs grilles et le raisonnement à une grille de cette section peut facilement se généraliser à plusieurs grilles). De manière générale, nous notons V la tension appliquée à la grille. Par la suite nous appelons V_0 la tension électrique statique de cette grille, et δV une petite modulation de tension de cette même grille. La figure 4.1 schématisse le système étudié.

Polarisation électrique statique ...

Nous polarisons tout d'abord la tension de la grille à V_0 sans champ magnétique extérieur ($\mathbf{B} = \mathbf{0}$). Nous notons $\hat{H}_0(V_0)$ l'hamiltonien de système. Il est important de noter que cet hamiltonien inclut tous les effets de couplage spin-orbite (intrinsèque et extrinsèque) du système. De plus, nous notons $|n, \sigma\rangle$

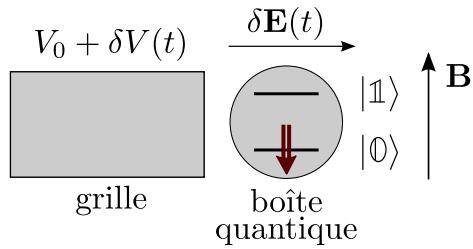


FIGURE 4.1 – Modèle d'un qubit de spin. Une modulation radio-fréquence $\delta V(t)$, résonnante avec les états du qubit, appliquée à la grille entraîne des oscillations entre les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ d'une boîte quantique soumise à un champ magnétique statique \mathbf{B} . V_0 est la tension électrique statique de la grille. $\delta\mathbf{E}(t)$ est la modulation du champ électrique induite par δV .

(respectivement $E_{n,\sigma}$) les états propres (respectivement les énergies propres) de \hat{H}_0 , avec $n \geq 0$ et $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ un index de “pseudo-spin”. En effet, le spin n'est pas un bon nombre quantique en présence de couplage spin-orbite, mais les états propres sont dégénérés par paires (dégénérence de Kramers) : $E_{n,\uparrow} = E_{n,\downarrow} = E_n$ et $|n, \uparrow\rangle = T|n, \downarrow\rangle$ (à une phase arbitraire près) où T est l'opérateur de renversement du temps.

... champ magnétique ...

Nous plaçons maintenant le système précédemment décrit dans un champ magnétique statique et homogène \mathbf{B} . La présence de ce champ magnétique lève la dégénérence des paires de Kramers. Nous pouvons ainsi définir de manière univoque les deux états du qubit $|0\rangle$ et $|1\rangle$ provenant, sans perte de généralité, de la paire de Kramers de plus basse énergie (mais le choix peut porter sur n'importe quelle autre paire). Ces deux états sont séparés par l'énergie Zeeman $E_Z = g\mu_B B$, où μ_B est le magnéton de Bohr, g est le facteur gyromagnétique (qui peut dépendre de l'orientation du champ magnétique \mathbf{B} , et de la polarisation des grilles), et $B = \|\mathbf{B}\|$. Pour des raisons pratiques, nous développons l'hamiltonien du système $\hat{H}(V_0, \mathbf{B})$ en puissances de B :

$$\begin{aligned}\hat{H}(V_0, \mathbf{B}) &= \hat{H}_0(V_0) - B_x \hat{M}_{1,x} - B_y \hat{M}_{1,y} - B_z \hat{M}_{1,z} + \mathcal{O}(B^2) \\ &= \hat{H}_0(V_0) - \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 + \mathcal{O}(B^2),\end{aligned}\quad (4.1)$$

où $\hat{H}_0(V_0)$ est l'hamiltonien sans champ magnétique, et $\hat{M}_{1,\alpha} = -\partial\hat{H}/\partial B_\alpha|_{\mathbf{B}=0}$. Dans la suite, nous donnerons la relation entre le facteur g et l'opérateur $\hat{\mathbf{M}}_1$. De plus, nous supposons que l'opérateur $\hat{\mathbf{M}}_1 = (\hat{M}_{1,x}, \hat{M}_{1,y}, \hat{M}_{1,z})$ est indépendant de la polarisation des grilles V_0 . Typiquement l'opérateur \mathbf{M}_1 contient l'hamiltonien Zeeman, et la contribution linéaire en champ magnétique provenant de l'effet du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes. Le terme $\mathcal{O}(B^2)$ provient de la contribution quadratique en champ magnétique du potentiel vecteur.

... et champ électrique radio-fréquence

Enfin nous appliquons une petite modulation δV sur la grille autour du point de référence V_0 , et nous développons $\hat{H}(V, \mathbf{B})$ en puissances de $\delta V = V - V_0$:

$$\hat{H}(V, \mathbf{B}) = \hat{H}(V_0, \mathbf{B}) - e\delta V \hat{D}_1 + \mathcal{O}(\delta V^2) \quad (4.2)$$

où $\hat{H}(V_0, \mathbf{B})$ est l'hamiltonien sous champ magnétique sans modulation électrique [défini par l'équation (4.1)], et $\hat{D}_1(\mathbf{r}) = \partial\hat{V}_{elec}(V, \mathbf{r})/\partial V|_{V=V_0}$ est l'opérateur de la dérivée du potentiel électrique total $\hat{V}_{elec}(V, \mathbf{r})$ dans le dispositif par rapport à la tension de grille V qui est modulée.

Cette modulation peut être un signal radio-fréquence de la forme $\delta V(t) = V_{ac} \sin(2\pi f_{ac} t + \varphi)$ avec une amplitude $V_{ac} > 0$, une fréquence f_{ac} , et une phase arbitraire φ . À la résonance ($hf_{ac} = E_Z$),

cette modulation radio-fréquence entraîne des oscillations cohérentes entre les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, avec une fréquence de Rabi :

$$f_R = \frac{e}{\hbar} V_{\text{ac}} \left| \langle 1 | \hat{D}_1 | 0 \rangle \right|. \quad (4.3)$$

Nous notons que cette équation pour la fréquence de Rabi f_R est d'ordre un en V_{ac} , mais contient tous les ordres en champ magnétique, à travers la dépendance de $|0\rangle$ et de $|1\rangle$ en \mathbf{B} . Ainsi, nous appelons cette expression "calcul direct" de la fréquence de Rabi.

4.1.2 Traitement du champ magnétique en perturbation

À partir de maintenant, à champ magnétique \mathbf{B} nul, nous supposons que les états $\{|n, \sigma\rangle\}$, et les énergies $E_{n,\sigma} \equiv E_{n,\uparrow} = E_{n,\downarrow}$ sont connus à la polarisation électrique $V = V_0$. Nous rappelons que les états $|n, \uparrow\rangle$ et $|n, \downarrow\rangle$ étant dégénérés, ils sont définis à une transformation unitaire près. Nous allons nous intéresser à la paire de Kramers fondamentale $\{|0, \uparrow\rangle, |0, \downarrow\rangle\}$, mais le raisonnement peut être généralisé à n'importe quelles paires de Kramers.

Fréquence de Rabi à champ magnétique nul

Comme nous l'avons mentionné plus haut, sans champ magnétique extérieur, les états du qubit ne sont pas bien définis (ils sont dégénérés) et il n'est pas possible d'induire des oscillations cohérentes entre ces états. En effet, quelque soit le choix des états dégénérés $\{|0, \uparrow\rangle, |0, \downarrow\rangle\}$, les états du qubit s'écrivent à une phase près $\langle \mathbf{r} | 0, \downarrow \rangle = u(\mathbf{r}) |\uparrow\rangle + v(\mathbf{r}) |\downarrow\rangle$ et $\langle \mathbf{r} | 0, \uparrow \rangle = \langle \mathbf{r} | T | 0, \downarrow \rangle = v^*(\mathbf{r}) |\uparrow\rangle - u^*(\mathbf{r}) |\downarrow\rangle$ où $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ sont les composantes physique du spin. Et donc :

$$\langle 0, \uparrow | \hat{D}_1 | 0, \downarrow \rangle = \int d^3 \mathbf{r} D_1(\mathbf{r}) [v(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r})v(\mathbf{r})] = 0, \quad (4.4)$$

car \hat{D}_1 est un opérateur diagonal dans l'espace des spins physiques. La fréquence de Rabi (4.3) est donc nulle.

L'application d'un champ magnétique brise la symétrie de renversement du temps liant les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, et permet en principe d'entretenir des oscillations entre ces états (et une fréquence de Rabi non nulle). Nous allons traiter le champ magnétique en perturbation à l'ordre zéro puis à l'ordre un.

Champ magnétique : ordre zéro

Les états d'ordre zéro $|0_0\rangle$ et $|1_0\rangle$ sont les états propres de la matrice $H_1(\mathbf{B})$:

$$H_1(\mathbf{B}) = - \begin{pmatrix} \langle 0, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \uparrow \rangle & \langle 0, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \downarrow \rangle \\ \langle 0, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \uparrow \rangle & \langle 0, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \downarrow \rangle \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

où $\hat{\mathbf{M}}_1$ est l'opérateur de la réponse linéaire au champ magnétique défini par l'équation (4.1). Nous notons que $\langle 0, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \downarrow \rangle = -\langle 0, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \uparrow \rangle$ puisque le renversement du temps transforme \mathbf{B} en $-\mathbf{B}$. À cet ordre en perturbation, la fréquence de Rabi f_R reste toutefois nulle. En effet, les états propres d'ordre zéro en perturbation qui diagonalisent $H_1(\mathbf{B})$, $|0_0\rangle = \alpha|0, \uparrow\rangle + \beta|0, \downarrow\rangle$ et $|1_0\rangle = \beta^*|0, \uparrow\rangle - \alpha^*|0, \downarrow\rangle$ (avec α, β des nombres complexes) ont la même forme que $\{|0, \uparrow\rangle, |0, \downarrow\rangle\}$:

$$|0_0\rangle = \tilde{u}(\mathbf{r}) |\uparrow\rangle + \tilde{v}(\mathbf{r}) |\downarrow\rangle \quad (4.6a)$$

$$|1_0\rangle = -\tilde{v}^*(\mathbf{r}) |\uparrow\rangle + \tilde{u}^*(\mathbf{r}) |\downarrow\rangle, \quad (4.6b)$$

où $\tilde{u}(\mathbf{r}) = \alpha u(\mathbf{r}) + \beta v^*(\mathbf{r})$, et $\tilde{v}(\mathbf{r}) = \alpha v(\mathbf{r}) - \beta u^*(\mathbf{r})$. Par conséquent $\langle 1_0 | \hat{D}_1 | 0_0 \rangle$ est nul. À cet ordre, la symétrie de renversement du temps n'est pas brisée : elle le sera à l'ordre un.

Champ magnétique : ordre un

Les états à l'ordre un $\{|0_1\rangle, |\mathbb{1}_1\rangle\}$ sont :

$$|0_1\rangle = |0_0\rangle - \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle n, \sigma | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0_0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, \sigma\rangle \quad (4.7a)$$

$$|\mathbb{1}_1\rangle = |\mathbb{1}_0\rangle - \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle n, \sigma | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | \mathbb{1}_0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, \sigma\rangle, \quad (4.7b)$$

et donc, la fréquence de Rabi devient à l'ordre un en \mathbf{B} :

$$\begin{aligned} f_R &= \frac{e}{\hbar} V_{\text{ac}} \left| \langle \mathbb{1}_1 | \hat{D}_1 | 0_1 \rangle \right| \\ &= \frac{e}{\hbar} B V_{\text{ac}} \left| \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle \mathbb{1}_0 | \hat{D}_1 | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0_0 \rangle}{E_0 - E_n} + \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle \mathbb{1}_0 | \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | \hat{D}_1 | 0_0 \rangle}{E_0 - E_n} \right|, \end{aligned} \quad (4.8)$$

où $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$ est le vecteur unitaire de même direction et même sens que le champ magnétique. De manière générale, la fréquence de Rabi définie par l'équation (4.8) est non nulle.

Les équations ci-dessus fournissent une décomposition et une interprétation physique à la fréquence de Rabi : les couplages induits par les champs électrique et magnétique entre les différents états du qubit sont explicites. Nous interpréterons les résultats de la section 4.3 à l'aide de cette décomposition.

4.1.3 Formalisme de la matrice gyromagnétique

Dans cette partie, nous détaillons le formalisme de la matrice gyromagnétique \hat{g} en établissant dans un premier temps la relation entre la matrice \hat{g} et l'opérateur $\hat{\mathbf{M}}_1$. Puis nous rappelons l'expression de la fréquence de Rabi dans le cadre de ce formalisme. Celle-ci dépend de la matrice \hat{g} et de sa dérivée par rapport à la tension modulée \hat{g}' .

Hamiltonien effectif

Dans cette partie nous démontrons que l'hamiltonien effectif (3.3) faisant intervenir une matrice \hat{g} est un hamiltonien exact d'ordre un en champ magnétique. Reprenons l'équation (4.1) en prenant en compte seulement le terme linéaire en champ magnétique qui est le seul pertinent pour notre étude. Nous pouvons écrire :

$$\hat{H}(V_0, \mathbf{B}) = \hat{H}_0(V_0) - \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1. \quad (4.9)$$

Nous supposons que les états propres $\{|n, \sigma\rangle\}$ de $\hat{H}_0(V_0)$ ayant pour énergies $\{E_{n,\sigma}\}$ sont connues. Par conséquent, dans cette base, H_0 est diagonale avec les éléments $E_{n,\sigma}$ sur celle-ci. Nous traitons le terme $\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1$ lié au champ magnétique en perturbation à l'ordre zéro pour les états et à l'ordre un pour les énergies de chaque paire de Kramers. Ainsi, l'hamiltonien d'ordre un en champ magnétique $H^{(n)}$ de la paire de Kramers n , est l'hamiltonien deux par deux [de manière similaire à l'équation (4.5)] vérifiant :

$$H^{(n)} = E_n \cdot \mathbb{1}_2 - \begin{pmatrix} \langle n, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle & \langle n, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \downarrow \rangle \\ \langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle & \langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \downarrow \rangle \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

où $\mathbb{1}_2$ est la matrice identité de taille 2.

Pour alléger les notations, nous détaillons l'expression de cet hamiltonien pour une paire de Kramers donnée n , et nous notons cette paire $|\uparrow\rangle \equiv |n, \uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle \equiv |n, \downarrow\rangle$, et $H \equiv H^{(n)}$. Nous choisissons comme référence d'énergie $E_n = 0$, de sorte que l'hamiltonien peut s'écrire :

$$H = -\text{Re}[\langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle] \cdot \sigma_1 - \text{Im}[\langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle] \cdot \sigma_2 - \langle n, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle \cdot \sigma_3, \quad (4.11)$$

car $\langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \downarrow \rangle = -\langle n, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | 0, \uparrow \rangle$ puisque le renversement du temps transforme \mathbf{B} en $-\mathbf{B}$, ce qui se factorise en :

$$H = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \cdot \begin{pmatrix} -\text{Re}[\langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle] \\ -\text{Im}[\langle n, \downarrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle] \\ -\langle n, \uparrow | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{M}}_1 | n, \uparrow \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Finalement, l'hamiltonien effectif de cette paire de Kramers peut s'écrire :

$$H(V_0, \mathbf{B}) = \frac{1}{2} \mu_B {}^t \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{g}(V_0) \cdot \mathbf{B} \quad (4.13)$$

avec :

$$\hat{g}(V_0) = -\frac{2}{\mu_B} \times \begin{pmatrix} \text{Re}\langle \downarrow | M_{1,x} | \uparrow \rangle & \text{Re}\langle \downarrow | M_{1,y} | \uparrow \rangle & \text{Re}\langle \downarrow | M_{1,z} | \uparrow \rangle \\ \text{Im}\langle \downarrow | M_{1,x} | \uparrow \rangle & \text{Im}\langle \downarrow | M_{1,y} | \uparrow \rangle & \text{Im}\langle \downarrow | M_{1,z} | \uparrow \rangle \\ \langle \uparrow | M_{1,x} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | M_{1,y} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | M_{1,z} | \uparrow \rangle \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

s'identifiant à une matrice gyromagnétique, et $\boldsymbol{\sigma} = {}^t(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ les matrices de Pauli. Il est important de rappeler que la matrice \hat{g} , qui est associée à une paire de Kramers particulière, est une matrice réelle qui dépend de la polarisation des grilles V_0 par l'intermédiaire des états de cette paire. De plus, cette matrice \hat{g} dépend non seulement du choix des axes x , y et z du champ magnétique, mais aussi du choix des états de la paire de Kramers considérée (définis à une transformation unitaire près) : l'écriture de la matrice \hat{g} n'est donc pas unique. Cet hamiltonien effectif est valide tant que le couplage magnétique entre les différentes paires de Kramers reste petit devant leur séparation en énergie.

De plus, à partir de l'équation (4.13) (voir la section 3.3.1) la séparation Zeeman des énergies propres est :

$$E_Z = \mu_B g B, \quad (4.15)$$

avec $g = |\hat{g}(V_0) \cdot \mathbf{b}|$ et $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$. Cette dernière équation et l'équation (4.14) montrent le lien entre le facteur g , la matrice \hat{g} , et l'opérateur \mathbf{M}_1 .

Fréquence de Rabi

Cette section est un rappel de l'expression de la fréquence de Rabi dans le cadre du formalisme de la matrice \hat{g} (voir section 3.4.1 pour les détails). Pour un signal électrique radio-fréquence $\delta V(t) = V_{\text{ac}} \sin(2\pi f_L t)$ resonant ($hf_L = E_Z$) avec l'énergie Zeeman du qubit, la fréquence de Rabi f_R s'écrit [58, 59] :

$$f_R = \frac{\mu_B B V_{\text{ac}}}{2hg} \left| [\hat{g}(V_0) \mathbf{b}] \times [\hat{g}'(V_0) \mathbf{b}] \right|, \quad (4.16)$$

où $\hat{g}' = \partial \hat{g} / \partial V$ est la dérivée de la matrice \hat{g} par rapport à la tension qui est modulée. Puisque les équations (4.8) et (4.16) sont toutes les deux valides à l'ordre un en \mathbf{B} et V_{ac} , elles doivent être équivalentes. Cela est montré en annexe D. Les matrices $\hat{g}(V_0)$ et $\hat{g}'(V_0)$ fournissent une description complète (pour toutes les orientations de champ magnétique) des fréquences de Larmor et de Rabi du qubit. En effet, elles permettent de reconstruire les cartes de fréquence de Larmor et de Rabi à partir de seules les fonctions d'ondes calculées à $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ [éqs. (4.15) et (4.16)] alors que l'évaluation directe [éq. (4.3)] nécessite de recalculer les fonctions pour chaque orientation de \mathbf{B} . Numériquement, il est nécessaire de prendre des précautions pour le calcul de \hat{g}' (ces précautions sont détaillées dans l'annexe E).

4.2 Effets des symétries sur la matrice gyromagnétique et la fréquence de Rabi

Dans cette section, nous discutons l'impact des symétries spatiales d'un qubit spin-orbite sur la forme que peuvent prendre les matrices \hat{g} et \hat{g}' , et sur l'anisotropie de la fréquence de Rabi. De telles

considérations de symétries peuvent aider l’analyse de données expérimentales et numériques. Nous détaillons en particulier les effets de plans miroirs car ils expliquent les tendances mesurées dans les expériences présentées dans le chapitre 3 et dans les expériences numériques de la section 4.3.

Nous considérons un repère orthonormal quelconque $\{x, y, z\}$. Nous introduisons une liste hiérarchisée des symétries spatiales du qubit à champ magnétique nul :

1. Pas de symétrie particulière
2. Un plan miroir, σ_{yz} perpendiculaire à l’axe x (groupe double C_s)
3. Deux plans miroirs, σ_{yz} et σ_{zx} . Un tel système doit aussi présenter un axe de rotation d’ordre deux autour de z (groupe double C_{2v})
4. Trois plans miroirs, σ_{yz} , σ_{zx} et σ_{xy} . Un tel système doit aussi présenter des axes de rotation d’ordre deux autour de x , y et z et un centre d’inversion (groupe double D_{2h})

Nous notons que le système peut éventuellement basculer d’un groupe à un autre en fonction du champ électrique appliqué par des grilles extérieures (voir figure 4.2).

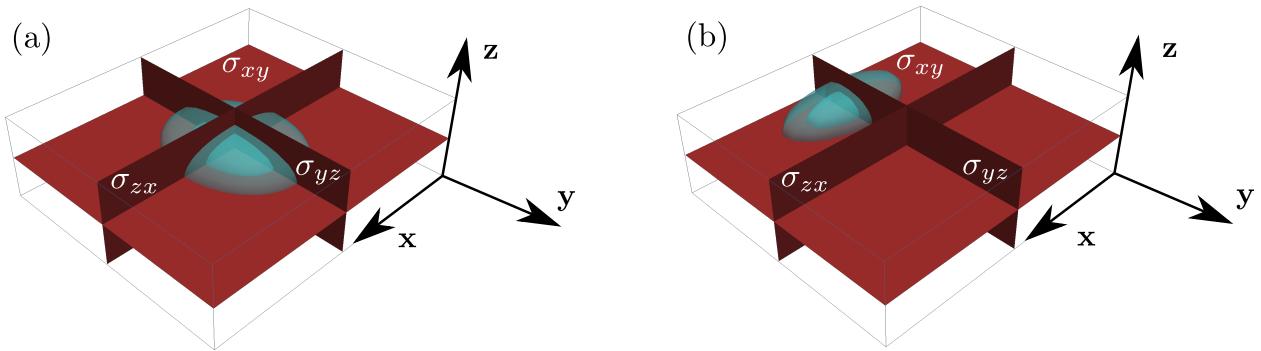


FIGURE 4.2 – Illustration des symétries considérées dans ce travail sur le modèle d’une particule dans une boîte. Les surfaces de niveaux du module carré de la fonction d’onde du qubit sont tracées en bleu. (a) La boîte (et le module carré de la fonction d’onde) comportent trois plans miroirs, σ_{yz} , σ_{zx} et σ_{xy} (en rouge). (b) L’application d’un champ électrique statique selon l’axe y déforme la fonction d’onde et brise le plan σ_{zx} .

4.2.1 Forme de la matrice gyromagnétique

Chaque plan miroir impose des contraintes spécifiques à la forme de la matrice \hat{g} . Les arguments, issus de la théorie des groupes [60] sont détaillés dans l’annexe F. Nous exposons les principales conclusions ici. À partir de maintenant, nous écrivons la matrice \hat{g} et sa dérivée dans le système d’axes magnétiques $\{x, y, z\}$.

Forme de la matrice \hat{g}

Dans tous les groupes de symétrie précédemment mentionnés, il existe une base $\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ pour la paire de Kramers dans laquelle les plans miroirs imposent à certains éléments de \hat{g} d’être nuls. Dans cette base, la matrice \hat{g} prend la forme donnée dans la table 4.1 pour les différents plans miroirs, et prend la forme donnée dans la table 4.2 pour les différents groupes de symétrie. Les formes de la matrice \hat{g} obtenues dans la table 4.2 sont les intersections des éléments non nuls de la table 4.1 pour chaque plan miroir appartenant aux groupes de symétrie.

Nous avons vu dans le chapitre 3, que les axes magnétiques principaux diagonalisent le tenseur $\hat{G} = {}^t\hat{g} \cdot \hat{g}$. Pour chaque plan miroir, le tenseur \hat{G} a la même forme que la matrice \hat{g} . Par conséquent, il est certain qu’un axe magnétique principal est perpendiculaire à chaque plan miroir. Par exemple, quand il y a un seul plan miroir σ_{yz} , l’axe x est un axe magnétique principal, les deux autres axes principaux

$\sigma_{\alpha\beta}$	σ_{yz}	σ_{zx}	σ_{xy}
\hat{g}	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & \bullet \\ 0 & \bullet & 0 \\ \bullet & 0 & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & 0 \\ \bullet & \bullet & 0 \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}$

TABLE 4.1 – Forme de \hat{g} imposée par chaque plan miroir $\sigma_{\alpha\beta}$. Les points noirs sont les éléments pouvant être non nuls.

Groupe	C_s	C_{2v}	D_{2h}
\hat{g}	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & 0 \\ 0 & \bullet & 0 \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & 0 \\ 0 & \bullet & 0 \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}$

TABLE 4.2 – Forme de la matrice \hat{g} dans chaque groupe de symétrie. Les points noirs sont les éléments pouvant être non nuls.

étant orthogonaux (mais à priori arbitraires) dans le plan (yz) . Tout plan miroir additionnel vérifie tous les axes magnétiques sur $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\}$.

L’analyse de la forme de \hat{g}' dans cette même base dévoile l’anisotropie de la fréquence de Rabi pour chaque groupe de symétrie.

Forme de la matrice \hat{g}'

Le point de départ est de considérer que le système au point de polarisation statique ($V = V_0$) comporte un plan miroir $\sigma_{\alpha\beta}$, et d’étudier comment se transforme la réponse linéaire du potentiel électrique $D_1(\mathbf{r})$ à une modulation radio-fréquence de tension sur la grille. En effet, cette réponse peut briser les symétries du système au point $V = V_0$. Nous pouvons alors distinguer au moins trois comportements différents :

1. La modulation radio-fréquence ne brise pas $\sigma_{\alpha\beta}$: $D_1(\mathbf{r})$ est invariant par rapport à cette transformation [$D_1(\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})) = D_1(\mathbf{r})$]. De manière équivalente, la modulation du champ électrique $\mathbf{E}_1(\mathbf{r}) = -\nabla D_1(\mathbf{r})$ est ‘paire’ sous $\sigma_{\alpha\beta}$:

$$\mathbf{E}_1(\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})) = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{E}_1(\mathbf{r})). \quad (4.17)$$

Dans ce cas, $\sigma_{\alpha\beta}$ impose la même contrainte sur \hat{g}' que sur \hat{g} (table 4.1 et première ligne de la table 4.3). Ce comportement représenté dans la figure 4.3 a), est par exemple rencontré quand le champ électrique \mathbf{E}_1 est homogène dans le plan $(\alpha\beta)$.

2. La modulation radio-fréquence brise le plan miroir $\sigma_{\alpha\beta}$ ($D_1(\mathbf{r})$ n’est pas invariant) mais \mathbf{E}_1 est ‘impair’ par $\sigma_{\alpha\beta}$:

$$\mathbf{E}_1(\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})) = -\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{E}_1(\mathbf{r})). \quad (4.18)$$

De manière équivalente, $D_1(\mathbf{r})$ est impair par cette transformation à une constante K près, i.e. $D_1(\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r})) + D_1(\mathbf{r}) = K$, puisqu’un décalage homogène du potentiel dans le dispositif ne doit pas avoir d’effet sur la physique du système. Alors $\sigma_{\alpha\beta}$ impose les contraintes sur \hat{g}' listées dans la seconde ligne de la table 4.3. Ce comportement représenté dans la figure 4.3 b) est par exemple rencontré quand le champ électrique \mathbf{E}_1 est homogène et perpendiculaire au plan $(\alpha\beta)$.

3. La modulation radio-fréquence brise le plan miroir $\sigma_{\alpha\beta}$, mais $\mathbf{E}_1(\mathbf{r})$ ne montre pas de relation de symétrie particulière par cette transformation. Ainsi, $\sigma_{\alpha\beta}$ n’impose pas en général de condition sur \hat{g}' (troisième ligne de la table 4.3)

La forme finale de \hat{g}' est donnée par l’intersection de tous les éléments pouvant être non nuls dans la table 4.3, pour toutes les opérations des groupes de symétrie à la polarisation électrique considérée.

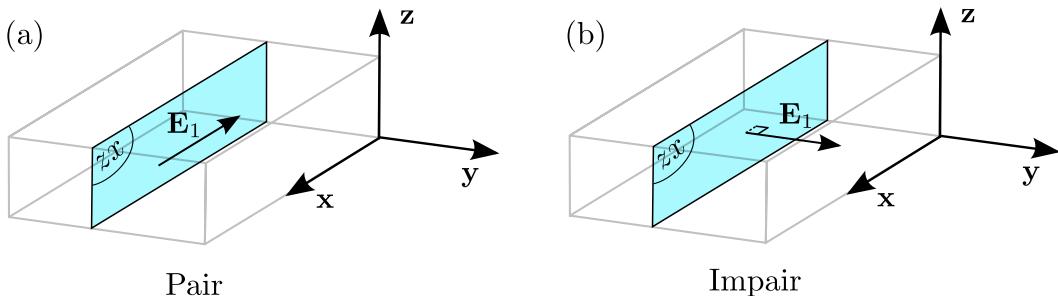


FIGURE 4.3 – Illustration des symétries du champ électrique radio-fréquence E_1 . Le plan miroir considéré ici est le plan (zx). (a) Ce champ électrique homogène appartenant à ce plan est 'pair'. (b) Ce champ électrique homogène perpendiculaire à ce plan est 'impair'.

$\sigma_{\alpha\beta}$	σ_{yz}	σ_{zx}	σ_{xy}
E ₁ pair	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & 0 & \bullet \\ 0 & \bullet & 0 \\ \bullet & 0 & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & 0 \\ \bullet & \bullet & 0 \\ 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix}$
E ₁ impair	$\begin{pmatrix} 0 & \bullet & \bullet \\ \bullet & 0 & 0 \\ \bullet & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \bullet & 0 \\ \bullet & 0 & \bullet \\ 0 & \bullet & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet \\ \bullet & \bullet & 0 \end{pmatrix}$
Autre	$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$

TABLE 4.3 – Forme de \hat{g}' imposées par chaque plan miroir $\sigma_{\alpha\beta}$ selon que l'ordre un du champ électrique est pair [$E_1(\sigma_{\alpha\beta}(r)) = \sigma_{\alpha\beta}(E_1(r))$], impair [$E_1(\sigma_{\alpha\beta}(r)) = -\sigma_{\alpha\beta}(E_1(r))$], ou ne montre pas de relation particulière par cette transformation. Les points noirs sont les éléments pouvant être non nuls. La figure 4.3 représente des exemples de champs électriques E_1 pair et impair.

4.2.2 Anisotropie de la fréquence de Rabi

Les tables 4.2 et 4.3 peuvent être utilisées pour analyser l'anisotropie de la fréquence de Rabi, en substituant la forme des matrices \hat{g} et \hat{g}' dans l'équation (4.16). En guise d'illustration, nous discutons par la suite deux cas pertinents pour la section 4.3 (et illustrés dans la figure 4.2).

Faible symétrie

Commençons par considérer un dispositif avec un simple plan miroir σ_{yz} au point de polarisation $V = V_0$ (groupe double C_s). Nous supposons que la modulation radio-fréquence autour de ce point ne brise pas le plan miroir. Alors, selon les tables 4.2 et 4.3, dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ appropriée :

$$\hat{g}(V_0) = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 \\ 0 & g_{22} & g_{23} \\ 0 & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}; \hat{g}'(V_0) = \begin{pmatrix} g'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & g'_{22} & g'_{23} \\ 0 & g'_{32} & g'_{33} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Si $\mathbf{B} = B\mathbf{x}$, alors $\hat{g}(V_0)\mathbf{b} = g_{11}\mathbf{x}$, et $\hat{g}'(V_0)\mathbf{b} = g'_{11}\mathbf{x}$, et ainsi $f_R \propto |[\hat{g}(V_0)\mathbf{b}] \times [\hat{g}'(V_0)\mathbf{b}]| = 0$. Il n'y a pas d'oscillations de Rabi quand le champ magnétique est perpendiculaire au plan miroir.

Haute symétrie

Nous supposons que ce même dispositif a deux plans miroirs supplémentaires σ_{zx} et σ_{xy} à un autre point de polarisation $V = V'_0$ (groupe double D_{2h}). Nous supposons que la modulation radio-fréquence autour de V'_0 brise ces plans miroirs, mais que le champ électrique E_1 est (en première approximation) homogène et parallèle à y , donc pair par σ_{yz} et σ_{xy} mais impair par σ_{zx} . Alors,

$$\hat{g}(V'_0) = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 \\ 0 & g_{22} & 0 \\ 0 & 0 & g_{33} \end{pmatrix} \text{ mais } \hat{g}'(V'_0) \sim \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Il n'y a aucune oscillation de Rabi à ce point de polarisation (du moins dont la fréquence soit proportionnelle à B et à V_{ac}) peu importe l'orientation du champ magnétique. Il est connu [48] que la symétrie d'inversion (impliquée par les trois plans miroirs à V'_0) entrave l'action du couplage spin-orbite. Nous allons mettre en évidence un tel comportement dans la section suivante.

4.3 Application à un qubit spin-orbite de trou

Les équations et les arguments de la section 4.1 et 4.2 sont valables pour un qubit de trou et d'électron dans l'hypothèse où la fréquence de Rabi est proportionnelle à l'amplitude du champ magnétique B , et à l'amplitude de la tension modulée V_{ac} . Ils s'appliquent donc à la plupart des qubits de semiconducteurs III-V, et aux qubits de trou dans le silicium. Cependant, ils ne sont pas valides dans les qubits d'électron dans le silicium car la fréquence de Rabi n'est pas nécessairement proportionnelle à B dans l'intervalle de travail à cause des couplages spin-vallées [35, 36]. L'étude des symétries du système peut, en particulier, apporter des informations sur le contrôle du dispositif. Comme illustration, nous appliquons la méthodologie décrite dans la section 4.1 à un qubit spin-orbite de trou sur SOI (dispositif similaire à celui présenté dans le chapitre 3). Nous décrivons d'abord le dispositif en insistant sur le double contrôle électrique par une grille "arrière" (substrat) et une grille "avant" semi-recouvrante, puis nous analysons la dépendance de la fréquence de Rabi à l'orientation du champ magnétique (et le rôle des symétries), et nous discutons les mécanismes à l'origine de la dépendance électrique du facteur gyromagnétique. Enfin nous comparons les données expérimentales et numériques, et suggérons la présence possible de contraintes résiduelles dans les dispositifs expérimentaux.

4.3.1 Dispositif SOI et modèle

Le dispositif, présenté dans la figure 4.4, se compose d'un nano-fil rectangulaire de silicium orienté [110] de 30 nm de largeur, et 10 nm de hauteur. Un champ magnétique homogène B est appliqué dans le dispositif. Le nano-fil est séparé du substrat en silicium par 25 nm d'oxyde de silicium (BOX). Ce substrat est polarisé à une tension V_{bg} pour agir en tant que grille arrière. Une grille avant portée à une tension $V_{fg} = -0.1$ V est utilisée non seulement pour confiner un trou sous celle-ci, mais aussi pour manipuler son spin en appliquant une modulation résonnante avec le qubit d'amplitude $V_{ac} = 1$ mV. Cette grille mesure 30 nm de long, et chevauche environ la moitié du nano-fil (20 nm sur les 30 nm). Elle est isolée du nano-fil par une couche de 2 nm de dioxyde de silicium (SiO_2), et une couche de 2 nm de dioxyde d'hafnium (HfO_2). Deux grilles supplémentaires, à 30 nm à gauche et à droite de la grille centrale imitent les qubits voisins, et sont polarisées à une tension $V = 0$ V. L'ensemble du dispositif est encapsulé dans du nitrate de silicium (Si_3N_4). Par la suite, $\mathbf{x} \parallel [110]$ est aligné avec le nano-fil, $\mathbf{y} \parallel [\bar{1}\bar{1}0]$ est perpendiculaire au nano-fil, et $\mathbf{z} \parallel [001]$ est perpendiculaire au substrat (ces axes diffèrent de ceux utilisés dans le chapitre 3). Sauf mention contraire, nous travaillons à $V_{fg} = -0.1$ V, $V_{ac} = 1$ mV, et $B = 1$ T, sans désordre de charge, sans rugosité de surface et sans contrainte structurale.

L'introduction de la grille arrière permet de changer la forme de la fonction d'onde sans modifier la profondeur du potentiel de confinement qui est déterminé principalement par la différence de tension entre la grille avant et les grilles latérales. C'est pourquoi par la suite, nous allons varier la tension de grille arrière pour changer la forme de la fonction d'onde et ainsi sa symétrie afin d'illustrer les principes de la partie 4.2.

Nous appliquons les méthodes numériques décrites dans le chapitre 2 pour la calcul de la fréquence de Rabi et des facteurs g . Ainsi, le potentiel électrique dans le dispositif est d'abord calculé en résolvant l'équation de Poisson avec une méthode de volumes finies. Puis la structure électronique du qubit dans

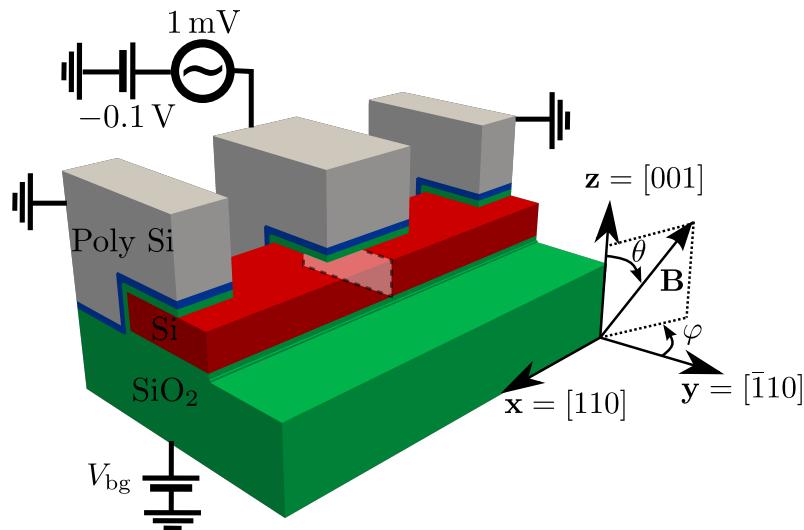


FIGURE 4.4 – Représentation schématique du dispositif. En rouge, le nano-fil de silicium de section $10\text{ nm} \times 30\text{ nm}$ orienté $[110]$ sur 25 nm d'oxyde (vert) en dessous duquel le silicium est dopé et permet de définir une grille arrière. La grille avant de 30 nm de long (en gris) recouvre à moitié le canal du nano-fil ; elle est séparée électriquement du fil par 2 nm de SiO_2 et 2 nm de HfO_2 (vert et bleu). Les deux autres grilles latérales (aussi en gris) représentent des qubits voisins. Elles sont polarisées à $V = 0\text{ V}$. L'axe x est parallèle au nano-fil, et l'axe z est perpendiculaire au substrat. L'orientation du champ magnétique est caractérisée par un angle polaire θ , et un angle azimutal φ définies sur cette figure (même angles que dans le chapitre 3). Le plan délimité par des pointillés sous la grille avant est le plan miroir (yz) exact du dispositif. La grille avant est polarisée à $V_{fg} = -0.1\text{ V}$, et une modulation d'amplitude $V_{ac} = 1\text{ mV}$ peut être appliquée. La tension de grille arrière est V_{bg} .

ce potentiel est établie avec un modèle $k \cdot p$ six bandes qui est discrétisé sur un maillage de différences finies. Enfin la fréquence de Rabi est calculée avec les méthodes introduites dans la section 4.1.

4.3.2 Fréquence de Rabi d'un qubit de trou

Nous validons le formalisme de la matrice \hat{g} sur un intervalle de champ magnétique pertinent d'un point de vue expérimental, et nous montrons la forte anisotropie, et la dépendance en polarisation électrique de la fréquence de Rabi dans ce dispositif.

Validité du formalisme de la matrice \hat{g}

Pour vérifier la validité du formalisme de la matrice \hat{g} , nous comparons l'évaluation directe [éq. (4.3)] et le calcul par le formalisme de la matrice \hat{g} [éq. (4.16)] de la fréquence de Rabi pour quelques orientations de champ magnétique. En particulier, la figure 4.5 montre la fréquence de Rabi en fonction de l'amplitude du champ magnétique $B \parallel (y + z)$ ($\theta = 45^\circ$, $\varphi = 0^\circ$). Le formalisme de la matrice \hat{g} capture le pente à l'origine de la fréquence de Rabi, tandis que l'évaluation directe de la fréquence de Rabi contient tous les ordres en B par l'intermédiaire des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ calculés à champ magnétique fini. La figure 4.5 montre que la fréquence de Rabi se comporte bien de manière linéaire jusqu'à environ un Tesla, et que les corrections restent négligeables jusqu'à des champs magnétiques de l'ordre de quelque Tesla. En particulier, le formalisme de la matrice \hat{g} décrit très bien la physique du système pour des champs magnétiques typiques des expériences, de l'ordre du Tesla (voir chapitre 3).

Le formalisme de la matrice \hat{g} est valide pour différentes tensions de grille arrière V_{bg} comme le montre la figure 4.6, qui met en évidence un excellent accord entre la formule de la matrice \hat{g} et l'évaluation directe à tout V_{bg} (les détails de la dépendance de la fréquence de Rabi avec la tension de grille arrière sont discutés dans les prochains paragraphes).

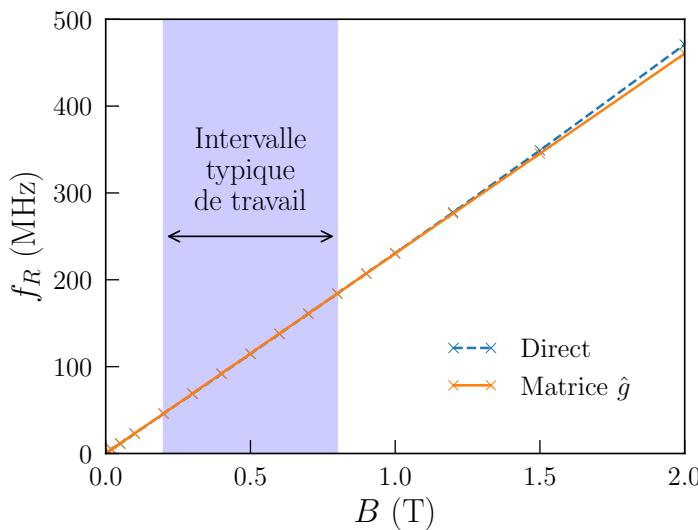


FIGURE 4.5 – Fréquence de Rabi en fonction de l'amplitude du champ magnétique $\mathbf{B} \parallel (\mathbf{y} + \mathbf{z})$. La formule de la matrice \hat{g} [éq. (4.16)] est comparée à l'évaluation directe à partir des fonctions d'onde à champ magnétique fini [éq. (4.3)]. $V_{fg} = -0.1$ V, $V_{bg} = -0.2$ V, et $V_{ac} = 1$ mV. Le formalisme de la matrice \hat{g} est valide pour des champs magnétiques typiques de l'ordre du Tesla (intervalle typique de travail des expériences : $\sim 0.2 - 0.8$ T).

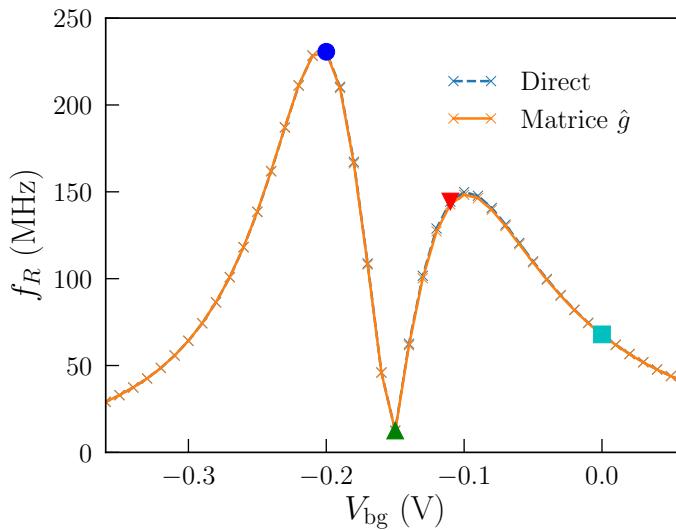


FIGURE 4.6 – Fréquence de Rabi en fonction de la tension de grille arrière V_{bg} pour $B = 1$ T parallèle à $\mathbf{y} + \mathbf{z}$ ($V_{fg} = -0.1$ V et $V_{ac} = 1$ mV). La formule de la matrice \hat{g} [éq. (4.16)] est comparée à l'évaluation directe à partir des fonctions d'onde à champ magnétique fini [éq. (4.3)]. Les symboles (cercle, triangles, et carré) identifient de manière unique la tension de grille arrière sur les figures 4.6, 4.7, 4.8, et 4.13.

Cartes de fréquence de Rabi

Nous discutons maintenant la dépendance de la fréquence de Rabi à l'orientation du champ magnétique. Les cartes de fréquence Rabi sont calculées pour différentes tensions de grille arrière, et elles sont représentées sur la figure 4.7 en fonction des coordonnées angulaires (colatitude et longitude) du champ magnétique \mathbf{B} définies dans la figure 4.4. La fréquence de Rabi est calculée à partir de la matrice \hat{g} et de sa dérivée en utilisant l'équation (4.16). Comme discuté dans la section 4.1, ces matrices peuvent être obtenues à un point de polarisation donné (V_{fg}, V_{bg}) , à partir des fonctions d'onde du qubit sans champ magnétique à trois points de polarisations $(V_{fg} - \delta V_{fg}, V_{bg})$, (V_{fg}, V_{bg}) et $(V_{fg} + \delta V_{fg}, V_{bg})$ où δV_{fg} est typiquement de l'ordre du mV. Une fois que ces deux matrices sont calculées, nous obtenons directement

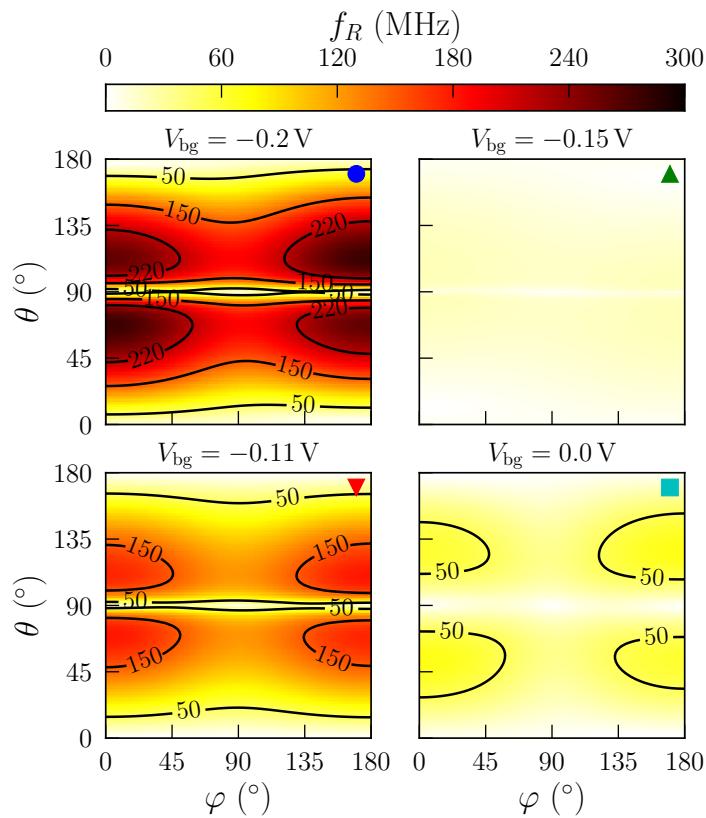


FIGURE 4.7 – Cartes de fréquence de Rabi en fonction des coordonnées angulaires de \mathbf{B} définies sur la figure 4.4, pour différentes tensions de grille arrière V_{bg} ($V_{fg} = -0.1 \text{ V}$, $V_{ac} = 1 \text{ mV}$, $B = 1 \text{ T}$). La fréquence de Rabi étant la même pour des champs magnétiques opposés ($f_R(\mathbf{B}) = f_R(-\mathbf{B})$), les cartes sont tracées pour $0^\circ \leq \varphi < 180^\circ$. Les symboles (cercle, triangles, carré) identifient les tensions de grille arrière étiquetés sur la figure 4.6.

la dépendance orientationnelle de la fréquence de Rabi à partir de l'équation (4.16) sans avoir besoin de calculer les états propres pour chaque orientation du champ magnétique comme c'est le cas pour l'évaluation directe. Les calculs numériques sont donc beaucoup plus rapides dans le formalisme de la matrice \hat{g} (trois calculs à champ magnétique nul pour N orientations de champ magnétique, au lieu de N calculs à champ magnétique fini).

Les cartes de la fréquence de Rabi de la figure 4.7 montrent une structure complexe avec des (quasi-) extinctions selon l'axe z ($\theta = 0^\circ$ et $\theta = 180^\circ$) et dans le plan (xy) ($\theta = 90^\circ$) – même si la fréquence de Rabi est rigoureusement nulle seulement pour $\mathbf{B} \parallel \mathbf{x}$ ($\theta = 90^\circ$ et $\varphi = 90^\circ$). De plus, la fréquence de Rabi est très faible lorsque la tension de la grille arrière est proche de $V_{bg} = -0.15 \text{ V}$.

Ce phénomène est aussi visible dans la figure 4.6, qui représente la fréquence de Rabi en fonction de la tension de grille arrière V_{bg} pour $\mathbf{B} \parallel (\mathbf{y} + \mathbf{z})$. Il y a en effet un creux prononcé près de $V_{bg} = -0.15 \text{ V}$. La fréquence de Rabi augmente des deux cotés de ce creux avant de décroître à grand $|V_{bg}|$. Elle atteint des valeurs de l'ordre de $\simeq 300 \text{ MHz}$. Ces simulations démontrent la forte anisotropie de la fréquence de Rabi avec l'orientation du champ magnétique mais aussi une grande dépendance avec la polarisation électrique du système.

4.3.3 Interprétation

Cette section introduit les outils pour comprendre l'anisotropie et la forte dépendance en tension de grille de la fréquence de Rabi. Dans un premier temps, nous établissons (en l'absence de champ magnétique) la nature de la paire de Kramers fondamentale du qubit étudié, qui est (quasi) trous lourds. Nous exploitons la décomposition de la fréquence de Rabi sur toutes les paires de Kramers [éq. (4.8)]

pour mettre en évidence que, dans ce dispositif, seulement une paire d'états excité particulière contribue en quasi-totalité à la fréquence de Rabi. Cette excitation, dont la fonction enveloppe est de type " p_y ", montre un grand mélange trous lourds et trous légers. Lorsque la tension de grille varie, le champ électrique dans le dispositif couple la paire de Kramers fondamentale et l'excitation de type " p_y ". La paire fondamentale incorpore ainsi le mélange trous lourds/légers de cet état excité, si bien que sa composition varie avec la tension de grille. Cela entraîne des variations de facteurs \hat{g} de la paire fondamentale, et des oscillations de type g -TMR lorsqu'une modulation radiofréquence de tension est appliquée sur la grille avant.

Contrôle de la forme de la fonction d'onde

Dans un premier temps, il est nécessaire de connaître la nature (fonction enveloppe et composition des trous) des états du qubit sans champ magnétique, et en particulier la nature de la paire de Kramers fondamentale.

Des lignes de niveau du module carré des fonctions d'onde de la paire de Kramers fondamentale sont représentées dans la figure 4.8 pour différentes tensions de grille arrière. Nous observons que le trou est poussé sous la grille avant à grand V_{bg} positif, occupe une position centrale à $V_{bg} \simeq -0.15$ V, et est attiré à l'opposé de la grille avant à grand V_{bg} négatif. Ainsi, la grille arrière contrôle la position, et en particulier la symétrie de la fonction d'onde, comme c'est le cas pour les électrons [36]. Le confinement en "coin" est cependant moins prononcé que pour des électrons [61] à cause des différentes masses effectives mises en jeu. Ainsi, nous pouvons émettre l'hypothèse à partir de la figure 4.8 que le trou répond essentiellement à la composante y du champ électrique créé par les grilles, la polarisabilité étant visiblement bien plus faible selon z (qui est l'axe de plus grand confinement structural). L'extinction de la fréquence de Rabi correspond à une tension de grille arrière où la fonction d'onde du trou est la "plus symétrique". Nous noterons que ce contrôle de symétrie est facilité par la conception non-planaire de la grille avant du dispositif.

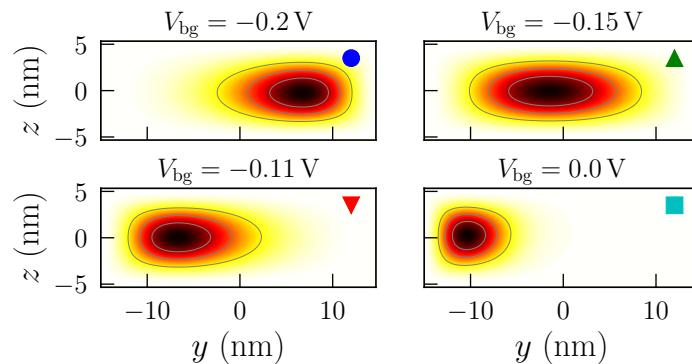


FIGURE 4.8 – Lignes de niveau du module carré des fonctions d'onde de la paire de Kramers fondamentale du qubit de trou à différentes tensions de grille arrière ($V_{fg} = -0.1$ V). Les fonctions d'onde sont tracées dans le plan (yz) à $x = 0$ (zone claire délimitée par des pointillés sous la grille centrale sur la figure 4.4). Les lignes de niveau correspondent à 25%, 50%, et 75% du maximum du module carré de chaque coupe. Les symboles (cercle, triangles, carré) identifient les tensions de grille arrière étiquetées sur la figure 4.6. La zone sombre indique une probabilité de présence élevée.

Rigoureusement, le groupe de symétrie du système est C_s peu importe la tension de grille arrière V_{bg} , avec un plan de symétrie σ_{yz} exact perpendiculaire au nano-fil et coupant la grille en deux (délimité par les pointillés dans la figure 4.4). La figure 4.8 suggère que la fonction d'onde de l'état fondamental comporte un plan horizontal de quasi-symétrie σ_{xy} sur une grande gamme de tensions de grille arrière (correspondant à un faible confinement en coin), et un plan de quasi-symétrie σ_{zx} supplémentaire autour de $V_{bg} = -0.15$ V.

Compte tenue de la symétrie approchée du champ radio-fréquence (cet aspect sera détaillé dans les prochains paragraphes), le plan de symétrie approché σ_{xy} explique la raison d'une faible fréquence de

Rabi pour un champ magnétique $\mathbf{B} \parallel \mathbf{z}$ ($\theta = 0$ et $\theta = 180^\circ$), et le plan de symétrie exacte σ_{yz} explique pourquoi la fréquence de Rabi est faible pour un champ magnétique $\mathbf{B} \parallel \mathbf{x}$ ($\theta = 90^\circ$ et $\theta = 90^\circ$). De plus, le plan de symétrie supplémentaire σ_{zx} à $V_{bg} = -0.15$ V explique la suppression globale de la fréquence de Rabi à ce point de polarisation.

Décomposition microscopique

Pour comprendre les mécanismes microscopiques des oscillations de Rabi, nous exploitons la décomposition de la fréquence de Rabi comme une somme des couplages électriques et magnétiques entre la paire fondamentale et les états excités [éq. (4.8)]. Ainsi, cette expression de la fréquence Rabi peut s'écrire comme $f_R = |\sum_{n>0} f_{R,n}|$, où n désigne une paire Kramers, et où nous pouvons écrire $f_{R,n} = |f_{R,n}|e^{i\Theta_n}$. Sur la figure 4.9, nous représentons la contribution $f_{R,n}$ de chaque état excité à la série de perturbation sur le spectre $E_n - E_0$ du qubit en fonction de V_{bg} .

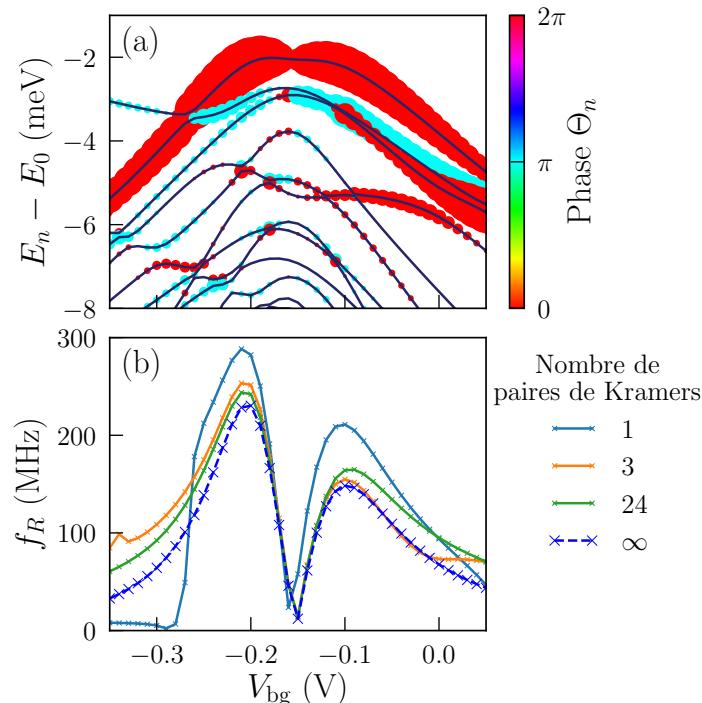


FIGURE 4.9 – (a) Spectre $E_n - E_0$ de la boîte quantique en fonction de la tension de grille arrière ($V_{fg} = -0.1$ V, $B = 0$ T). Nous pouvons écrire la série en perturbation pour la fréquence de Rabi [éq. (4.8)], comme $f_R = |\sum_{n>0} f_{R,n}|$, où n désigne une paire de Kramers. La surface des points est proportionnelle à l'amplitude $|f_{R,n}|$ de la contribution de chaque paire. La couleur quantifie la phase de cette contribution $\Theta_n = \arg(f_{R,n})$. (b) Fréquence de Rabi calculée à partir de la série en perturbation [éq. (4.8)], en fonction de la tension de grille arrière. Les sommes incluant 1, 3 et 24 paires d'états excités sont comparées à la somme de toutes les paires de Kramers, obtenue par le formalisme de la matrice \hat{g} ($V_{fg} = -0.1$ V, $V_{ac} = 1$ mV et $\mathbf{B} \parallel (\mathbf{y} + \mathbf{z})$).

Nous observons que la série de perturbations est dominée par une paire d'états en particulier, dont la séparation en énergie avec l'état fondamental montre une forte dépendance à V_{bg} mais qui reste la plus proche de celui-ci sur une large gamme de tensions de grille.

Cela est confirmé dans la figure 4.9 b), qui compare le résultat de l'équation (4.8) incluant les premières, les trois premières, les 24 premières excitations, et la somme de toutes les paires de Kramers (obtenue par le formalisme de la matrice \hat{g}). La série en perturbation avec le premier état excité seulement capture les grandes tendances de la fréquence de Rabi autour du creux à $V_{bg} = -0.15$ V, et, dans ce cas, la fréquence de Rabi se limite à $f_R \sim |f_{R,1}|$.

Nature des trous

La figure 4.10 représente la composition (trous lourds, trous légers, split-off) de la paire fondamentale du qubit sans champ magnétique en fonction de la tension de grille arrière. Nous observons que cette paire a un caractère trous lourds dominant avec une faible composante trous légers. La composante split-off semble négligeable ($\leq 5\%$), ce qui est confirmé par des calculs $k \cdot p$ quatre bandes (qui négligent le couplage à la split-off) qui montrent les mêmes tendances pour la fréquence de Rabi en fonction de l'orientation du champ magnétique et de la tension de grille. La faible composante trous légers résulte du confinement latéral par la structure et le champ électrique créé par les grilles.

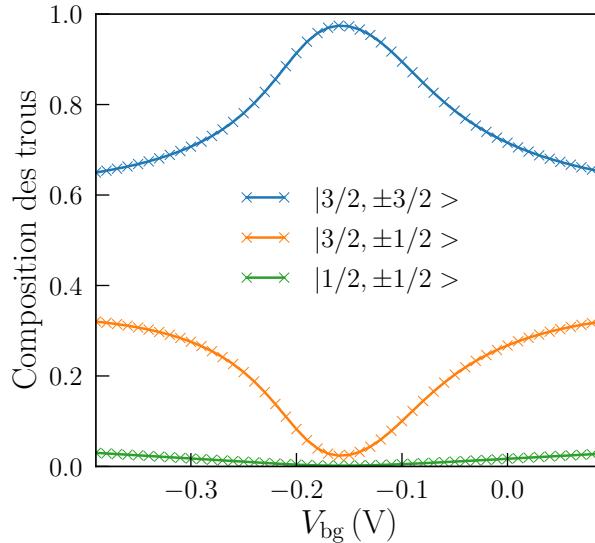


FIGURE 4.10 – Poids total des enveloppes de trous lourds ($|3/2, \pm 3/2\rangle$), de trous légers ($|3/2, \pm 1/2\rangle$), et de la split-off ($|1/2, \pm 1/2\rangle$) de l'état fondamental du qubit en fonction de V_{bg} ($V_{fg} = -0.1$ V, $B = 0$ T). Les contributions des enveloppes de la bande de split-off sont $\leq 5\%$.

Après avoir démontré que les composantes trous lourds et trous légers sont suffisantes pour décrire ce qubit, nous détaillons la nature de leurs fonctions enveloppes. Le module carré des fonctions enveloppes des trous lourds et des trous légers d'un des états de la paire de Kramers fondamentale, et d'un des états de la première paire de Kramers excitées sont représentés au point de haute symétrie à $V_{bg} = -0.15$ V dans les figures 4.11 et 4.12. Le moment angulaire total est quantifié selon l'axe de plus grand confinement z. Ces figures sont en fait tracées à un faible champ magnétique $B_z = 5$ mT pour lever la dégénérescence de Kramers et identifier les états avec une composante $j_z = +3/2$ maximale. Comme discuté précédemment, les enveloppes de la bande de split-off ($|1/2, \pm 1/2\rangle$) ne sont pas pertinentes ici.

État fondamental : Nous observons que les enveloppes de l'état fondamental sont principalement de type "s". De plus, celui-ci comporte une faible ($\sim 1\%$) composante $|3/2, +1/2\rangle$ de type " d_{xy} " qui est cruciale pour expliquer la valeur du facteur principale g_z calculé (voir la section 4.3.4 ci-après).

État excité : L'état excité identifié sur la figure 4.9 dominant la série de perturbations pour la fréquence de Rabi montre un grand mélange trous lourds/trous légers, avec des enveloppes de type " p_y " (avec un plan nodal perpendiculaire à y).

Quand V_{bg} varie autour de la position symétrique $V_{bg} \simeq -0.15$ V, ces deux états sont mélangés par la composante y du champ électrique créé par les grilles. Ce couplage repousse ces états l'un de l'autre et les sépare en énergie comme montré dans le spectre représenté dans la figure 4.9. De plus, ce mélange renforce la composante trous légers de la paire de Kramers fondamentale du qubit. Ce même couplage à la composante y du champ électrique est responsable des oscillations de Rabi entretenues par un signal

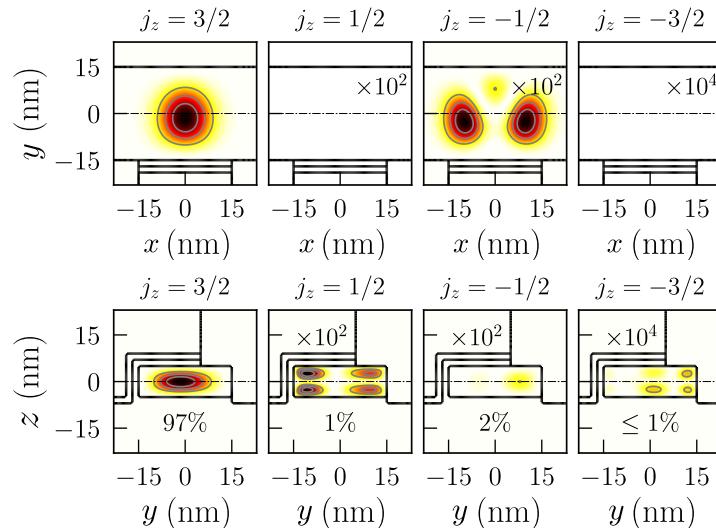


FIGURE 4.11 – Module carré des fonctions enveloppes des trous lourds ($j_z = \pm 3/2$) et des trous légers ($j_z = \pm 1/2$) de l'état fondamental du qubit dans le plan (xy) à $z = 0$ (haut), et dans le plan (zy) à $x = 0$ (bas) ($V_{fg} = -0.1$ V, $V_{bg} = -0.15$ V). Les lignes en pointillées sur chaque tracé indiquent la position de ces plans. Nous rappelons que cet état est dégénéré à champ magnétique nul avec un partenaire ayant une enveloppe symétrique par renversement du temps (précisément, $j_z = 3/2 \leftrightarrow j_z = -3/2$, $j_z = 1/2 \leftrightarrow j_z = -1/2$). Le poids total de chaque enveloppe est donné en bas de chaque panneau. Certains panneaux ont été multiplié par 10^2 ou 10^4 par souci de clarté.

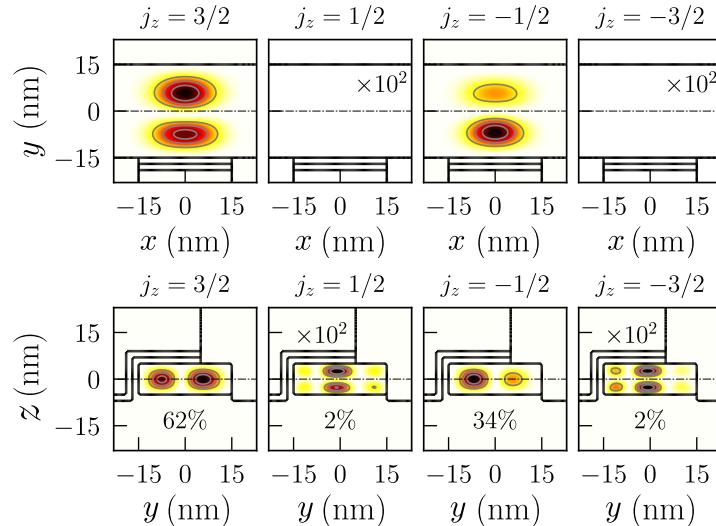


FIGURE 4.12 – Identique à la figure 4.11 pour la première paire Kramers contribuant à la quasi-totalité de la fréquence de Rabi dans la série de perturbations (voir figure 4.9).

radio-fréquence sur la grille qui module le mélange trous lourds - trous légers dans l'état fondamental, donc ses facteurs gyromagnétiques. Cela donne lieu à des oscillations de type *g*-TMR. Les facteurs *g* et leur dépendance V_{fg} et V_{bg} seront analysés au paragraphe 4.3.4.

Les états excités avec des modulations d'enveloppes selon *z* sont trop confinés et trop loin en énergie pour induire une polarisabilité électrique significative le long de l'axe perpendiculaire au substrat. La composante *z* du champ électrique, bien que dominante dans certaines régions du dispositif, n'engendre pas d'oscillations de Rabi efficaces.

Analyse des symétries

Ayant identifié les principaux couplages responsables des oscillations de Rabi, nous pouvons affiner notre analyse des symétries développée dans la section 4.2. Le potentiel électrique total V_{elec} dans le dispositif est tracé dans la figure 4.13 à $V_{\text{bg}} = 0 \text{ V}$ et à $V_{\text{bg}} = -0.15 \text{ V}$. Il montre approximativement des symétries σ_{xy} et σ_{xz} à $V_{\text{bg}} = -0.15 \text{ V}$, cohérentes avec la figure 4.8. Le plan σ_{xy} est légèrement brisé, ce qui induit une dissymétrie à peine notable dans la fonction d'onde de l'état fondamental.

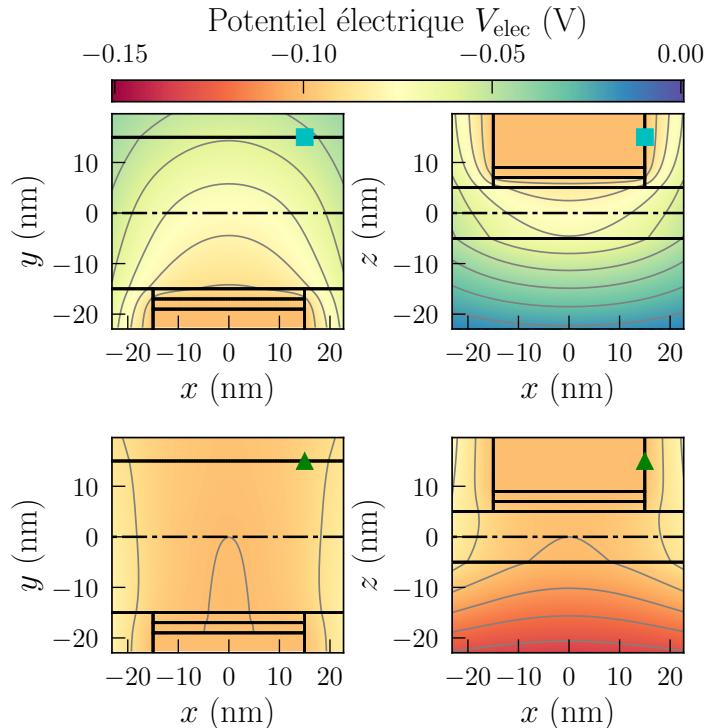


FIGURE 4.13 – Potentiel électrique total V_{elec} dans le plan (xy) à $z = 0$, et dans le plan (xz) à $y = 0$, à (haut) $V_{\text{bg}} = 0 \text{ V}$ et (bas) $V_{\text{bg}} = -0.15 \text{ V}$ ($V_{\text{fg}} = -0.1 \text{ V}$). Les lignes en pointillées sur chaque tracé indiquent la position de ces plans. Les symboles (cercle, triangles, carré) identifient les tensions de grille arrière étiquetés sur la figure 4.6. Les lignes de niveau sont séparées par 10 mV.

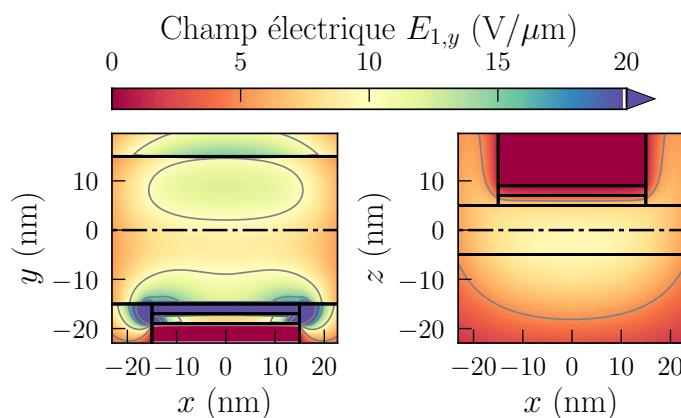


FIGURE 4.14 – Champ électrique $E_{1,y}$ créé par la grille avant ($V_{\text{fg}} = 1 \text{ V}$) dans le plan (xy) à $z = 0$, et dans le plan (xz) à $y = 0$. Les lignes en pointillées sur chaque tracé indiquent la position de ces plans.

Puisque la fréquence de Rabi est contrôlée par la composante y du champ électrique radio-fréquence créé par la grille avant, il suffit d'analyser la parité de $E_{1,y}$ pour ensuite utiliser la table 4.3, et ainsi

extraire la forme de la matrice \hat{g}' . Comme l'électrostatique est linéaire dans notre description, D_1 est simplement le potentiel dans le dispositif avec la tension de la grille avant portée à une tension unité, et toutes les autres tensions à zéro, et donc $E_{1,y}$ est indépendant du point de polarisation. La figure 4.13 b) montre que $E_{1,y}$ est assez homogène dans un large volume sous la grille : les modulations du champ électrique sont donc paires par rapport à σ_{xy} et σ_{yz} , mais impaires par rapport à σ_{zx} . D'après les tables 4.3, la matrice \hat{g}' doit être zéro à $V_{bg} = -0.15$ V (ou presque zéro comme les symétries σ_{xy} et σ_{zx} sont approchées), d'où une fréquence de Rabi faible (voir la figure 4.7). Cela met en lumière l'importance de la brisure de symétrie pour maximiser les opportunités d'avoir des oscillations de Rabi comme déjà montré par A. Corna *et al* [35]. Nous soulignons aussi que la géométrie spécifique de ces dispositifs sur SOI, avec les grilles chevauchant partiellement le haut et le côté latéral des faces du nanofil, aide à briser le plan σ_{zx} et à augmenter $E_{1,y}$ par rapport à $E_{1,z}$.

En s'éloignant de $V_{bg} = -0.15$ V, la fréquence de Rabi décroît aussi à grand $|V_{bg}|$ quand le trou se trouve localisé à gauche ou à droite du nano-fil. Cela résulte de la diminution de la polarisabilité du système selon l'axe y quand les états deviennent très confinés suivant cet axe. Donc, la figure 4.6 peut être décrite comme un seul large pic (formé par les éléments de matrice de D_1), creusé près de $V_{bg} = -0.15$ V à cause des symétries particulières à ce point [ce creux est en fait formé par les éléments de matrice M_1 dans l'équation (4.8)]. Un tel qubit peut, en principe, être basculé entre un point de polarisation (par exemple $V_{bg} = -0.2$ V) où il est fortement couplé au champ électrique radio-fréquence pour la manipulation, et en un point de polarisation ($V_{bg} = -0.15$ V) où il est découplé du champ électrique mais aussi immunisé contre les bruits électriques des grilles et les bruits de charges [62].

4.3.4 Analyses des facteurs gyromagnétiques

Nous allons réaliser une analyse plus quantitative de la matrice \hat{g} et de sa dérivée pour expliquer des caractéristiques supplémentaires de la figure 4.7 tel que la quasi-extinction de la fréquence de Rabi pour des champs magnétiques dans le plan (xy).

Facteurs g

Comme le dispositif présente un plan miroir exact σ_{yz} , x (l'axe du nano-fil) est un axe magnétique principal peu importe V_{bg} . Avec un plan additionnel σ_{xy} dans une large gamme de V_{bg} , y et z doivent être aussi des axes magnétiques principaux approchés. La décomposition en valeurs singulières de la matrice \hat{g} [$\hat{g} = U\hat{g}_d^t V$ où $\hat{g}_d = \text{diag}(g_1, g_2, g_3)$] confirme que c'est en effet le cas, aussi nous pouvons définir les relations $g_x \equiv g_1$, $g_y \equiv g_2$, et $g_z \equiv g_3$. Ces derniers sont tracés en fonction de V_{bg} dans la figure 4.15 a). Nous pouvons appliquer la même transformation qui diagonalise \hat{g} à \hat{g}' ($\hat{g}' \rightarrow {}^t U\hat{g}' V$). La matrice qui en résulte est aussi presque diagonale. Les éléments diagonaux g'_x , g'_y et g'_z sont eux aussi tracés en fonction de V_{bg} dans la figure 4.15 b).

En négligeant l'action du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes, l'hamiltonien magnétique des trous de nombre quantique $j = 3/2$ se réduit à $H = -2\kappa\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{J}$, où \mathbf{J} est le moment angulaire total de la fonction de Bloch et $\kappa = -0.42$. Les facteurs g d'un pur trou lourd ($|3/2, \pm 3/2\rangle$) devraient donc être $g_x = g_y = 0$, $g_z = -6\kappa = 2.52$, tandis que les facteurs g d'un pur trou léger ($|3/2, \pm 1/2\rangle$) devraient être $g_x = g_y = -4\kappa = 1.68$, $g_z = -2\kappa = 0.84$. La comparaison entre les données sur le mélange trous lourds/légers de la figure 4.10 et les facteurs g de la figure 4.15 a) montrent un accord qualitatif avec cette tendance. En effet, g_z est maximal (et g_x , g_y minimaux) près de $V_{bg} = -0.15$ V où la composante trous lourds est maximale. Ensuite g_z décroît tandis que g_x et g_y augmentent, lorsque le confinement latéral (créé par le champ électrique des grilles) augmente la composante trous légers dans l'état fondamental. Cependant, le calcul des facteurs g du dispositif réel ne reproduit pas quantitativement l'hamiltonien ci-dessus. En particulier le facteur g_z du dispositif réel atteint un maximum autour de 5, bien loin de $6|\kappa| \sim 2.52$. Ces désaccords sont le résultat de l'action du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes des trous lourds et trous légers comme discuté dans la référence [37].

En effet, le confinement latéral mélange également des enveloppes de type $d_{xy} |3/2, \pm 1/2\rangle$ à l'état

fondamental principalement $|3/2, \pm 3/2\rangle$ [grâce au terme S de l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes, voir l'équation (2.17) et la figure 4.11]. Ce très faible mélange a tout de même un impact significatif sur le facteur g_z . Sous champ magnétique, le coefficient de mélange de $|3/2, +1/2\rangle$ dans $|3/2, +3/2\rangle$, et de $|3/2, -1/2\rangle$ dans $|3/2, -3/2\rangle$ varient de façon opposé quand l'intensité du champ magnétique B augmente, à cause de la brisure de la symétrie de renversement du temps. Cela sépare les deux états, et ajoute une contribution supplémentaire Δg_z au facteur g_z total. Dans un modèle de boîte quantique rectangulaire de taille $L_z \ll L_x, L_y$ [37],

$$\Delta g_z = \frac{2^{17} \gamma_3^2}{81\pi^4 (3\gamma_1 + 10\gamma_2)}, \quad (4.21)$$

où γ_1, γ_2 et γ_3 sont les paramètres de Luttinger du matériau hôte. Dans le silicium, $\Delta g_z = 2.14$ et ainsi g_z doit atteindre $-6\kappa + \Delta g_z \simeq 4.66$ pour un état presque pur trou lourd, ce qui est en accord avec les simulations numériques à $V_{bg} = -0.15$ V. La correction Δg_z est remarquablement proportionnelle à γ_3 , et est indépendante des dimensions L_x et L_y de la boîte quantique. Δg_z doit donc être faiblement dépendant des tensions de grilles avant et arrière qui contrôlent la taille de la boîte quantique, et ainsi contribue peu à \hat{g}' et à la fréquence de Rabi.

Comme attendu, tous les g'_i sont proches de zéro près de $V_{bg} = -0.15$ V où le mélange trous lourds/légers devient indépendant du champ électrique à l'ordre un, à cause des symétries supplémentaires (voir la figure 4.10).

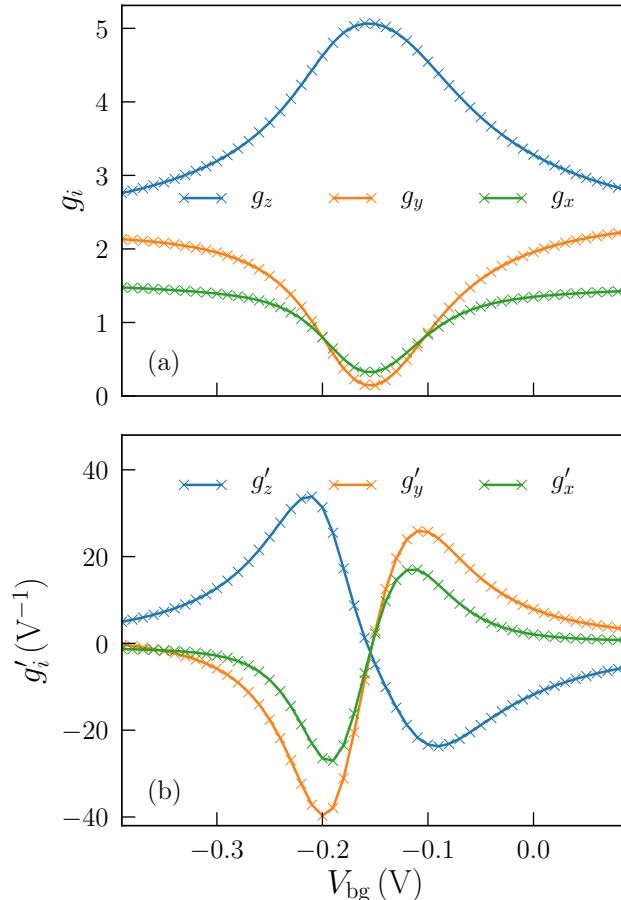


FIGURE 4.15 – (a) Les facteurs principaux g_x , g_y , et g_z et (b) leur dérivées par rapport à V_{fg} en fonction de la tension de la grille arrière ($V_{fg} = -0.1$ V).

Retour sur la fréquence de Rabi

Le fait que la fréquence de Rabi est faible quand \mathbf{B} appartient au plan (xy) (voir la figure 4.7) peut s'expliquer par le manque d'anisotropie de g_i et g'_i dans ce plan ($g_x g'_y - g'_x g_y \ll g_z g'_x - g'_z g_x, g_z g'_y - g'_z g_y$). En négligeant $g_x g'_y - g_y g'_x$ dans l'équation (4.16), nous obtenons en effet :

$$f_R \simeq \frac{\mu_B B V_{\text{ac}}}{2h} |b_z| \frac{\sqrt{(g_z g'_x - g'_z g_x)^2 b_x^2 + (g_z g'_y - g'_z g_y)^2 b_y^2}}{\sqrt{g_x^2 b_x^2 + g_y^2 b_y^2 + g_z^2 b_z^2}}, \quad (4.22)$$

où b_x, b_y et b_z sont les composantes du champ magnétique unitaire $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$. L'approximation ci dessus reproduit bien les principales caractéristiques de la figure 4.7. Le paramètre de Luttinger γ_3 joue un rôle central dans cette équation. En effet, une analyse similaire à la référence [37] suggère que g_x et g_y sont à l'ordre le plus bas, proportionnels à γ_3 (par conséquence au mélange entre les enveloppes $|3/2, \pm 3/2\rangle$ et $|3/2, \mp 1/2\rangle$ par le terme R de l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes), et d'où $f_R \propto \gamma_3$. Un modèle analytique basé sur ces conclusions est présenté au chapitre 5.

Puisque \hat{g}' reste (presque) diagonale dans la base où \hat{g} l'est, le champ électrique radio-fréquence module essentiellement les facteurs g principaux mais fait peu varier les matrices \hat{U} et \hat{V} [$\hat{g} = \hat{U} \hat{g}_d \hat{V}$]. Ainsi, la dépendance de \hat{g}_d au champ électrique peut en pratique être reconstruite à partir des mesures de l'énergie Zeeman E_Z en fonction des tensions de grille et de l'orientation du champ magnétique (voir le chapitre 3). Quand le champ électrique module seulement les facteurs g principaux, comme c'est le cas ici, les oscillations de Rabi peuvent être interprétées comme la g -TMR conventionnelle (qui ici correspond au contrôle électrique de l'énergie Zeeman). De telles modulations de \hat{g}_d sont le résultat d'un changement de la forme de la fonction d'onde dans un potentiel fortement non harmonique (comme montré dans la figure 4.8).

4.3.5 Comparaison avec les données expérimentales

Dans cette section nous revenons sur le dispositif et sur les résultats expérimentaux du chapitre 3. La différence principale entre le système expérimental et le système simulé dans ce chapitre est le chevauchement des grilles, qui est total dans le système expérimental et partiel dans le système simulé.

Cependant, le désordre présent dans le qubit expérimental brise sans doute la symétrie du nanofil, ce qui localise vraisemblablement l'état fondamental du qubit soit à droite, soit à gauche du canal du nanofil (des expériences avec des électrons ont montré des états de coin dans une géométrie similaire à celle-ci [61]).

Nous rappelons que l'axe x du nano-fil est, expérimentalement, un axe magnétique principal, les deux autres étant proches des axes y et z . Cela est cohérent avec l'existence d'un plan miroir de symétrie (ou plutôt de quasi symétrie) perpendiculaire à l'axe x . Cependant les facteurs g mesurés expérimentalement ($g_x = 2.48$, $g_y = 2.08$ et $g_z = 1.62$) ne correspondent pas à ceux calculés numériquement, même qualitativement. En particulier, le facteur g_z est le plus petit des facteurs g expérimentaux, tandis qu'il est le plus grand dans nos calculs. De plus les cartes de fréquence de Rabi sont très différentes. Expérimentalement, les oscillations de Rabi sont dominées par une contribution IZR, et la fréquence de Rabi est maximale quand $\mathbf{B} \parallel z$. Numériquement, les oscillations de Rabi sont dominées par une contribution g -TMR, et la fréquence de Rabi est très petite pour $\mathbf{B} \parallel z$.

Nature du champ électrique radio-fréquence

Tout d'abord, nous rappelons que les diagrammes de stabilité expérimentaux montrent que le qubit n'est pas créé sous la grille G_2 , mais se situe entre la grille G_1 et la grille G_2 (car les bras de leviers des deux grilles sont sensiblement identiques, voir la section 3.2). Par conséquent, la nature du champ électrique modulé est différente de celle considérée jusqu'à maintenant : dans le qubit expérimental, le champ électrique radio-fréquence E_1 entre les grilles a tendance à s'aligner selon l'axe du nano-fil x au lieu d'être perpendiculaire à celui-ci (la localisation de la fonction d'onde expérimentale peut

s'expliquer par la présence de défauts chargés qui modifient le profil du potentiel électrique créé par la grille, et qui ne permettent plus de localiser correctement la fonction d'onde sous celle-ci). Cela explique la non correspondance entre les cartes de fréquences de Rabi, mais pas l'anisotropie des facteurs g (puisque la matrice \hat{g} et les facteurs g ne dépendent pas de la distribution du champ électrique radiofréquence – seule \hat{g}' en dépend).

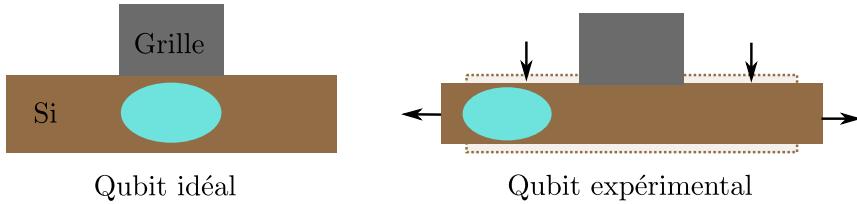


FIGURE 4.16 – Schéma simplifié d'un qubit idéal et du qubit expérimental qui explique les désaccords qualitatifs. Nous suggérons 1) une localisation du trou entre les grilles (plutôt que sous la grille), de ce fait la modulation du champ électrique est plutôt alignée selon l'axe du nanofil (plutôt que perpendiculaire à celui-ci), et 2) la présence d'une contrainte uniaxiale ou biaxiale résiduelle qui favorise un état fondamental trous légers. Les flèches noires correspondent au sens et à la direction de la déformation engendrée par la contrainte. L'ellipse bleue indique la position approximative de la fonction d'onde dans le nanofil.

Nature des trous : contraintes biaxiales

Les mesures expérimentales de l'anisotropie des facteurs g semblent, en fait, plus cohérentes avec un qubit dominé par une composante de trous légers (car $g_z < g_x, g_y$). Nous avons identifié deux explications possibles pour rendre compte de la nature trous légers de l'état manipulé expérimentalement.

États plus profonds ? Expérimentalement s'agit-il de la signature d'un état plus profond (état excité) ? Il y a, en effet, un nombre fini de trous dans la boîte quantique, et ainsi les facteurs g et les cartes de fréquences de Rabi ont donc été mesurées pour une paire plus profonde que l'état fondamental. Quelques uns des états excités calculés numériquement montrent un fort caractère trous légers mais là encore, les facteurs g et les cartes de fréquence de Rabi correspondent mal aux données expérimentales (mais nous n'avons pas pris en compte l'interaction de Coulomb). De plus, des anisotropies similaires ont été mesurées dans d'autres dispositifs avec un nombre de trous différents [39, 40]. Par conséquent nous recherchons un mécanisme plus robuste pour expliquer ces observations.

Contrainte ? Un scénario possible expliquant l'anisotropie des facteurs g mesurés est la présence de contraintes non-intentionnelles créées pendant les opérations de fabrication et/ou de refroidissement à des températures cryogéniques. En particulier, une contrainte uniaxiale ou biaxiale tensile modifie la structure de bandes de valence en favorisant les trous légers. En guise d'illustration, les niveaux d'énergies et le caractère trous lourds des états du qubit étudié numériquement sont tracés dans la figure 4.17 a) en fonction de la contrainte biaxiale dans le plan (xy). Les déformations dans le nano-fil sont donc $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\parallel}$ et $\varepsilon_{zz} = -2c_{12}\varepsilon_{\parallel}/c_{11} = -0.77\varepsilon_{\parallel}$, où $c_{11} = 166 \text{ GPa}$ et $c_{12} = 64 \text{ GPa}$ sont les constantes élastiques du silicium. La contrainte biaxiale est ainsi caractérisée par la déformation ε_{\parallel} . Nous notons que de telles contraintes ne brisent pas la symétrie du dispositif (et donc n'interfèrent pas avec notre précédente discussion sur l'effet des plans miroirs sur la fréquence de Rabi). Le caractère de l'état fondamental passe d'un état quasiment pur trous lourds à pur trous légers pour des déformations aussi faibles que $\varepsilon_{\parallel} \simeq 0.1\%$. Les facteurs g de ce doublet correspondent à des trous lourds ($g_z > g_x, g_y$) pour $\varepsilon_{\parallel} < 0$ et à des trous légers ($g_z < g_x, g_y$), comme dans les expériences, pour $\varepsilon_{\parallel} \gtrsim 0.1\%$. À $\varepsilon_{\parallel} \simeq 0.2\%$, les dix premières paires de Kramers ont une composante trous légers dominante.

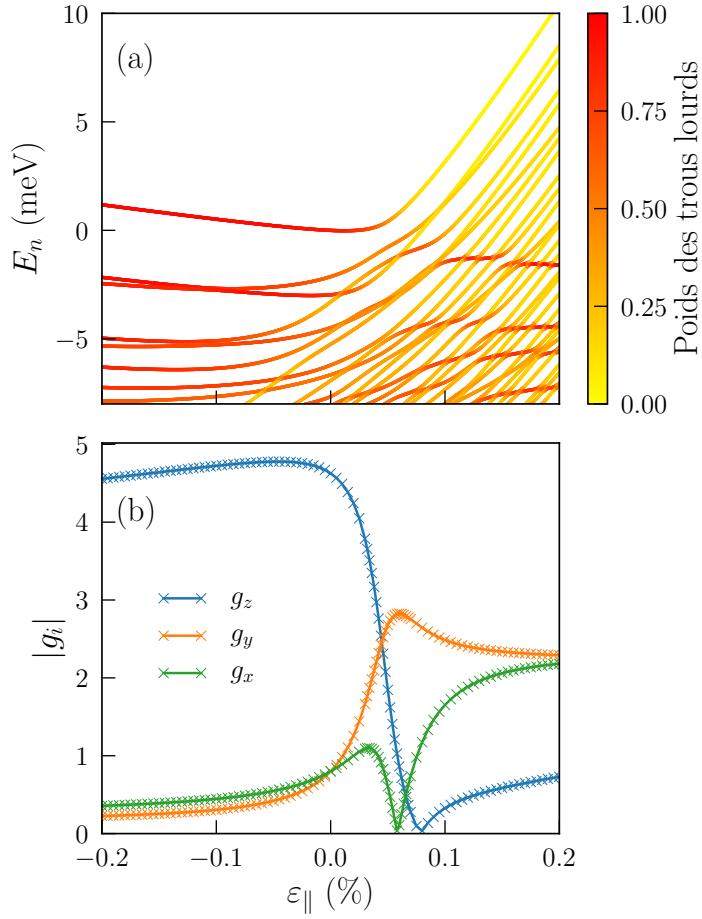


FIGURE 4.17 – (a) Énergie et nature de l'état fondamental de trou en fonction de la déformation biaxiale $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\parallel}$ et $\varepsilon_{zz} = -0.77\varepsilon_{\parallel}$ en l'absence de champ magnétique. Le caractère trous lourds est identifié par la couleur des lignes. L'origine des énergies est fixée au sommet de la bande de valence pour $\varepsilon_{\parallel} = 0$. (b) Facteurs g principaux de l'état fondamental de trous en fonction de la déformation biaxiale ε_{\parallel} . $V_{fg} = -0.1$ V et $V_{bg} = -0.2$ V (cercle bleu sur la figure 4.7).

La figure 4.16 schématise les différents ingrédients (champ-radio fréquence selon l'axe du nanofil, et contraintes biaxiales) permettant un accord qualitatif entre le qubit idéal étudié numériquement et le qubit expérimental (présenté dans le chapitre 3).

Fréquence de Rabi sous contraintes biaxiales

Nous traçons sur la figure 4.18 la carte des fréquences de Rabi de l'état fondamental de trous d'un dispositif soumis à une contrainte biaxiale ($\varepsilon_{\parallel} = 0.2\%$) à un point de polarisation tel que le qubit soit localisé entre la grille centrale, et la grille à gauche de celle-ci comme suggéré par les expériences. Les oscillations de Rabi sont dominées par la contribution IZR puisque le champ électrique radio-fréquence, presque aligné selon l'axe x dans cette configuration, fait osciller la fonction d'onde dans son ensemble (sans modifier significativement sa forme) selon cet axe. Par conséquent, les facteurs g principaux dépendent peu de la tension de grille, contrairement à la matrice \hat{U} . Les facteurs g calculés et la carte des fréquences de Rabi sont en meilleur accord qualitatif avec les données expérimentales, mais la fréquence de Rabi calculée numériquement reste trop faible. Ces désaccords résiduels peuvent être les résultats de la présence d'autres trous dans le dispositif (lissant le potentiel électrique), de la rugosité de surface et du désordre de charge (restant inconnu) dans le qubit.

Tandis que l'existence de telles contraintes reste à confirmer, les résultats actuels montrent que les qubits de trou sont très sensibles aux contraintes [63, 64]. L'ingénierie des contraintes qui a été un succès

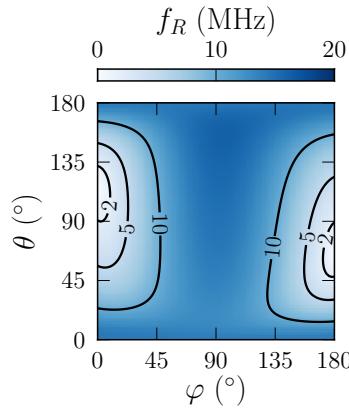


FIGURE 4.18 – Carte de la fréquence de Rabi en fonction des coordonnées angulaires de B définies dans la figure 4.4 ($V_{ac} = 1 \text{ mV}$). Cette carte est tracée pour une paire de Kramers fondamentale d'un qubit sous contrainte biaxiale ($\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.2\%$, $\varepsilon_{zz} = -0.15\%$). Le dispositif de la figure 4.4 est polarisé pour que la fonction d'onde fondamentale soit située entre la grille centrale et la grille de gauche : $V_{fg} = 0.15 \text{ V}$, $V_{left} = 0.15 \text{ V}$ sur la grille la plus à gauche, $V_{right} = 0.2 \text{ V}$ sur la grille la plus à droite, et $V_{bg} = 0 \text{ V}$. Les facteurs g principaux de ce doublet sont $g_x = 2.06$, $g_y = 2.41$ et $g_z = 0.77$. La carte est tracée à énergie Zeeman constante (9 GHz) comme pour les cartes de Rabi expérimentales, plutôt qu'à champ magnétique constant comme dans la figure 4.7.

dans les transistors MOS classiques [65, 66], pourrait donc ouvrir de nouvelles opportunités pour les qubits semiconducteurs également.

4.4 Conclusions

Nous avons montré que le formalisme de la matrice \hat{g} permet un calcul rapide et efficace des cartes angulaires des fréquences de Larmor et de Rabi d'un qubit, dans un régime linéaire en champ magnétique B et en modulation radio-fréquence V_{ac} . La structure électronique du qubit sans champ magnétique fournit toutes les informations nécessaires pour cette théorie de réponse linéaire. La formule de la matrice \hat{g} fournit un modèle compact pour le contrôle du qubit et se prête bien à une analyse de symétries. Nous avons, en particulier, discuté des effets des plans miroirs sur l'anisotropie des facteurs g et de la fréquence de Rabi. Le formalisme de la matrice \hat{g} peut être complété par une analyse en série de perturbations qui peut apporter des explications supplémentaires sur la physique du qubit à l'échelle microscopique. Cette analyse permet de construire un modèle analytique de qubit qui sera présenté au chapitre 5.

Ces modèles s'appliquent à une grande variété de qubits de spin de trou et d'électron. Nous avons pour illustrer, considéré un qubit spin-orbite de trou dans un dispositif composé d'un nanofil de silicium et de grilles avant et arrière. Nous avons mis en avant la dépendance complexe de la fréquence de Rabi par rapport à l'orientation du champ magnétique, qui résulte des symétries des fonctions d'onde du qubit. Ces symétries peuvent être contrôlées par les grilles avant et arrière, grâce à la géométrie non planaire de la grille avant dans ces dispositifs. En particulier, le qubit peut être basculé entre un point de polarisation (de faible symétrie) où il est fortement couplé au champ électrique radio-fréquence pour sa manipulation, et un point de polarisation (de haute symétrie) où il est découpé mais moins sensible aux bruits électriques. Les facteurs g calculés restent, cependant, qualitativement différents des données expérimentales récentes. Nous suggérons que ces désaccords peuvent être le résultat de contraintes non-intentionnelles dans le dispositif. Cela souligne l'importance de la contrainte dans des qubits de semiconducteurs, et ouvre la voie à une ingénierie des contraintes dans ces systèmes.

Chapitre 5

Impact du matériau sur les performances du qubit

Les simulations numériques du chapitre 4 ont mis en évidence les mécanismes induisant des oscillations de Rabi dans des nano-fils de silicium sur SOI. Dans ce chapitre, nous modélisons de manière simple le système réel. Ce modèle capture les tendances observées numériquement telles que la dépendance de la fréquence de Rabi avec les champs électrique et magnétique appliqués sur ce système. Il permet aussi d'expliciter la dépendance des fréquences de Rabi et de Larmor aux paramètres du matériau hôte utilisé.

Tout d'abord, nous introduisons un modèle de boite quantique rectangulaire. Puis nous construisons une base minimale capturant les tendances observées numériquement. Ensuite, nous développons analytiquement les expressions des facteurs gyromagnétiques et de la fréquence de Rabi, ce qui permet de comprendre leur dépendance au matériau hôte et aux champs extérieurs appliqués. Ensuite nous validons le modèle par comparaison avec les simulations numériques de la boite quantique rectangulaire, et nous discutons ses limites. Finalement, nous montrons que le silicium est un matériau idéal pour exciter électriquement des oscillations de Rabi dans une configuration de type *g*-TMR grâce à la forte anisotropie de ses bandes de valence.

5.1 Modèle simplifié pour une boite quantique

Il est utile de construire une géométrie simple de boite quantique qui reproduit et explique les tendances observées dans la structure réelle simulée au chapitre 4. Dans cette section, nous introduisons un modèle de boite quantique rectangulaire, dont la structure électronique des trous est décrite avec une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes. Ensuite nous discutons des solutions de cet hamiltonien dans une base minimale capturant les tendances observées numériquement au chapitre 4. Nous analysons, en particulier, les effets du confinement quantique, des champs électrique et magnétique pour préparer le calcul de la fréquence de Rabi du qubit de trou dans la section 5.2.

5.1.1 Structure et hamiltonien

Nous introduisons une boite quantique rectangulaire de dimensions $L_x \times L_y \times L_z$ faite d'un matériau semiconducteur et dont l'énergie potentielle de confinement structural U_{struct} s'écrit (confinement "dur") :

$$U_{\text{struct}}(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < \frac{L_x}{2}, |y| < \frac{L_y}{2}, |z| < \frac{L_z}{2} \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}, \quad (5.1)$$

De manière similaire aux simulations du chapitre 4, x, y, et z correspondent respectivement aux axes [110], [−110] et [001] du cristal (d'autres choix d'axes cristallographiques sont discutés dans la section 5.5). La figure 5.1 représente cette boite quantique et le système d'axes utilisé.

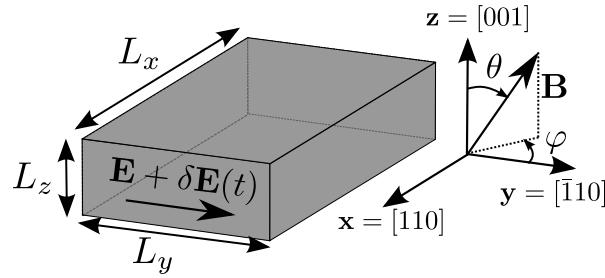


FIGURE 5.1 – Modèle de la boîte quantique. Une boîte rectangulaire ayant pour cotés L_x , L_y et L_z peut être soumise à un champ magnétique statique et homogène \mathbf{B} , à un champ électrique statique et homogène \mathbf{E} , et à une modulation radio-fréquence du champ électrique $\delta\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_{ac} \sin(2\pi f_L t)$ résonnant avec les états du qubit, alignée avec \mathbf{E} ici (\mathbf{E}_{ac} est homogène). L'orientation de \mathbf{B} est caractérisée par les coordonnées angulaires θ et φ .

Nous nous intéressons aux états de trous de cette boîte quantique. Tout d'abord, nous savons que l'interaction spin-orbite directe dans les bandes de valence est le moteur des oscillations de Rabi des qubits spin-orbite de trou [62, 67, 68]. De plus, les conclusions du chapitre 4 suggèrent de négliger le mélange à la bande de split-off ($|1/2, \pm 1/2\rangle$). Par conséquent, nous supposons que les états de trous dans cette boîte quantique peuvent être décrits par l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes de Luttinger-Kohn (LK) [26, 45]. En reprenant la notation du chapitre 4, nous notons les fonctions de Bloch de trous lourds $|\pm 3/2\rangle \equiv |3/2, \pm 3/2\rangle$, et celles des trous légers $|\pm 1/2\rangle \equiv |3/2, \pm 1/2\rangle$ et ainsi dans la base $\{|+3/2\rangle, |+1/2\rangle, |-1/2\rangle, |-3/2\rangle\}$ l'hamiltonien du matériau massif (de type diamant ou zinc-blend [26]) s'écrit :

$$H_{4\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} P + Q & -S & R & 0 \\ -S^* & P - Q & 0 & R \\ R^* & 0 & P - Q & S \\ 0 & R^* & S^* & P + Q \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

où :

$$P = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \right) \quad (5.3a)$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 \left(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2 \right) \quad (5.3b)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[-\gamma_3 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_2 k_x k_y \right] \quad (5.3c)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z, \quad (5.3d)$$

et $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ est le vecteur d'onde dans les axes de la boîte quantique, m_0 est la masse d'un électron libre, et $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ sont les paramètres de Luttinger du matériau de cette boîte. La prise en compte de contraintes structurales dans cette hamiltonien est détaillée en annexe G. Par souci de simplicité, nous avons changé le signe de l'hamiltonien $H_{4\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$ de façon à obtenir une dispersion positive comme pour les électrons.

Comme détaillé dans le chapitre 2, la substitution $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ dans l'hamiltonien (5.2) donne un ensemble de quatre équations différentielles couplées pour les fonctions enveloppes de trous lourds ($j_z = \pm 3/2$) et de trous légers ($j_z = \pm 1/2$). Ces enveloppes doivent s'annuler au bord de la boîte dans ce modèle de confinement "dur". Nous choisissons de développer les solutions de ces équations sur la base des fonctions harmoniques $\{|n_x n_y n_z\rangle \otimes |j_z\rangle\}$ où :

$$\langle \mathbf{r} | n_x n_y n_z \rangle = \chi_{n_x}(x, L_x) \chi_{n_y}(y, L_y) \chi_{n_z}(z, L_z), \quad (5.4)$$

et :

$$\chi_n(u, L) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[n\pi \left(\frac{u}{L} + \frac{1}{2} \right) \right], |u| \leq \frac{L}{2}. \quad (5.5)$$

En particulier, et par analogie à ce qui a été fait numériquement dans le chapitre 4, la boîte peut être soumise à un champ magnétique statique \mathbf{B} et à un champ électrique statique $\mathbf{E} = E_0 \mathbf{y}$ induit par des grilles extérieures. Les mêmes grilles sont utilisées pour appliquer un champ électrique radio-fréquence $\delta\mathbf{E}(t)$, d'amplitude E_{ac} , résonnant avec les états du qubit pour entraîner des oscillations de Rabi (le champ électrique statique et le champ électrique radio-fréquence sont donc alignés ici). La figure 5.1 représente une telle configuration. Ainsi notre objectif est de calculer la fréquence de Rabi de la paire fondamentale du qubit dans cette configuration de type *g-TMR* (modulation de la fonction d'onde par le champ radio-fréquence dans un potentiel fortement anharmonique ; voir la section 3.4.1) [58].

Ce modèle est une description simple d'un qubit spin-orbite de trou comme implémenté dans les dispositifs planaires et SOI par exemple. Dans ce chapitre, nous montrons qu'il capture la dépendance de la fréquence de Rabi avec les champs électrique et magnétique dont les tendances ont été mises en évidence dans les simulations du chapitre 4.

5.1.2 Base minimale pour les fonctions enveloppes

L'hamiltonien (5.2) du système précédemment décrit peut être diagonalisé numériquement dans la base des fonctions harmoniques (5.5). Cependant, pour établir la relation entre les paramètres du dispositif (dimensions et matériaux) et ses propriétés (facteurs g et fréquence de Rabi notamment), il est pertinent de construire un modèle minimal en choisissant judicieusement une base simple de fonctions harmoniques qui capture l'essentiel de la physique.

Sans champ extérieur, l'état fondamental de l'hamiltonien de la boîte quantique rectangulaire est dominé par des enveloppes de type s ($n_x = n_y = n_z = 1$, voir le chapitre 4). Quand $L_z \ll L_x, L_y$ (une limite de couche mince que nous détaillons plus tard dans la section 5.2.2), les premiers états excités se composent d'enveloppes dont les nombres quantiques n_x et n_y augmentent. Cependant, les enveloppes avec $n_x > 1$ jouent un rôle mineur dans ce modèle car les champs électriques statique et radio-fréquence dans la boîte sont orientés selon l'axe \mathbf{y} . Ainsi, l'état fondamental de type s est principalement mélangé avec une excitation de type p_y ($n_y = 2$) par le champ électrique (voir conclusion du chapitre 4). Donc, nous pouvons capturer les principales tendances dans la base minimale \mathcal{B} suivante qui inclut les enveloppes de type s et p_y des trous lourds et des trous légers :

$$\mathcal{B} = \{\mathcal{B}_0, T\mathcal{B}_0\} \quad (5.6)$$

où :

$$\mathcal{B}_0 = \{|1, +3/2\rangle, |1, -1/2\rangle, |2, +3/2\rangle, |2, -1/2\rangle\}, \quad (5.7)$$

avec $|i, j_z\rangle = |1i1\rangle \otimes |j_z\rangle$, $\{|1i1\rangle\}$ sont définies dans l'équation (5.4), $j_z \in \{|\pm 3/2\rangle, |\pm 1/2\rangle\}$ et T est l'opérateur de renversement du temps ($T|+3/2\rangle = |-3/2\rangle$ et $T|-1/2\rangle = |+1/2\rangle$). Dans les prochains paragraphes, nous discutons l'effet du confinement structural, les champs électrique et magnétique dans la base minimale \mathcal{B} .

Effet du confinement structural

Dans un premier temps, nous considérons la boîte quantique rectangulaire sans champs extérieurs et nous décomposons les enveloppes dans la base minimale \mathcal{B} .

Dans cette base, ni le terme S , ni le terme proportionnel à γ_2 de R ne contribuent aux éléments de l'hamiltonien $H_{4k \cdot p}$ [éq. (5.2)] car toutes les fonctions de la base minimale ont les mêmes nombres quantiques n_x et n_z : seulement les termes en k_x^2 , k_y^2 , et k_z^2 sont non nuls. L'hamiltonien est donc bloc-diagonal dans cette base minimale \mathcal{B} :

$$H_{4k \cdot p} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0 & 0_{4 \times 4} \\ 0_{4 \times 4} & \mathcal{H}_0 \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

où dans la base \mathcal{B}_0 :

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} P_1 + Q_1 & R_1 & 0 & 0 \\ R_1 & P_1 - Q_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P_2 + Q_2 & R_2 \\ 0 & 0 & R_2 & P_2 - Q_2 \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

avec :

$$P_1 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \pi^2 (L_x^{-2} + L_y^{-2} + L_z^{-2}) \quad (5.10a)$$

$$Q_1 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 \pi^2 (L_x^{-2} + L_y^{-2} - 2L_z^{-2}) \quad (5.10b)$$

$$R_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \gamma_3 \pi^2 (L_x^{-2} - L_y^{-2}), \quad (5.10c)$$

et :

$$P_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \pi^2 (L_x^{-2} + 4L_y^{-2} + L_z^{-2}) \quad (5.11a)$$

$$Q_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 \pi^2 (L_x^{-2} + 4L_y^{-2} - 2L_z^{-2}) \quad (5.11b)$$

$$R_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \gamma_3 \pi^2 (L_x^{-2} - 4L_y^{-2}). \quad (5.11c)$$

L'état de trous lourds de nombre quantique $n_y = 1$ est ainsi mélangé avec l'état de trous légers de même nombre quantique $n_y = 1$ par R_1 , tandis que l'état de trous lourds de nombre quantique $n_y = 2$ est mélangé avec l'état de trous légers de même nombre quantique $n_y = 2$ par R_2 . Ces couplages sont contrôlés par le confinement latéral ($R_i \propto L_x^{-2}, L_y^{-2}$). Les états propres $|i\pm\rangle$ ($i \equiv n_y = 1, 2$) de \mathcal{H}_0 sont :

$$\begin{aligned} |i-\rangle &= h_i |i, +\frac{3}{2}\rangle + l_i |i, -\frac{1}{2}\rangle \\ |i+\rangle &= -l_i |i, +\frac{3}{2}\rangle + h_i |i, -\frac{1}{2}\rangle, \end{aligned} \quad (5.12)$$

où $h_i = (-Q_i + \sqrt{Q_i^2 + R_i^2})/W_i$, $l_i = -R_i/W_i$, et $W_i^2 = R_i^2 + (-Q_i + \sqrt{Q_i^2 + R_i^2})^2$. Les énergies propres associées aux états propres des équations (5.12) sont :

$$E_{i\pm} = P_i \pm \sqrt{Q_i^2 + R_i^2}. \quad (5.13)$$

Dans la limite d'une couche mince $L_z \ll L_x, L_y$ ($Q_i < 0$), les états $|i-\rangle$ sont dominés par une composante trous lourds $|i, +3/2\rangle$, tandis que les états $|i+\rangle$ sont dominés par une composante trous légers. La figure 5.2 représente les niveaux d'énergies et les fonctions enveloppes d'une boîte quantique de silicium ayant pour cotés $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm et $L_z = 10$ nm. Les états $|1\pm\rangle$ restent des états de purs trous lourds/légers quand $L_y = L_x$ ($R_1 = 0$) tandis que $|2\pm\rangle$ le sont quand $L_y = 2L_x$ ($R_2 = 0$).

Chacun des états $|i\pm\rangle$ est deux fois dégénéré à cause de la symétrie de renversement du temps [voir la forme de l'hamiltonien (5.8)]. Le partenaire dégénéré dans la base $T\mathcal{B}_0$ a la même expression que les équations (5.12) avec $|i, +3/2\rangle$ remplacé par $|i, -3/2\rangle$ et $|i, -1/2\rangle$ remplacé par $|i, +1/2\rangle$. Nous introduisons donc un index de pseudo spin pour distinguer les états $|i\pm, \uparrow\rangle \equiv |i\pm\rangle$ dans la base \mathcal{B}_0 [éqs. (5.12)] de leur partenaire symétrique par renversement du temps $|i\pm, \downarrow\rangle$ dans la base $T\mathcal{B}_0$.

Effet du champ électrique statique

Ensuite, nous appliquons le champ électrique statique $\mathbf{E} = E_0 \mathbf{y}$ comme représenté dans la figure 5.1. L'hamiltonien associé à ce champ électrique s'écrit alors $U_{\text{elec}} = -eE_0 y$. Cet hamiltonien est diagonal

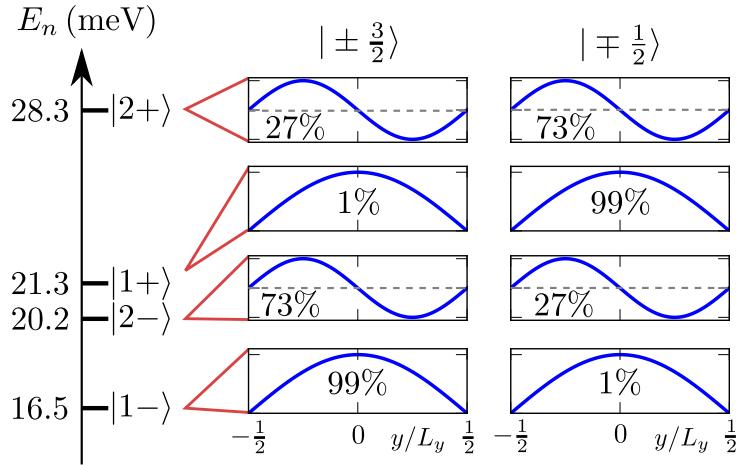


FIGURE 5.2 – Niveaux d'énergies et fonctions enveloppes selon l'axe y d'une boîte quantique de silicium ayant pour cotés $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm et $L_z = 10$ nm sans champ électrique ni magnétique dans la base minimale. La composition des trous de chaque état est indiquée dans la case correspondante. Les paramètres de Luttinger du silicium sont donnés dans la table 5.1.

par rapport au moment angulaire j_z , et prend la même forme dans les bases \mathcal{B}_0 et $T\mathcal{B}_0$:

$$\mathcal{H}_e = \Lambda \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

où $\Lambda = 16eE_0L_y/(9\pi^2)$. Donc, comme discuté ci-dessus, le champ électrique mélange les états $n_y = 1$ et $n_y = 2$ avec un même spin j_z .

Pour capturer l'effet du champ électrique statique, nous effectuons, en première approximation un développement en perturbation à l'ordre un en E_0 . Comme l'hamiltonien électrique ne couple pas des états de pseudo-spins différents, nous pouvons introduire les états de type s d'ordre un :

$$|\tilde{1}-\rangle = |1-\rangle + \lambda_{2-}^{1-}|2-\rangle + \lambda_{2+}^{1-}|2+\rangle \quad (5.15a)$$

$$|\tilde{1}+\rangle = |1+\rangle + \lambda_{2-}^{1+}|2-\rangle + \lambda_{2+}^{1+}|2+\rangle, \quad (5.15b)$$

et les états de type p_y d'ordre un :

$$|\tilde{2}-\rangle = |2-\rangle + \lambda_{1-}^{2-}|1-\rangle + \lambda_{1+}^{2-}|1+\rangle \quad (5.16a)$$

$$|\tilde{2}+\rangle = |2+\rangle + \lambda_{1-}^{2+}|1-\rangle + \lambda_{1+}^{2+}|1+\rangle, \quad (5.16b)$$

où :

$$\lambda_{2\pm}^{1\pm} = -\lambda_{1\pm}^{2\pm} = \Lambda \frac{h_1 h_2 + l_1 l_2}{E_{1\pm} - E_{2\pm}} \quad (5.17a)$$

$$\lambda_{2\mp}^{1\pm} = -\lambda_{1\mp}^{2\mp} = \pm \Lambda \frac{h_1 l_2 - h_2 l_1}{E_{1\pm} - E_{2\mp}}. \quad (5.17b)$$

Les énergies présentes aux dénominateurs sont définies par l'équation (5.13), et les coefficients $\{h_i\}$ et $\{l_i\}$ sont définis dans les équations (5.12). Le développement ci-dessus est valable seulement loin des éventuels anti-croisements des états $|1\pm\rangle$ et $|2\pm\rangle$.

Effet du champ magnétique statique

Enfin, nous appliquons un champ magnétique \mathbf{B} homogène au système. L'hamiltonien du champ magnétique H_m est alors la somme de trois contributions $H_m = H_p + H_d + H_Z$. Les deux premières,

H_p et H_d , sont le résultat de l'action du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes. Ces deux termes sont obtenus après les substitutions $k_\alpha k_\beta \rightarrow \{k_\alpha, k_\beta\}$ [$\{A, B\} = (AB + BA)/2$] et $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla + e\mathbf{A}/\hbar$ dans l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes (5.2) où \mathbf{A} est le potentiel vecteur tel que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ [voir le chapitre 2 pour les détails]. Nous choisissons une jauge symétrique $\mathbf{A} = -\mathbf{r} \times \mathbf{B}/2$. L'hamiltonien paramagnétique H_p collecte les termes proportionnels $\propto A_i$ tandis que H_d collecte les termes $\propto A_i A_j$ ($i, j \in \{x, y, z\}$). La troisième contribution, $H_Z = 2\kappa\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{J}$, est l'hamiltonien Zeeman qui décrit l'action du champ magnétique sur les fonctions de Bloch, \mathbf{J} étant le moment angulaire $3/2$ des trous (voir section 2.2.3).

Comme discuté dans le chapitre 4, l'hamiltonien diamagnétique $H_d \propto B^2$ n'est pas pertinent pour le calcul des fréquences de Larmor et de Rabi du qubit (à l'ordre un en champ magnétique) et sera donc négligé par la suite. De plus, l'hamiltonien paramagnétique H_p n'a pas d'action dans la base minimale \mathcal{B} . Seul l'hamiltonien Zeeman H_Z a des éléments non nuls dans cette base \mathcal{B} :

$$\langle i, j_z | H_Z | i', j'_z \rangle = \delta_{i,i'} \langle j_z | \mathcal{H}_Z | j'_z \rangle, \quad (5.18)$$

où $\{i, i'\} \in \{1, 2\}$, et \mathcal{H}_Z s'exprime comme suit dans la base $\{|+3/2\rangle, |+1/2\rangle, |-1/2\rangle, |-3/2\rangle\}$:

$$\mathcal{H}_Z = \kappa\mu_B B \begin{pmatrix} 3b_z & \sqrt{3}b_- & 0 & 0 \\ \sqrt{3}b_+ & b_z & 2b_- & 0 \\ 0 & 2b_+ & -b_z & \sqrt{3}b_- \\ 0 & 0 & \sqrt{3}b_+ & -3b_z \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

$\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$ est le vecteur unitaire aligné sur le champ magnétique, et $b_+ = b_-^* = b_x + ib_y$. Contrairement au champ électrique statique, qui mélange les enveloppes $n_y = 1$ et $n_y = 2$ avec un même moment angulaire total j_z ($\Delta j_z = 0$), le champ magnétique statique mélange des enveloppes ayant un même n_y avec des j_z différents ($\Delta j_z = \pm 1$).

5.2 Fréquence de Rabi

Dans cette section, nous rappelons l'expression ‘générale’ de la fréquence de Rabi quand le champ magnétique est traité à l'ordre un en perturbation, puis nous appliquons cette expression au qubit spin-orbite de trou dans la base minimale \mathcal{B} introduite dans la section précédente.

5.2.1 Équations générales ...

Nous supposons que le système est la boîte quantique rectangulaire soumise à un champ électrique et un champ magnétique homogènes décrit dans la section précédente. Nous considérons un qubit basé sur deux états ($|0, \uparrow\rangle, |0, \downarrow\rangle$) dégénérés à champ magnétique nul mais séparés en énergie ($|0\rangle, |1\rangle$) à champ magnétique fini. À ce stade, nous ne faisons pas d'hypothèse sur le choix de la base. Nous introduisons l'effet du champ magnétique via une théorie de perturbation dégénérée pour calculer la fréquence de Rabi à l'ordre un en B . Les états du qubit d'ordre zéro, $|0_0\rangle$ et $|1_0\rangle$, et les énergies d'ordre un, $E_1(0)$ et $E_1(1)$, sont ainsi les vecteurs et énergies propres de l'hamiltonien (voir la section 4.1.2) :

$$H_1(\mathbf{B}) = \begin{pmatrix} \langle 0, \uparrow | H'_m | 0, \uparrow \rangle & \langle 0, \uparrow | H'_m | 0, \downarrow \rangle \\ \langle 0, \downarrow | H'_m | 0, \uparrow \rangle & \langle 0, \downarrow | H'_m | 0, \downarrow \rangle \end{pmatrix}, \quad (5.20)$$

où $H'_m = H_p + H_Z$ collecte tous les termes proportionnels à B de l'hamiltonien du champ magnétique H_m . En particulier, nous soulignons que H_p n'a aucune action dans la base minimale \mathcal{B} [$H'_m \equiv H_Z$] ce qui n'est pas vrai dans la base étendue qui sera considérée dans les simulations numériques de la section 5.4. Les mêmes grilles qui appliquent un champ électrique statique sont utilisées pour contrôler les oscillations de Rabi entre $|0\rangle$ et $|1\rangle$ grâce à une modulation radio-fréquence du champ électrique $\delta\mathbf{E}(t) = E_{ac} \sin(2\pi f_L t)\mathbf{y}$ résonnante avec la fréquence de Larmor f_L du qubit. La figure 5.1 représente

cette modulation. Dans ces conditions, l'opérateur décrivant l'effet du champ électrique radio-fréquence [éq. (4.3)] est $V_{\text{ac}}D_1 = E_{\text{ac}}y$, et la fréquence de Rabi s'écrit :

$$f_R = \frac{e}{\hbar} E_{\text{ac}} |\langle \mathbb{1}|y|\mathbb{0}\rangle|. \quad (5.21)$$

Comme discuté dans le chapitre 4, la fréquence de Rabi f_R peut être calculée d'ordre un en B à partir des états à l'ordre un en champ magnétique :

$$|\mathbb{0}_1\rangle = |\mathbb{0}_0\rangle + \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle n, \sigma | H'_m | \mathbb{0}_0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, \sigma\rangle \quad (5.22a)$$

$$|\mathbb{1}_1\rangle = |\mathbb{1}_0\rangle + \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle n, \sigma | H'_m | \mathbb{1}_0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, \sigma\rangle, \quad (5.22b)$$

où $|n, \sigma\rangle$ est un état excité de pseudo-spin σ et E_n l'énergie des états de la paire de Kramers. En les substituant dans l'équation (5.21), nous obtenons :

$$f_R = \frac{eE_{\text{ac}}}{\hbar} \left| \sum_{n,\sigma} \frac{1}{E_0 - E_n} (\langle \mathbb{1}_0 | y | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | H'_m | \mathbb{0}_0 \rangle + \langle \mathbb{1}_0 | H'_m | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | y | \mathbb{0}_0 \rangle) \right|. \quad (5.23)$$

Nous rappelons que cette expression est valable pour tout choix de base. Nous allons maintenant exploiter cette expression dans la base minimale \mathcal{B} .

5.2.2 ... dans la base minimale

Nous nous plaçons dans la base minimale \mathcal{B} . Nous choisissons les états du qubit $|0, \uparrow\rangle \equiv |\tilde{1}-, \uparrow\rangle$, et $|0, \downarrow\rangle \equiv |\tilde{1}-, \downarrow\rangle$ (définies par les équations (5.15)) dégénérés sans champ magnétique (le choix des états $|\tilde{1}+, \uparrow\rangle, |\tilde{1}+, \downarrow\rangle$ est discuté en annexe G). Dans l'expression de la fréquence de Rabi (5.23), la somme sur n ne parcourt que les états $|\tilde{1}+\rangle$ et $|\tilde{2}\pm\rangle$. Nous allons développer les fréquences de Larmor et de Rabi à l'ordre un en tous les champs, dont le champ électrique statique E_0 . D'abord, les énergies $E_1(\mathbb{0})$ et $E_1(\mathbb{1})$, et les états $|\mathbb{0}_0\rangle$ et $|\mathbb{1}_0\rangle$ sont, à l'ordre un en champ électrique E_0 , les solutions propres de :

$$H_1(\mathbf{B}) = \frac{1}{2} \mu_B B \begin{pmatrix} g_z b_z & g_x b_x - i g_y b_y \\ g_x b_x + i g_y b_y & -g_z b_z \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

où :

$$g_x = 4\kappa(\sqrt{3}h_1l_1 + l_1^2) \quad (5.25a)$$

$$g_y = 4\kappa(\sqrt{3}h_1l_1 - l_1^2) \quad (5.25b)$$

$$g_z = 2\kappa(3h_1^2 - l_1^2). \quad (5.25c)$$

Les facteurs g_x , g_y et g_z ont été développés à l'ordre 1 en E_0 en introduisant l'équation (5.15) pour $|\tilde{1}, -\rangle$ dans l'équation (5.20). g_x , g_y , et g_z sont en fait indépendant de E_0 à cet ordre. La fréquence de Larmor est ainsi :

$$f_L = \frac{1}{\hbar} |E_1(\mathbb{1}) - E_1(\mathbb{0})| = \frac{\mu_B B}{\hbar} \sqrt{g_x^2 b_x^2 + g_y^2 b_y^2 + g_z^2 b_z^2}, \quad (5.26)$$

et g_x , g_y et g_z peuvent donc être identifiés comme les facteurs g principaux selon les axes magnétiques x , y et z . De plus, les états $|\mathbb{0}_0\rangle$ et $|\mathbb{1}_0\rangle$ s'écrivent :

$$|\mathbb{0}_0\rangle = \alpha |\tilde{1}-, \uparrow\rangle + \beta |\tilde{1}-, \downarrow\rangle \quad (5.27a)$$

$$|\mathbb{1}_0\rangle = -\beta |\tilde{1}-, \uparrow\rangle + \alpha^* |\tilde{1}-, \downarrow\rangle, \quad (5.27b)$$

où :

$$\alpha = \frac{-g_x b_x + i g_y b_y}{W} \quad (5.28a)$$

$$\beta = \frac{g_z b_z + \sqrt{g_x^2 b_x^2 + g_y^2 b_y^2 + g_z^2 b_z^2}}{W}. \quad (5.28b)$$

et W est un facteur de normalisation, tel que $W^2 = g_x^2 b_x^2 + g_y^2 b_y^2 + (g_z b_z + \sqrt{g_x^2 b_x^2 + g_y^2 b_y^2 + g_z^2 b_z^2})^2$.

Sans champ électrique statique, le champ électrique radio-fréquence d'amplitude E_{ac} peut seulement coupler $|1-\rangle$ avec $|2-\rangle$ et $|2+\rangle$ (par l'intermédiaire de l'élément de matrice dipolaire y), tandis que le champ magnétique statique (dont l'effet est capturé par l'hamiltonien H_Z) peut seulement coupler $|1-\rangle$ avec $|1+\rangle$. Par conséquent, il n'y a pas d'états excités capables de connecter $|0_0\rangle$ et $|1_0\rangle$ dans l'équation (5.23), et la fréquence de Rabi est nulle. Une analyse des symétries confirme cette conclusion : quand le champ électrique statique $E_0 = 0$, le système comporte trois plans miroirs respectivement perpendiculaires aux axes x , y , z qui, comme montré dans le chapitre 4 et compte tenue de la symétrie du champ électrique radio-fréquence, suppriment les oscillations de Rabi à l'ordre un en B et en E_{ac} .

Par conséquent, l'ordre minimal en champ électrique statique pour lequel la fréquence de Rabi peut être non nulle est l'ordre un. Ainsi, à l'ordre un en champ électrique statique E_0 , l'équation (5.23) peut être factorisée sous la forme :

$$f_R = \frac{e}{\hbar} B |E_0| E_{ac} \left| \Pi_{\tilde{1}+} + \Pi_{\tilde{2}-} + \Pi_{\tilde{2}+} \right|, \quad (5.29)$$

avec $\Pi_{\tilde{1}+}$, $\Pi_{\tilde{2}+}$ et $\Pi_{\tilde{2}-}$ les contributions des états $|\tilde{1}+\rangle$, $|\tilde{2}+\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle$ à l'équation (5.23) données dans l'annexe H.

L'équation (5.29) avec les équations (5.12), (5.15), (5.16), (5.27) et l'annexe H fournissent un modèle analytique pour la fréquence de Rabi f_R à l'ordre un en tous les champs B , E_0 , et E_{ac} dans la base minimale \mathcal{B} . Cependant, pour établir une expression de f_R plus compacte et transparente, nous allons, par la suite, la développer en puissances de L_z/L_x et L_z/L_y dans une limite de couche mince $L_z \ll L_x, L_y$. Cette limite est appropriée pour la plupart des dispositifs planaires et SOI sur des substrats (001) (voir chapitre 4).

Limite de la couche mince

Dans la limite $L_z \ll L_x, L_y$, les états $|1-\rangle$ et $|2-\rangle$ sont presque des états de purs trous lourds ($j_z = \pm 3/2$) tandis que les états $|1+\rangle$ et $|2+\rangle$ sont presque des états de purs trous légers ($j_z = \pm 1/2$). Ainsi le champ électrique statique E_0 et le champ électrique radio-fréquence (d'amplitude E_{ac}) couplent essentiellement $|1-, \sigma\rangle$ et $|2-, \sigma\rangle$. À l'ordre le plus bas en L_z/L_x et L_z/L_y , seuls les états $|\tilde{2}-\rangle$ contribuent à la fréquence de Rabi dans l'équation (5.23). Plus précisément, les états $|1-, \uparrow\rangle$ et $|2-, \uparrow\rangle$ [éqs. (5.12)] s'écrivent à l'ordre deux en L_z/L_x et L_z/L_y :

$$\begin{aligned} |1-, \uparrow\rangle &= |1, +\frac{3}{2}\rangle + \delta l_1 |1, -\frac{1}{2}\rangle \\ |2-, \uparrow\rangle &= |2, +\frac{3}{2}\rangle + \delta l_2 |2, -\frac{1}{2}\rangle, \end{aligned} \quad (5.30)$$

où :

$$\delta l_1 = -\frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \left(\frac{L_z^2}{L_y^2} - \frac{L_z^2}{L_x^2} \right) \quad (5.31a)$$

$$\delta l_2 = -\frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \left(4 \frac{L_z^2}{L_y^2} - \frac{L_z^2}{L_x^2} \right). \quad (5.31b)$$

Ensuite, à champ électrique statique fini E_0 :

$$\begin{aligned} |\tilde{1}-,\uparrow\rangle &= |1,+\frac{3}{2}\rangle + \lambda|2,+\frac{3}{2}\rangle + \delta l_1|1,-\frac{1}{2}\rangle + \lambda\delta l_2|2,-\frac{1}{2}\rangle \\ |\tilde{2}-,\uparrow\rangle &= |2,+\frac{3}{2}\rangle - \lambda|1,+\frac{3}{2}\rangle + \delta l_2|2,-\frac{1}{2}\rangle - \lambda\delta l_1|1,-\frac{1}{2}\rangle, \end{aligned} \quad (5.32)$$

où [voir les équations (5.15)] :

$$\lambda = -\frac{32m_0eE_0L_y^3}{27\pi^4\hbar^2(\gamma_1 + \gamma_2)}. \quad (5.33)$$

Les expressions sont similaires pour $|\tilde{1}-,\downarrow\rangle$ et $|\tilde{2}-,\downarrow\rangle$ (avec $j_z = 3/2$ remplacé par $j_z = -3/2$ et $j_z = -1/2$ par $j_z = 1/2$).

Les facteurs g principaux des équations (5.25) sont ainsi, à l'ordre deux en L_z/L_x et L_z/L_y :

$$g_x = g_y = 4\sqrt{3}\kappa\delta l_1 = -3\kappa\frac{\gamma_3}{\gamma_2}\left(\frac{L_z^2}{L_y^2} - \frac{L_z^2}{L_x^2}\right) \quad (5.34a)$$

$$g_z = 6\kappa. \quad (5.34b)$$

Comme attendu pour des états de purs trous lourds, $|g_z| \gg |g_x|, |g_y|$. Les éléments de matrice H_Z entre les états $\{|\tilde{1}-,\uparrow\rangle, |\tilde{1}-,\downarrow\rangle\}$ (colonnes) et $\{|\tilde{2}-,\uparrow\rangle, |\tilde{2}-,\downarrow\rangle\}$ (lignes) présents dans l'équation (5.23), s'écrivent à l'ordre deux en L_z/L_x et L_z/L_y :

$$\mathcal{H}_Z^{(21)} = 2\sqrt{3}\kappa\mu_B B\lambda(\delta l_2 - \delta l_1) \begin{pmatrix} 0 & b_- \\ b_+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.35)$$

Les éléments de matrice magnétique entre les pseudo-spin opposés ont pour origine l'interaction proportionnelle à b_{\pm} de la composante majoritaire $j_z = \pm 3/2$ d'un pseudo-spin avec la composante minoritaire $j_z = \pm 1/2$ de l'autre. Si $E_0 = 0$ ou $\delta l_1 = \delta l_2$, alors chacun des deux états $|\tilde{1}-,\uparrow\rangle$ et $|\tilde{2}-,\downarrow\rangle$ peut être factorisé comme un produit d'une enveloppe par une fonction de Bloch mixte trous lourds/légers où ces fonctions de Bloch sont identiques et où les deux enveloppes sont orthogonales. Ainsi, l'élément de matrice magnétique entre ces états est nul car il ne peut pas coupler des états d'enveloppes orthogonales. Cela donne lieu le préfacteur $\propto \lambda(\delta l_2 - \delta l_1)$ dans l'équation (5.35). La physique des oscillations de Rabi sera analysée plus en détails dans la section 5.4. En substituant les équations ci-dessus dans l'expression de la fréquence de Rabi, nous obtenons :

$$f_R = \frac{64\sqrt{3}e}{9\pi^2\hbar}\mu_B|\kappa|BE_{\text{ac}}L_y \frac{|\lambda|(\delta l_2 - \delta l_1)}{E_{2-} - E_{1-}} |\alpha^2b_+ - \beta^2b_-|. \quad (5.36)$$

Le dernier terme décrit comment la fréquence de Rabi dépend de l'orientation du champ magnétique, et peut être factorisé comme suit :

$$|\alpha^2b_+ - \beta^2b_-| = G(\theta)\sin\theta, \quad (5.37)$$

avec θ l'angle entre le champ magnétique et l'axe **z** (voir figure 5.1), et :

$$\begin{aligned} G(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{1 + F^2(\theta)}} \\ F(\theta) &= \frac{\gamma_3}{2\gamma_2}\left(\frac{L_z^2}{L_y^2} - \frac{L_z^2}{L_x^2}\right)\tan\theta. \end{aligned} \quad (5.38)$$

La fonction $F(\theta)$ est développée à l'ordre deux en L_z/L_x et L_z/L_y . Il n'est pas, cependant, pertinent de développer $G(\theta)$ en puissance de L_z/L_x et L_z/L_y car la convergence de la série résultante est non uniforme par rapport à la variable θ . En développant seulement le préfacteur de $G(\theta)$ dans l'équation (5.36) à l'ordre deux en L_z/L_x et L_z/L_y , nous obtenons finalement :

$$f_R^{(2)} = \frac{2^8m_0e^3}{3^4\pi^9\hbar^4}B|E_0|E_{\text{ac}}\frac{\gamma_3|\kappa|}{\gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)^2}L_y^6\frac{L_z^2}{L_y^2}G(\theta)\sin\theta, \quad (5.39)$$

À ce niveau d'approximation, la fréquence de Rabi ne dépend pas de la composante du champ magnétique dans le plan (xy) (pas de dépendance en angle φ). L'enveloppe $\sin \theta = |b_{\pm}|$ est le résultat de la dépendance $\propto b_{\pm}$ de l'élément de matrice de H_Z présent dans l'équation (5.35). La fonction $G(\theta)$ provient de la composition en pseudo-spin des états $|0_0\rangle$ et $|1_0\rangle$ [les coefficients α et β de l'équation (5.36)]. La figure 5.3 représente la fonction $G(\theta)$ pour différents rapports de longueurs de boîte quantique L_y/L_x . Nous observons que $G(\theta) \sim 1$ pour une large gamme d'angle θ sauf près de $\pi/2$ où elle diminue brutalement pour s'annuler en $\theta = \pi/2$. L'origine de ce creux sera discutée plus tard (voir section 5.4.2).

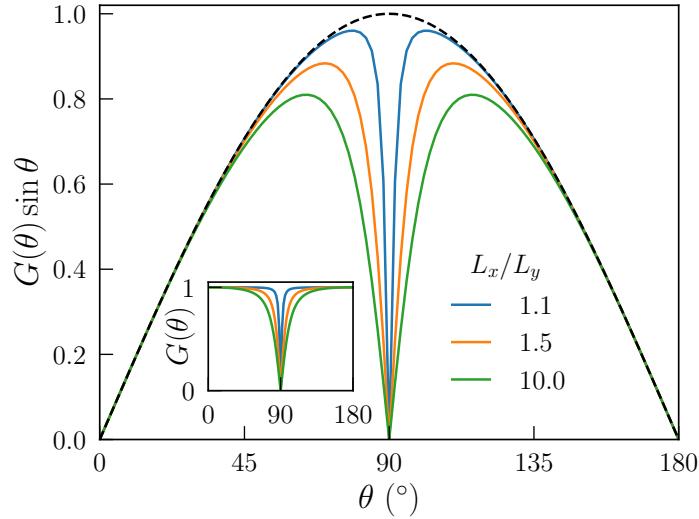


FIGURE 5.3 – Fonction $G(\theta)$ (insert) et $G(\theta) \sin \theta$ pour différents rapports L_x/L_y à $L_z/L_y = 1/3$. Le trait pointillé noir est l'enveloppe $\sin \theta$. $G(\theta) \sim 1$ pour une large gamme d'angle θ sauf près de $\pi/2$ où elle diminue brutalement pour s'annuler en $\theta = \pi/2$.

La fréquence de Rabi devient dépendante de la composante du champ magnétique dans le plan (xy), donc de l'angle φ une fois que les états $|\tilde{1}-\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle$ sont développés à l'ordre quatre en L_z/L_x et L_z/L_y . En procédant de façon similaire à ce qui précède, nous obtenons après calculs :

$$f_R^{(4)} = f_R^{(2)} \left\{ 1 + \frac{1}{4\gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)} \left[A_1 \frac{L_z^2}{L_y^2} - A_2 \frac{L_z^2}{L_x^2} + A_3 \left(5 \frac{L_z^2}{L_y^2} - 2 \frac{L_z^2}{L_x^2} \right) \cos 2\varphi \right] \right\}, \quad (5.40)$$

où $A_1 = 10(\gamma_1\gamma_2 + \gamma_2^2 + 3\gamma_3^2)$, $A_2 = 12\gamma_3^2$, $A_3 = \gamma_3(\gamma_1 + \gamma_2)$, et $f_R^{(2)}$ est définie par l'équation (5.39).

Corrections à fort champ électrique

Les expressions de la fréquence de Rabi d'une géométrie quelconque [éq. (5.29)] et d'une couche mince [éqs. (5.39) et (5.40)] sont valides à champ électrique statique E_0 suffisamment faible par rapport à l'énergie de confinement selon z. Cependant, comme montré dans la section suivante, la fréquence de Rabi décroît à grand E_0 , en particulier parce que l'élément de matrice dipolaire $\langle \tilde{2}-|y|\tilde{1}-\rangle$ devient petit une fois que les états $|\tilde{1}-\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle$ sont spatialement séparés par le champ électrique statique (voir discussion au chapitre 4).

Une expression de la fréquence de Rabi valable pour n'importe quel champ électrique peut être construite quand $\lambda_{2\mp}^{1\pm}$ et $\lambda_{1\mp}^{2\mp}$ sont négligeables [éqs. (5.17)]. Dans cette limite, le champ électrique couple $|1-\rangle$ à $|2-\rangle$ mais pas à $|2+\rangle$; cet hamiltonien à deux niveaux peut être résolu exactement pour les états propres $|\tilde{1}-\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle$. En introduisant ces expressions pour $E_{\tilde{1}-}$, $|\tilde{1}-\rangle$, $E_{\tilde{2}-}$, et $|\tilde{2}-\rangle$ partout sauf dans les coefficients α et β [éq. (5.27)], la fréquence de Rabi [éq. (5.29)] est simplement renormalisée par un facteur :

$$F_e(E_0) = \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{E_0}{E_{\max}} \right)^2 \right]^{-\frac{3}{2}}, \quad (5.41)$$

	Si	Ge	InP	GaAs	InAs	InSb
E'_g (eV)	4.34	0.89	1.42	1.52	0.42	0.24
Δ_{so} (eV)	0.044	0.29	0.11	0.34	0.41	0.80
γ_1	4.285	13.38	4.95	6.85	20.40	37.10
γ_2	0.339	4.24	1.65	2.10	8.30	16.50
γ_3	1.446	5.69	2.35	2.90	9.10	17.70
$m_z (m_0)$	0.277	0.204	0.606	0.377	0.263	0.244
$m_{xy} (m_0)$	0.216	0.057	0.152	0.112	0.035	0.019
κ	-0.42	3.41	0.97	1.20	7.60	15.60
$\zeta_{[110]} (\times 100)$	8.38	1.47	3.17	2.07	1.01	0.58
$\zeta_{[001]} (\times 100)$	1.96	1.10	2.23	1.50	0.92	0.54
$\zeta'_{[110]} (\times 100)$	92.25	7.62	21.58	15.43	3.82	2.00
$\zeta'_{[001]} (\times 100)$	21.63	5.68	15.15	11.17	3.48	1.87

TABLE 5.1 – Énergie de la bande interdite E'_g en Γ , énergie spin-orbite Δ_{so} dans les bandes de valence, paramètres de Luttinger, masses des trous lourds selon z [$m_z = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$], et dans le plan (xy) [$m_{xy} = m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$], paramètre κ [48] et coefficients $\zeta_{[110]}$, $\zeta_{[100]}$, $\zeta'_{[110]}$ et $\zeta'_{[100]}$ caractérisant la vitesse des oscillations de Rabi dans des boîtes quantiques orientées [110] et [100], pour différents matériaux [éqs. (5.45), (5.50) et (5.51)].

où :

$$E_{\max}^{-1} = 2\sqrt{2}e \frac{|\langle 2|y|1\rangle|}{E_{2-} - E_{1-}}. \quad (5.42)$$

Cette approximation est pertinente dans la limite de la couche mince. À l’ordre le plus bas en L_z/L_x et L_z/L_y , E_{\max} s’écrit :

$$E_{\max}^{(0)} = \frac{27\pi^4\hbar^2(\gamma_1 + \gamma_2)}{64\sqrt{2}m_0eL_y^3}. \quad (5.43)$$

Les fréquences de Rabi renormalisées $\tilde{f}_R^{(2)}(E_0) = f_R^{(2)}(E_0)F_e(E_0)$ et $\tilde{f}_R^{(4)}(E_0) = f_R^{(4)}(E_0)F_e(E_0)$ sont maximums quand $E_0 = E_{\max}$. À ce champ, $\tilde{f}_R(E_{\max}) = f_R(\tilde{E}_{\max})$, où $\tilde{E}_{\max} = (3/2)^{-3/2}E_{\max}$. En particulier,

$$\tilde{f}_R^{(2)}(E_{\max}^{(0)}) = \frac{8e^2}{9\sqrt{3}\pi^5\hbar^2}BE_{\text{ac}}\frac{\gamma_3|\kappa|}{\gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)}L_y^3\frac{L_z^2}{L_y^2}G(\theta)\sin\theta. \quad (5.44)$$

Nous notons que la fréquence de Rabi maximale est proportionnelle à $L_yL_z^2$ dans la limite de la couche mince $L_z \ll L_y$.

5.3 Validation des hypothèses du modèle

Dans cette section, nous discutons de la validité des différentes hypothèses faites dans le modèle de la boîte quantique rectangulaire. Tout d’abord, nous estimons le domaine de validité des différentes approximations pour le champ électrique [linéaire éq. (5.29), et renormalisé éq. (5.41)], puis celui de la limite de couche mince [éqs. (5.39) et (5.40)]. Ensuite, nous montrons que la base minimale capture les tendances de la fréquence de Rabi calculée dans une base convergée. Finalement, nous discutons des limites de ce modèle.

Pour tester le modèle et les approximations de la section 5.2, nous considérons une boîte quantique de silicium ayant pour longueurs $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm et $L_z = 10$ nm soumise à un champ magnétique statique $B = 1$ T parallèle à y + z ($\theta = 45^\circ$, $\varphi = 0^\circ$). L’amplitude du champ électrique radio-fréquence est $E_{\text{ac}} = 0.03$ mV/nm. Les paramètres du silicium κ , γ_1 , γ_2 et γ_3 sont donnés dans la table 5.1.

5.3.1 Traitement du champ électrique statique

La figure 5.4 représente la fréquence de Rabi en fonction du champ électrique statique E_0 . Elle est calculée soit à partir de l'équation (5.23), en utilisant les états propres exacts de l'hamiltonien, soit à partir de l'approximation d'ordre un en E_0 [éq. (5.29)], dans la base minimale \mathcal{B} dans les deux cas. La limite de la couche mince n'est pas prise à cette étape. Comme attendu, l'approximation à l'ordre un reproduit la pente de la fréquence de Rabi près de $E_0 = 0$. Cependant, à grand champ électrique la fréquence de Rabi calculée à partir des états exacts diminue car la polarisabilité des états du qubit devient plus faible à fort confinement latéral. Cette tendance est néanmoins très bien capturée par la renormalisation de l'approximation d'ordre un [éq. (5.41)].

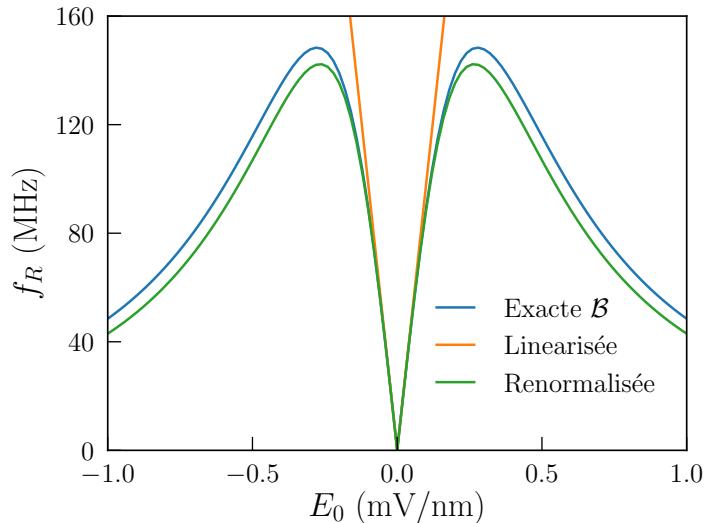


FIGURE 5.4 – Fréquence de Rabi en fonction du champ électrique statique E_0 dans une boîte quantique de silicium ayant pour cotés $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm et $L_z = 10$ nm. Le champ magnétique $B = 1$ T est orienté selon $y + z$. Le champ radio fréquence a pour amplitude $E_{ac} = 0.03$ mV/nm. La fréquence de Rabi est calculée soit en utilisant les états exacts de l'hamiltonien dans la base minimale \mathcal{B} [“Exacte \mathcal{B} ”, éq. (5.23)], soit en utilisant l'approximation d'ordre un en E_0 , d'abord brute [“Linéarisée”, éq. (5.29)], puis renormalisée [“Renormalisée”, éq. (5.41)].

5.3.2 Limite de la couche mince

Nous comparons ensuite le développement à l'ordre L_z^2 ($f_R^{(2)}$) et L_z^4 ($f_R^{(4)}$) avec la fréquence de Rabi contenant tous les ordres $f_R^{(\infty)}$ définie par l'équation (5.29). Les trois fréquences de Rabi (qui restent linéarisées par rapport à E_0) sont représentées sur la figure 5.5 en fonction de L_z (pour L_x et L_y fixées), à $E_0 = 0.1$ mV/nm. Tandis que $f_R^{(2)}$ peut être significativement plus petite que $f_R^{(\infty)}$, $f_R^{(4)}$ s'en approche beaucoup plus (mais reste toujours légèrement plus grande) dans la gamme $L_z = 1 - 10$ nm .

5.3.3 Base minimale

Finalement, la figure 5.6 représente la dépendance de la fréquence de Rabi à l'orientation du champ magnétique pour deux matériaux (Si, Ge) et pour quatre approximations différentes :

1. La formule analytique à l'ordre quatre [éq. (5.40)],
2. La solution exacte du modèle dans la base minimale \mathcal{B} ,
3. La solution exacte dans une base "convergée" incluant les nombres quantiques jusqu'à $n_x = n_y = n_z = 18$, mais prenant en compte l'hamiltonien Zeeman seul ($H'_m = H_z$),

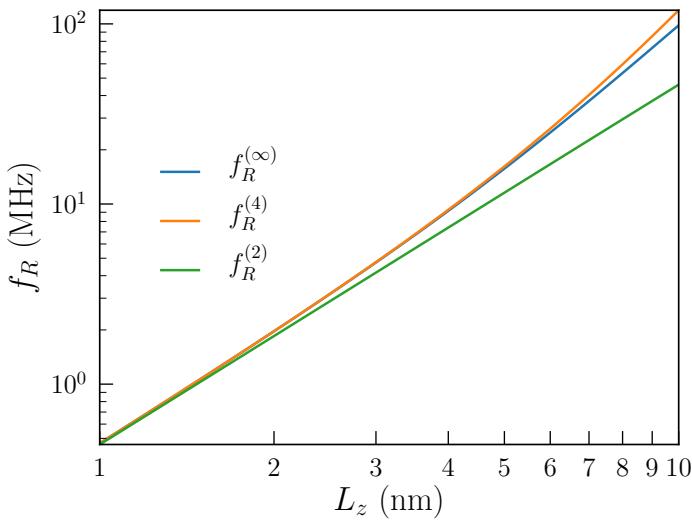


FIGURE 5.5 – Fréquence de Rabi en fonction de la hauteur L_z de la boîte quantique dans trois différentes approximations, $f_R^{(2)}$ [éq. (5.39)], $f_R^{(4)}$ [éq. (5.40)], et $f_R^{(\infty)}$ [éq. (5.29)], où ces fréquences de Rabi sont linéarisées par rapport au champ électrique statique E_0 . Ici $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm, $E_0 = 0.1$ mV/nm, $E_{ac} = 0.03$ mV/nm, et $B = 1$ T parallèle à $\mathbf{y} + \mathbf{z}$.

4. La solution exacte dans la même base convergée mais en prenant en compte l'effet du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes ($H'_m = H_z + H_p$).

Pour toutes ces approximations, les cotés de la boîte sont les mêmes que dans la figure 5.4, et les paramètres matériau du germanium sont aussi donnés dans la table 5.1. Le champ électrique statique est $E_0 = 0.1$ mV/nm et le champ magnétique est $B = 1$ T.

La formule analytique [éq. (5.40)] fournit une description raisonnable de la dépendance orientatielle de la fréquence de Rabi, qui est, de plus, cohérente avec les cartes calculées dans les dispositifs SOI réalistes au chapitre 4 (allant au delà de ce modèle de boîte quantique rectangulaire). La fréquence de Rabi obtenue de la solution exacte du modèle dans la base minimale \mathcal{B} est légèrement différente à cause des corrections d'ordre supérieurs à l'équation (5.40).

La fréquence de Rabi f_R croît de manière significative dans une base plus grande qui prend en compte la contribution d'un grand nombre d'états excités mais montre toujours la même anisotropie. L'hamiltonien paramagnétique H_p (qui n'a aucune action dans la base \mathcal{B}) apporte une correction notable à la fréquence de Rabi. Tandis que les contributions venant de l'hamiltonien Zeeman sont proportionnelles à κ , celles de l'hamiltonien paramagnétique varient en γ_2 et γ_3 . Elles sont en fait opposées dans le silicium (où H_p augmente la fréquence de Rabi) et dans le germanium (où H_p la décroît) en raison des signes opposés de κ dans les deux matériaux.

Pour conclure, les formules analytiques pour $f_R^{(2)}$ et $f_R^{(4)}$ [éqs. (5.39) et (5.40)] fournissent une description semi-quantitative des oscillations de Rabi et peuvent être analysées pour mettre en évidence les tendances suivies par un tel dispositif en fonction de sa géométrie et du matériau qui le compose.

5.3.4 Intensité du couplage spin-orbite

De telles anisotropies de la fréquence de Rabi sont toujours présentes dans le cas d'oscillations de Rabi créées par l'intermédiaire d'un couplage spin-orbite, même pour des électrons [69, 35]. Même si le couplage spin-orbite n'est pas explicite dans l'hamiltonien de Luttinger-Kohn [éq. (5.8)], ces oscillations de Rabi sont le résultat de son action sur les états de trous $j = 3/2$ et $j = 1/2$ [67, 62, 68]. En l'absence de couplage spin-orbite, le spin des trous est découpé de leur mouvement orbital, et ainsi les oscillations de Rabi induites par un champ électrique ne sont pas possibles. L'hamiltonien de Luttinger-Kohn suppose une séparation Δ_{so} entre les états $j = 3/2$ et $j = 1/2$ si grande que les états $j = 1/2$

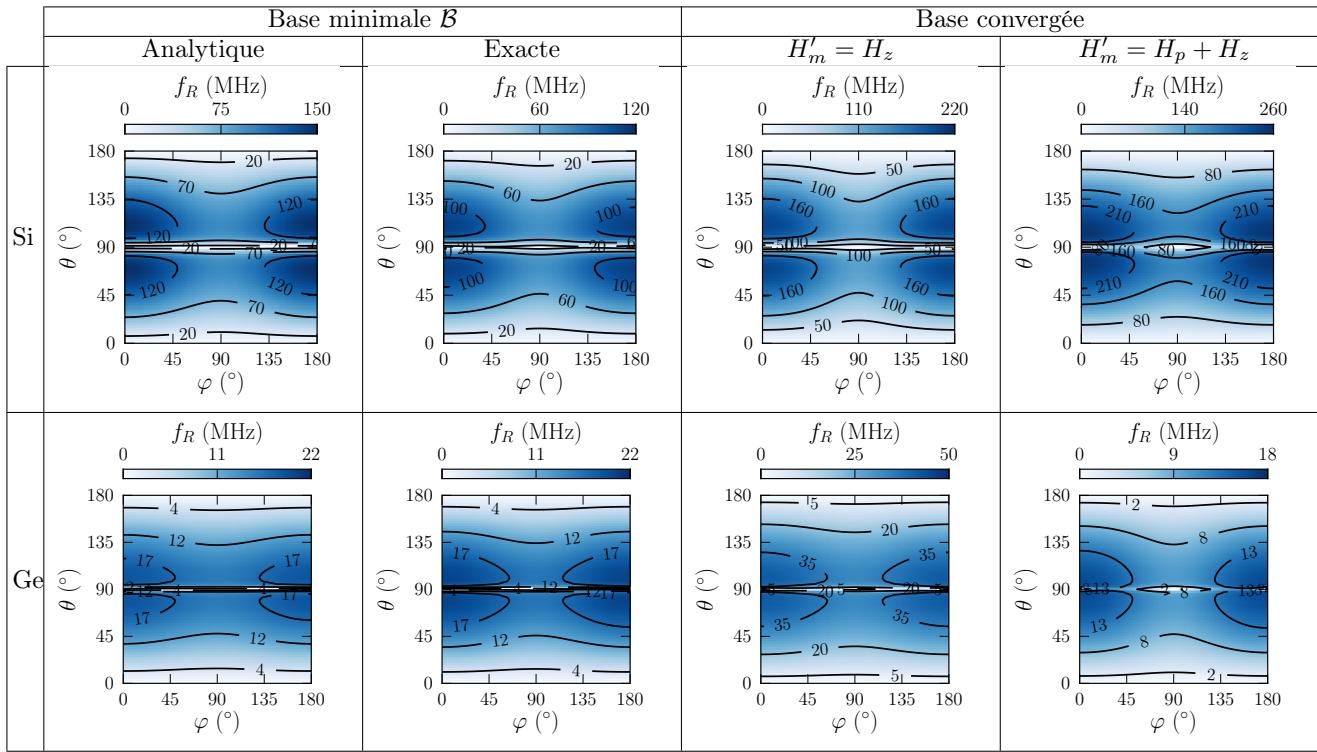


FIGURE 5.6 – Cartes de la fréquence de Rabi en fonction de l’orientation du champ magnétique pour un qubit de silicium (première ligne) et de germanium (seconde ligne) dans une boîte quantique rectangulaire de dimensions $L_x = 40 \text{ nm}$, $L_y = 30 \text{ nm}$ et $L_z = 10 \text{ nm}$. Les différents champs sont $E_0 = 0.1 \text{ mV/nm}$, $E_{\text{ac}} = 0.03 \text{ mV/nm}$, et $B = 1 \text{ T}$. Quatre différentes approximations pour la fréquence de Rabi sont comparées : (première colonne) formule analytique à l’ordre quatre [éq. (5.40)]; (seconde colonne) solution exacte dans la base minimale \mathcal{B} ; (troisième colonne) solution exacte dans une base "convergée" en tenant compte de l’hamiltonien Zeeman seulement; (quatrième colonne) solution exacte dans cette base "convergée" en tenant compte l’effet du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes.

(split off) peuvent être négligés. Ainsi, la physique des trous de basses énergies devient indépendant de la valeur Δ_{so} . L’interaction avec la bande de split-off $j = 1/2$ à Δ_{so} fini peut-être prise en compte dans un modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes [70]. Cependant, nous avons vérifié numériquement que l’introduction d’un Δ_{so} fini n’entraîne pas de changement significatif dans le comportement du qubit de trou. En particulier, le modèle de la boîte quantique rectangulaire en $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes se comporte qualitativement comme le dispositif réel étudié dans le chapitre 4 où le $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes a été utilisé.

5.3.5 Limitations du modèle

Nous voulons finalement mettre en avant les spécificités du modèle et ses limites. Premièrement, la situation décrite ici est un cas de g -TMR [58] dans un potentiel de confinement fortement anharmonique (comme discuté dans le chapitre 4). Dans ce scénario, les oscillations de Rabi sont le résultat du changement de la forme de la fonction d’onde du qubit induit par le champ électrique radio-fréquence. Elles peuvent être reliées à la dépendance électrique des facteurs g principaux du qubit, bien que nous n’ayons pas suivi cette approche ici. Ensuite, le modèle actuel ne tient pas compte de l’effet du potentiel vecteur sur les parties enveloppes de la fonction d’onde, qui se manifeste notamment par une correction Δg_z sur le facteur gyromagnétique principal g_z résultant du couplage entre les enveloppes $n_z = 1$ et $n_z = 2$ par le terme S de l’hamiltonien de Luttinger-Kohn (5.8) (voir la référence [37] et le chapitre 4). De plus, un terme de renormalisation de la masse des trous apparaît également lorsque nous traitons les états de modulations $n_z > 1$ en perturbation [71]. Cela introduit une correction supplémentaire sur les

facteurs g car ils dépendent de la masse effective des trous. Ces corrections ont cependant un plus grand impact sur la fréquence de Larmor que sur la fréquence de Rabi dans la limite d'une couche mince.

5.4 Physique des oscillations de Rabi

Dans cette section, nous discutons en détails de la physique qui ressort de l'expression de la fréquence de Rabi dans la limite d'une couche mince [éq. (5.39)]. Tout d'abord, nous discutons la dépendance de la fréquence de Rabi avec les dimensions de la boîte quantique et avec les paramètres de Luttinger. Puis nous analysons la dépendance de la fréquence de Rabi avec l'orientation du champ magnétique.

5.4.1 Ingrédients nécessaires aux oscillations de Rabi

Selon l'équation (5.39), la fréquence de Rabi est proportionnelle à $\zeta_{[110]} L_y^6 (L_z^2/L_y^2)$, où :

$$\zeta_{[110]} = \frac{\gamma_3 |\kappa|}{\gamma_2 (\gamma_1 + \gamma_2)^2}. \quad (5.45)$$

L'indice [110] fait référence à l'orientation de la boîte quantique (voir la section suivante sur l'orientation de la boîte). Cette équation met en évidence les ingrédients nécessaires aux oscillations de Rabi qui sont induites par le couplage spin orbite dans la bande de valence.

Mélange trous lourds/légers [généralité]

Le mélange trous lourds/trous légers dans les états d'une boîte quantique, induit par le confinement latéral, est un ingrédient nécessaire pour contrôler électriquement un qubit de spin semiconducteur [68]. Nous allons montrer que l'absence de mélange trous lourds/trous légers entraîne nécessairement une fréquence de Rabi nulle.

Considérons une boîte quantique (quelconque) sans champ extérieur. Nous supposons que les états du qubit peuvent tous être classés en deux familles distinctes caractérisées par leur fonctions de Bloch $u_{1\sigma}$ et $u_{2\sigma}$:

$$|n, \sigma\rangle = |\varphi_n\rangle \times |u_{1\sigma}\rangle \text{ ou } |\varphi_n\rangle \times |u_{2\sigma}\rangle. \quad (5.46)$$

Les fonctions de Bloch $u_{1\sigma}$ et $u_{2\sigma}$ peuvent être celles des purs trous lourds et purs trous légers, mais le raisonnement suivant s'applique dès que les trous forment deux familles découplées. Les états du qubit d'ordre zéro ($|0_0\rangle$, $|1_0\rangle$) prennent alors la même forme que ceux de l'équation (5.46). Le champ électrique statique E_0 couple des états ayant des fonctions de Bloch identiques, et ainsi les états à champ électrique statique fini ont, eux aussi, la même forme que ceux de l'équation (5.46). Dans le développement en série de perturbations de la fréquence de Rabi (5.23), le champ électrique E_{ac} ne couple des états de même fonction de Bloch $u_{1\sigma}$ et $u_{2\sigma}$, mais dont les enveloppes sont donc nécessairement orthogonales. L'hamiltonien Zeeman ne peut pas coupler des états d'enveloppes orthogonales, et l'hamiltonien paramagnétique H_p ne couple pas des fonctions de Bloch de pseudo-spin opposés.

Finalement, ni le champ électrique E_{ac} , ni le champ magnétique ne sont capables de connecter l'état $|0_0\rangle$ à $|1_0\rangle$ dans ce développement [éq. (5.23)], et donc la fréquence de Rabi est nulle. Ainsi, le mélange de trous de fonctions de Bloch différentes, rendant impossible la factorisation de l'équation (5.46), est nécessaire pour entretenir électriquement des oscillations de Rabi.

Seul le confinement latéral dans une boîte quantique permet le mélange trous lourds/légers, via le terme R de l'hamiltonien de Luttinger [éq. (5.2)]. En l'absence d'un tel confinement latéral (dans un film par exemple), il n'y a pas d'oscillations de Rabi possible.

Mélange trous lourds/légers [base minimale]

À partir de maintenant, nous reconsidérons la boîte quantique rectangulaire. Dans la base minimale \mathcal{B} , le couplage des enveloppes $j_z = \pm 3/2$ et $j_z = \pm 1/2$ par le confinement latéral est caractérisé par R_1 et R_2 [éqs. (5.10) et (5.11)], et est donc proportionnel à γ_3 . À l'ordre le plus bas en perturbation, le mélange résultant entre les enveloppes de trous lourds et de trous légers est inversement proportionnel à la séparation en énergie $2Q_i \propto \gamma_2$ des états purs trous lourds et des états purs trous légers [voir les équations (5.31) pour les expressions du mélange des trous légers δl_1 et δl_2 dans la limite d'une couche mince]. Cela explique le facteur γ_3/γ_2 dans l'expression de $\zeta_{[110]}$: plus le couplage entre les trous lourds et trous légers est grand par rapport à leur séparation ($\gamma_3 \gg \gamma_2$), plus les oscillations de Rabi sont rapides. Une analyse plus fine montre qu'il faut en fait un déséquilibre entre le mélange trous lourd et trous légers dans l'état fondamental $|1-\rangle$ et dans l'état excité $|2-\rangle$ [voir discussion après l'équation (5.35)] : c'est pourquoi la fréquence de Rabi est proportionnelle à $\delta l_2 - \delta l_1 \propto (\gamma_3/\gamma_2)(L_z^2/L_y^2)$ dans l'équation (5.39).

Brisure de la symétrie d'inversion

Le mélange trous lourds et trous légers par le confinement latéral n'est cependant pas suffisant pour permettre des oscillations de Rabi induites par un champ électrique radio-fréquence. En effet, ce champ radio-fréquence E_{ac} ne peut pas coupler des enveloppes de même parité (par rapport au centre de la boîte). Or le confinement latéral mélange des enveloppes de trous légers et de trous lourds de même parité, comme le font l'hamiltonien Zeeman H_Z et l'hamiltonien paramagnétique H_p dans l'équation (5.22). Dans la base minimale \mathcal{B} , seul le champ électrique statique E_0 mélange les enveloppes impaires p_y aux enveloppes paires de type s des états du qubits. Ce champ électrique est ainsi un prérequis pour les oscillations de Rabi, ce qui souligne à nouveau la nécessité de briser la symétrie d'inversion de la boîte quantique (voir la discussion sur les symétries du chapitre 4). Le mélange s/p_y est en fait proportionnel à $\Lambda \propto L_y$ et inversement proportionnel à la séparation $\Delta E \propto (\gamma_1 + \gamma_2)/L_y^2$ entre les états $|1-\rangle \approx |1, \pm 3/2\rangle$ et $|2-\rangle \approx |2, \pm 3/2\rangle$, et donne donc lieu à un terme proportionnel à $L_y^3/(\gamma_1 + \gamma_2)$ dans l'équation (5.39).

Interaction avec le champ magnétique

Enfin, les états $|\tilde{1}-\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle$ sont couplés par l'hamiltonien Zeeman dans l'équation (5.22). Ce mélange est proportionnel à κ , et, encore une fois, inversement proportionnel à la séparation $\Delta E \propto (\gamma_1 + \gamma_2)/L_y^2$ entre les états $|\tilde{1}-\rangle \approx |1-\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle \approx |2-\rangle$. Ce couplage brise la symétrie par renversement du temps dans les équations (5.22) et rend possible les oscillations de Rabi entre $|\tilde{0}_1\rangle$ et $|\tilde{1}_1\rangle$. Le couplage au champ électrique radio-fréquence E_{ac} étant proportionnel à L_y (comme le couplage à E_0), la fréquence de Rabi varie finalement comme $\gamma_3|\kappa|/[\gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)^2] \times L_y^4/L_z^2$.

5.4.2 Orientation du champ magnétique

D'après l'équation (5.39), la fréquence de Rabi est proportionnelle à $G(\theta) \sin \theta$ où θ est l'angle entre l'axe z et le champ magnétique B. La dépendance de la fréquence de Rabi à l'orientation du champ magnétique résulte de l'interaction entre la réponse magnétique des trous lourds et trous légers. En effet, nous pouvons définir :

$$|\tilde{1}-, \Downarrow'\rangle \equiv |\tilde{0}_0\rangle = \alpha|\tilde{1}-, \Uparrow\rangle + \beta|\tilde{1}-, \Downarrow\rangle \quad (5.47a)$$

$$|\tilde{1}-, \Uparrow'\rangle \equiv |\tilde{1}_0\rangle = -\beta|\tilde{1}-, \Uparrow\rangle + \alpha^*|\tilde{1}-, \Downarrow\rangle, \quad (5.47b)$$

et appliquer la même transformation à $|\tilde{2}-\rangle$:

$$|\tilde{2}-, \Downarrow'\rangle = \alpha|\tilde{2}-, \Uparrow\rangle + \beta|\tilde{2}-, \Downarrow\rangle \quad (5.48a)$$

$$|\tilde{2}-, \Uparrow'\rangle = -\beta|\tilde{2}-, \Uparrow\rangle + \alpha^*|\tilde{2}-, \Downarrow\rangle, \quad (5.48b)$$

où α et β sont données par les équations (5.28). Le champ électrique radio fréquence couple $|\tilde{1}-, \uparrow\rangle$ à $|\tilde{2}-, \uparrow\rangle$ et $|\tilde{1}-, \downarrow\rangle$ à $|\tilde{2}-, \downarrow\rangle$. Pour permettre des oscillations de Rabi, H_Z doit être capable de mélanger $|\tilde{2}-, \downarrow\rangle$ à $|\tilde{1}-, \uparrow\rangle$, et $|\tilde{2}-, \uparrow\rangle$ à $|\tilde{1}-, \downarrow\rangle$.

Quand il y a une composante b_z significative, $|\uparrow\rangle \approx |\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle \approx |\downarrow\rangle$ comme $|g_z| \gg |g_x|, |g_y|$ pour des trous lourds presque purs [éqs. (5.34)]. Ce grand $g_z \simeq 6\kappa$ est la signature de la forte séparation $\propto b_z$ entre les composantes $|\pm 3/2\rangle$ majoritaires de $|\tilde{1}-\rangle$. Le couplage $\langle \tilde{2}-, \downarrow | H_z | \tilde{1}-, \uparrow \rangle \propto b_+ \propto \sin \theta$ entre $|\tilde{1}-, \uparrow\rangle$ et $|\tilde{2}-, \downarrow\rangle$ résulte de l'interaction magnétique entre la composante $|\pm 3/2\rangle$ majoritaire d'un pseudo spin avec la composante $|\pm 1/2\rangle$ minoritaire de l'autre [éq. (5.35)].

Cependant, quand $b_z \simeq 0$, $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ deviennent des mélanges équilibrés des états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$. Dans ces conditions, la fréquence de Larmor montre un minimum et $|\tilde{2}-, \downarrow\rangle$ n'est plus couplé à $|\tilde{1}-, \uparrow\rangle$ par le champ magnétique, comme le montre la forme anti-diagonal de l'équation (5.35). En d'autres termes, l'effet Zeeman qui sépare les états $|\tilde{1}-\rangle$ et le couplage entre $|\tilde{1}-\rangle$ et $|\tilde{2}-\rangle$ sont maintenant créés par l'interaction $\propto b_{\pm}$ entre les enveloppes $|\pm 3/2\rangle$ et $|\pm 1/2\rangle$; puisque les états Zeeman définis par les équations (5.47) et (5.48) diagonalisent par bloc cette interaction (dans le sous espace $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$), H_Z ne peut donc plus mélanger les états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$. Cela donne lieu au creux $G(\theta)$ dans la dépendance de la fréquence de Rabi à l'angle φ apparaît à des ordres supérieurs en L_z , et provient des faibles anisotropies de confinement dans le plan (xy).

5.5 Effet de l'orientation et choix du matériau

Dans cette section, nous discutons l'impact de l'orientation de la boîte et du choix de matériaux sur la vitesse des oscillations de Rabi.

Comme montré par l'équation (5.40), et discuté dans la section précédente, la fréquence de Rabi (à un champ magnétique et électrique donnés) varie comme $\zeta_{[110]}$ [éq. (5.45)] dans la limite d'une couche mince. Ce paramètre caractérise donc la dépendance de la fréquence de Rabi au choix du matériaux de la boîte.

Il est aussi intéressant d'étudier d'autres orientations de la boîte quantique, en particulier $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$, $z \parallel [001]$ (la boîte est tournée de 45° autour de l'axe z). Dans cette orientation, les hamiltoniens Luttinger-Kohn et Zeeman sont inchangés sauf le terme R qui devient :

$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[-\gamma_2 \left(k_x^2 - k_y^2 \right) + 2i\gamma_3 k_x k_y \right], \quad (5.49)$$

où γ_2 et γ_3 sont donc interchangés par rapport à l'équation (5.3). Ainsi, $\gamma_3|\kappa|$ est simplement remplacé par $\gamma_2|\kappa|$ au numérateur des équations (5.39) et (5.40). La fréquence de Rabi de cette boîte varie ainsi comme :

$$\zeta_{[100]} = \frac{\gamma_2|\kappa|}{\gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)^2} = \frac{|\kappa|}{(\gamma_1 + \gamma_2)^2}. \quad (5.50)$$

Cette expression pour $\zeta_{[100]}$ souligne le fait que le couplage des trous lourds et légers par le confinement structural latéral est proportionnel à γ_2 dans cette orientation "[100]" plutôt que proportionnelle à γ_3 dans l'orientation [110]. Cela ne fait pas de grande différence dans les matériaux dont la bande de valence est presque isotrope comme pour le Ge ou les III-V (où $\gamma_3/\gamma_2 \simeq 1$), mais est décisif dans le Si (où $\gamma_3/\gamma_2 \simeq 5$). Pour illustrer les tendances matériaux, nous donnons $\zeta_{[110]}$ et $\zeta_{[100]}$ pour quelques semiconducteurs (Si, Ge et quelque III-V) dans la table 5.1.

En général, plus la bande interdite du semiconducteur en Γ est petite, plus les paramètres de Luttinger (γ_1 , γ_2 et γ_3) sont grands (faible masse des trous) et plus κ est grand. Ainsi ce grand κ compense l'effet néfaste du terme $(\gamma_1 + \gamma_2)^2$ présent au dénominateur de $\zeta_{[110]}$ et $\zeta_{[100]}$. Puisque $\gamma_3/\gamma_2 > 1$ pour tous les matériaux, un qubit de trou orienté [100] a toujours une fréquence de Rabi plus faible qu'un qubit de trou orienté [110].

Les qubits de silicium répondent plus faiblement au champ magnétique que les autres semiconducteurs conventionnels (petit $|\kappa|$). Mais les qubit de silicium orientés [110] tirent avantage de la forte anisotropie de la bande de valence ($\gamma_3 \gg \gamma_2$) [68], et montrent ainsi les oscillations de Rabi les plus rapides pour des champs électrique et magnétique donnés, malgré un faible couplage spin-orbite. En effet, comme discuté dans la section 5.4, les effets du couplage spin-orbite direct sont indépendants de la séparation Δ_{so} avec la bande de split off tant que les énergies de confinement restent très inférieures à Δ_{so} .

Cependant, une comparaison juste entre les matériaux devrait être plutôt faite à une même fréquence de Larmor $f_L \propto |\kappa|$ obtenue en ajustant l'amplitude du champ magnétique, car celle-ci impose les échelles de temps pour la dynamique intrinsèque du qubit et la circuiterie radio-fréquence. De plus, la comparaison est également plus juste à un même couplage électrique $\lambda \propto E_0(\gamma_1 + \gamma_2)^{-1}$ [éq. (5.33)] obtenu en ajustant le champ électrique statique E_0 . En effet les trous répondent plus fortement au champ électrique lorsque leur masse est élevée et atteignent donc la fréquence de Rabi optimale à un champ électrique $E_{\max}^{(0)} \propto (\gamma_1 + \gamma_2)$ plus faible [éq. (5.43)]. Nous introduisons donc,

$$\zeta' = \zeta \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{|\kappa|}, \quad (5.51)$$

c'est à dire $\zeta'_{[110]} = (\gamma_3/\gamma_2) \times 1/(\gamma_1 + \gamma_2)$ pour l'orientation [110] et $\zeta'_{[100]} = 1/(\gamma_1 + \gamma_2)$ pour l'orientation [100]. La table 5.1 donne $\zeta'_{[100]}$ et $\zeta'_{[110]}$ pour différents matériaux. Le silicium orienté [110] reste de loin le meilleur choix du matériaux pour faire de la *g*-TMR dans un qubit de trou. Nous avons vérifié que cette conclusion reste valide aussi bien quand nous résolvons le modèle dans une base convergée, que dans le cas du dispositif réel du chapitre 4. Les effets des contraintes et d'un qubit de trou légers sont discutés dans l'annexe G.

5.6 Conclusions

Pour conclure, nous avons étudié un modèle de boîte quantique rectangulaire dans un semiconducteur qui décrit un qubit spin-orbite de trou soumis à un champ électrique statique, un champ magnétique, et à un champ radio-fréquence permettant d'exciter des oscillations de Rabi. Nous avons établi les équations analytiques de la fréquence de Rabi dans un régime où les oscillations de Rabi résultent d'un couplage avec l'état fondamental du qubit et une paire d'états excités bien définie. Ces équations mettent en évidence la dépendance de la fréquence de Rabi avec les dimensions et l'orientation de cette boîte quantique, et les paramètres du matériau hôte. En particulier, nous montrons que, dans la limite d'une couche mince, une boîte orientée [110] sur un substrat (001) se comporte mieux qu'une boîte orientée [100], car elle prend l'avantage de l'anisotropie des bandes de valence. Ainsi, le silicium, qui montre la plus grande anisotropie de bandes de valence parmi les semiconducteurs conventionnels de type diamant ou zinc-blende, représente un choix optimal pour maximiser la fréquence de Rabi dans ce régime, malgré un faible couplage spin-orbite. Cette tendance mise en avant dans ce modèle simple a été vérifiée dans des dispositifs plus réalistes proches des dispositifs SOI étudiés dans le chapitre 4.

Chapitre 6

Interaction spin-phonon

Dans le chapitre 1, nous avons brièvement discuté le temps de relaxation d'un qubit. L'interaction d'un qubit spin-orbite avec un bain environnant de phonons peut assister la relaxation de ses états, et est donc un des mécanismes contribuant à la perte d'information. Dans ce chapitre nous allons discuter le temps de relaxation d'un qubit de trou via des processus d'émission ou d'absorption d'un phonon unique. Dans un premier temps, nous établissons l'expression du taux de relaxation à partir de la règle d'or de Fermi, puis nous l'appliquons au modèle $k \cdot p$ quatre ou six bandes en supposant la structure de bandes des phonons isotrope. Ensuite nous considérons le qubit spin-orbite dans le dispositif SOI présenté au chapitre 4, et nous discutons la dépendance électrique et magnétique du temps de relaxation T_1 et l'optimisation du facteur de qualité (nombre d'oscillations de Rabi pendant un temps de relaxation T_1).

6.1 Temps de relaxation assisté par des phonons

Les atomes d'un cristal peuvent vibrer ce qui crée des ondes élastiques. Les énergies de ces ondes sont quantifiées et sont associées à des quasiparticules appelées phonons. Nous rappelons brièvement la structure de bandes des phonons.

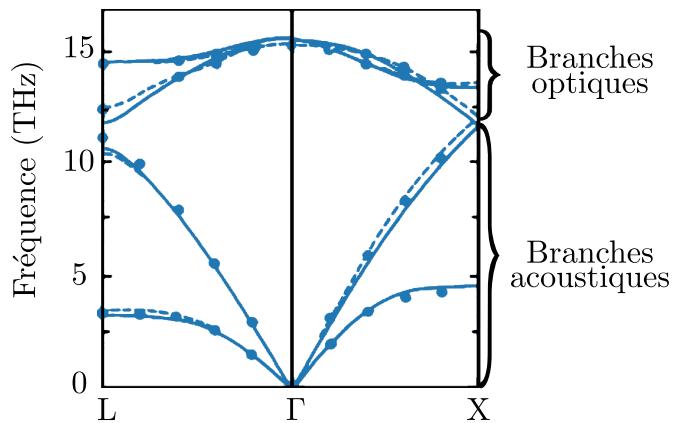


FIGURE 6.1 – Structure de bandes des phonons du silicium le long du chemin $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X$ dans la première zone de Brillouin. Les traits pleins et les pointillés correspondent à deux méthodes de calculs. Les cercles représentent des données expérimentales. Adapté des références [72, 73].

De manière similaire à la structure de bandes électronique d'un semiconducteur, les énergies de bandes $\hbar\omega_{\alpha q}$ des phonons sont caractérisées par un vecteur d'onde q et un indice de bandes α . La structure de bandes des phonons d'un matériau semiconducteur se compose typiquement de bandes acoustiques [$\omega(q = 0) = 0$] et de bandes optiques [$\omega(q = 0) \neq 0$]. Les bandes acoustiques dans un semiconducteur massif décrivent la propagation du son par des déformations de la maille du cristal tandis que les branches optiques décrivent plutôt des déplacements relatifs d'atomes au sein d'une

maille. Chacune de ces branches peut être polarisée longitudinalement ou transversalement par rapport au vecteur d'onde \mathbf{q} . La figure 6.1 représente la structure de bandes des phonons du silicium.

Comme discuté dans la sous-section suivante, les phonons responsables de la relaxation des états du qubit ont pour énergie la fréquence de Larmor ($\hbar\omega_L$). Cette fréquence dans les qubits de spin (ou spin-orbite) est typiquement ≤ 40 GHz. Ainsi, d'après la structure de bandes des phonons du silicium représentée dans la figure 6.1, il est clair que seules les branches acoustiques contiennent des phonons dans cette gamme d'énergie. Par conséquent, dans tout ce chapitre, nous ne considérons que les branches de phonons acoustiques. Celle-ci se composent d'une branche longitudinale caractérisée par une vitesse de groupe $v_l = \nabla_{\mathbf{q}}\omega$ et de deux branches transversales de vitesse de groupe v_{t_1} et v_{t_2} qui, de manière générale, dépendent légèrement de l'orientation du vecteur d'onde \mathbf{q} , et v_{t_1} est proche de v_{t_2} .

Les phonons acoustiques peuvent être caractérisés par les déformations du réseau. Chaque point \mathbf{r} du réseau se transforme sous l'effet des phonons en :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \hat{\mathbf{e}}\mathbf{r}, \quad (6.1)$$

où $\hat{e}_{ij} = \partial u_i / \partial r_j$ où $i, j \in \{x, y, z\}$, et $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ est le champ de déplacement des phonons. En l'absence de rotation du cristal, nous pouvons introduire le tenseur symétrique des déformations $\hat{\varepsilon} \equiv (\hat{\mathbf{e}} + {}^t\hat{\mathbf{e}})/2$ [72, 74] :

$$\hat{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right). \quad (6.2)$$

Ce tenseur des déformations $\hat{\varepsilon}$ caractérise alors complètement les déformations du cristal.

Par la suite, nous¹ allons établir le taux de relaxation d'un qubit assisté par des phonons. Après avoir exprimé de façon générique le taux de relaxation du aux processus à un phonon, nous établissons son expression pour des bandes isotropes de phonons. Finalement, nous calculons le temps de relaxation pour un qubit de trou dont la structure électronique est décrite par une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre ou six bandes.

6.1.1 Expression générale

Nous considérons un qubit basé sur deux états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ d'un hamiltonien H_0 , ayant pour énergies E_0 et E_1 respectivement. Ce qubit interagit avec le bain thermique des phonons acoustiques d'énergies $\hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}$ où α est un indice de branches et \mathbf{q} un vecteur d'onde. Nous supposons le qubit et les phonons couplés par l'hamiltonien $H_{int}[\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})]$ dépendant linéairement des déformations locales $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ ($i, j \in \{x, y, z\}$). L'opérateur du champ de déplacement d'un phonon de la branche α et de vecteur d'onde \mathbf{q} s'écrit :

$$\mathbf{u}_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t) = A_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{c}}_{\alpha\mathbf{q}}, \quad (6.3)$$

où $\hat{\mathbf{c}}_{\alpha\mathbf{q}}$ est le vecteur unitaire de polarisation du phonon et :

$$A_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{\alpha\mathbf{q}}}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (a_{\alpha\mathbf{q}} e^{-i\omega_{\alpha\mathbf{q}}t} + a_{\alpha,-\mathbf{q}}^\dagger e^{i\omega_{\alpha\mathbf{q}}t}), \quad (6.4)$$

avec ρ la masse volumique du matériau hôte ($\rho = 2.329$ g/cm³ pour le silicium), Ω le volume du système, et $a_{\alpha\mathbf{q}}^\dagger$ (respectivement $a_{\alpha\mathbf{q}}$) l'opérateur de création (respectivement d'annihilation) d'un phonon de la branche α et de vecteur d'onde \mathbf{q} . Le tenseur des déformations (6.2) est ainsi :

$$\varepsilon_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t) = iqA_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t)\epsilon_{\alpha\mathbf{q}}, \quad (6.5)$$

avec $q = ||\mathbf{q}||$ où :

$$\epsilon_{\alpha\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\hat{c}_x\hat{q}_x & \hat{c}_x\hat{q}_y + \hat{c}_y\hat{q}_x & \hat{c}_x\hat{q}_z + \hat{c}_z\hat{q}_x \\ \hat{c}_y\hat{q}_x + \hat{c}_x\hat{q}_y & 2\hat{c}_y\hat{q}_y & \hat{c}_y\hat{q}_z + \hat{c}_z\hat{q}_y \\ \hat{c}_z\hat{q}_x + \hat{c}_x\hat{q}_z & \hat{c}_z\hat{q}_y + \hat{c}_y\hat{q}_z & 2\hat{c}_z\hat{q}_z \end{bmatrix}, \quad (6.6)$$

1. Les formules du temps de relaxation de la section 6.1 ont été établies par Jing Li qui était un post-doctorant du laboratoire. J'ai contribué à leur application dans l'étude de l'interaction spin-phonon dans le qubit de trou.

avec $\hat{\mathbf{c}} \equiv \hat{\mathbf{c}}_{\alpha\mathbf{q}}$, et $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$.

En supposant $\hbar\omega_L = E_1 - E_0 > 0$, le taux de transition Γ_{01} de l'état $|0\rangle$ vers l'état $|1\rangle$ du à l'absorption d'un phonon est donné par la règle d'or de Fermi [75, 76, 77] :

$$\Gamma_{01} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \int d^3\mathbf{q} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} N_{\alpha\mathbf{q}} \left| \langle 0 | H_{int}[\varepsilon_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r})] | 1 \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega_L - \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}). \quad (6.7)$$

Cette équation somme les contributions de toutes les branches de phonons et vecteurs d'onde possibles. La contribution de la branche α et du vecteur d'onde \mathbf{q} est proportionnelle à la norme carrée de l'élément de matrice $\langle 0 | H_{int}[\varepsilon_{\alpha\mathbf{q}}(\mathbf{r})] | 1 \rangle$. L'énergie totale du système qubit-phonon doit cependant être conservée, ce qui fait apparaître le terme $\delta(\hbar\omega_L - \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}})$. Finalement l'occupation des états des phonons est introduite via la fonction de distribution de Bose-Einstein $N_{\alpha\mathbf{q}} = 1/(e^{\beta\hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}} - 1)$ où $\beta = 1/(k_B T)$. De plus, le taux de transition (6.7) ne prend en compte que les processus à un phonon, et n'est donc valable qu'à température suffisamment faible.

De manière similaire, le taux de transition Γ_{10} de l'état $|1\rangle$ vers l'état $|0\rangle$ du à l'émission spontanée et stimulée d'un phonon est donné par la même expression avec $N_{\alpha\mathbf{q}}$ remplacé par $N_{\alpha\mathbf{q}} + 1$.

Par conséquent, le taux de relaxation total est $\Gamma_{ph} = \Gamma_{01} + \Gamma_{10}$. En substituant l'équation (6.5) dans les expressions de Γ_{01} [éq. (6.7)] et Γ_{10} , le taux de relaxation Γ_{ph} s'écrit :

$$\Gamma_{ph} = \frac{1}{8\pi^2\rho} \sum_{\alpha} \int d^3\mathbf{q} \coth\left(\frac{\hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}}{2k_B T}\right) \frac{q^2}{\omega_{\alpha\mathbf{q}}} \left| \langle 0 | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} H_{int}(\epsilon_{\alpha\mathbf{q}}) | 1 \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega_L - \hbar\omega_{\alpha\mathbf{q}}), \quad (6.8)$$

Cette équation peut être transformée en :

$$\Gamma_{ph} = \frac{1}{8\pi^2\rho\hbar\omega_L} \coth\left(\frac{\hbar\omega_L}{2k_B T}\right) \sum_{\alpha} \int_{S_{\alpha}(\omega_L)} d^2\mathbf{q} \frac{q^2}{|\mathbf{v}_{\alpha\mathbf{q}}|} \left| \langle 0 | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} H_{int}(\epsilon_{\alpha\mathbf{q}}) | 1 \rangle \right|^2, \quad (6.9)$$

où $S_{\alpha}(\omega_L)$ est la surface $\omega_{\alpha\mathbf{q}} = \omega_L$ et $\mathbf{v}_{\alpha\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{q}}\omega_{\alpha\mathbf{q}}$ est la vitesse de groupe des phonons. L'intégration peut être finalisée lorsqu'un modèle est choisi pour la structure de bandes des phonons et la structure électronique du qubit, ce que nous allons faire par la suite.

6.1.2 Structure de bandes isotropes des phonons

Les vecteurs d'onde \mathbf{q} des phonons acoustiques participant à la relaxation du qubit ont de faibles amplitudes. Dans ces conditions, les branches de phonons acoustiques sont linéaires avec l'amplitude du vecteur d'onde \mathbf{q} . Nous considérons ainsi un modèle simplifié de trois branches acoustiques isotropes et linéaires en $q = |\mathbf{q}|$ pour la structure des phonons : une branche longitudinale (LA) $\omega_{l\mathbf{q}} = v_l q$ et deux branches transversales dégénérées (TA) $\omega_{t1\mathbf{q}} \simeq \omega_{t2\mathbf{q}} = v_t q$.

Pour finaliser l'intégration (6.9), nous spécifions l'orientation du vecteur d'onde des phonons par l'angle azimutal θ et l'angle polaire φ tel que $\hat{\mathbf{q}} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$. Le vecteur de polarisation de la branche LA $\hat{\mathbf{c}}_l = \hat{\mathbf{q}}$ peut, ainsi, être caractérisé par les angles ($\theta_l = \theta, \varphi_l = \varphi$), tandis que les vecteurs de polarisations $\hat{\mathbf{c}}_{t1}$ et $\hat{\mathbf{c}}_{t2}$ des branches TA peuvent être caractérisés par les angles ($\theta_{t1} = \theta + \pi/2, \varphi_{t1} = \varphi$) et ($\theta_{t2} = \pi/2, \varphi_{t2} = \varphi + \pi/2$) respectivement. Donc,

$$\Gamma_{ph} = \frac{\omega_L^3}{8\pi^2\hbar\rho} \coth\left(\frac{\hbar\omega_L}{2k_B T}\right) \sum_{\alpha \in l, t_1, t_2} \frac{1}{v_{\alpha}^5} \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left| \langle 0 | e^{iq_{\alpha}\hat{\mathbf{q}}(\theta, \varphi)\cdot\mathbf{r}} H_{int}[\epsilon_{\alpha}(\theta, \varphi)] | 1 \rangle \right|^2, \quad (6.10)$$

où $v_{\alpha}q_{\alpha} = \omega_L$, et :

$$\epsilon_l(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\sin^2\theta\cos^2\varphi & \sin^2\theta\sin 2\varphi & \sin 2\theta\cos\varphi \\ \sin^2\theta\sin 2\varphi & 2\sin^2\theta\sin^2\varphi & \sin 2\theta\sin\varphi \\ \sin 2\theta\cos\varphi & \sin 2\theta\sin\varphi & 2\cos^2\theta \end{bmatrix} \quad (6.11a)$$

$$\epsilon_{t_1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sin 2\theta \cos^2 \varphi & \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin 2\varphi & \cos 2\theta \cos \varphi \\ \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin 2\varphi & \sin 2\theta \sin^2 \varphi & \cos 2\theta \sin \varphi \\ \cos 2\theta \cos \varphi & \cos 2\theta \sin \varphi & -\sin 2\theta \end{bmatrix} \quad (6.11b)$$

$$\epsilon_{t_2}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\sin \theta \sin 2\varphi & \sin \theta \cos 2\varphi & -\cos \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos 2\varphi & \sin \theta \sin 2\varphi & \cos \theta \cos \varphi \\ -\cos \theta \sin \varphi & \cos \theta \cos \varphi & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.11c)$$

Dans la section suivante, nous allons discuter un qubit de trou dont la structure électronique est décrite par un modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes.

6.1.3 Application à une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes

Dans le modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes, les fonctions d'onde de trous se développent sous la forme (voir chapitre 2) :

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) = & F_{X\uparrow}(\mathbf{r})u_{X\uparrow}(\mathbf{r}) + F_{X\downarrow}(\mathbf{r})u_{X\downarrow}(\mathbf{r}) \\ & + F_{Y\uparrow}(\mathbf{r})u_{Y\uparrow}(\mathbf{r}) + F_{Y\downarrow}(\mathbf{r})u_{Y\downarrow}(\mathbf{r}), \\ & + F_{Z\uparrow}(\mathbf{r})u_{Z\uparrow}(\mathbf{r}) + F_{Z\downarrow}(\mathbf{r})u_{Z\downarrow}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (6.12)$$

où $\{F_{i\sigma}\}$ sont les fonctions enveloppes et $\{u_{i\sigma}\}$ sont les fonctions de Bloch au point Γ . Ces fonctions de Bloch sont des combinaisons linéaire des orbitales p_X , p_Y et p_Z du silicium, de spin \uparrow ou \downarrow selon l'axe Z, où $\mathbf{X} \parallel [100]$, $\mathbf{Y} \parallel [010]$ et $\mathbf{Z} \parallel [001]$ sont les axes de la maille conventionnelle du cristal. En fait, tout modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes ou quatre bandes pour les trous peut se mettre sous la forme de l'équation (6.12) (voir chapitre 2 par exemple). Dans la base $\{|X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle\}$, l'hamiltonien $H_{int}(\varepsilon)$ est [26, 78, 79] :

$$H_{int}(\varepsilon) = \begin{bmatrix} H'_{int}(\varepsilon) & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & \Delta H'_{int}(\varepsilon) \end{bmatrix}, \quad (6.13)$$

où les blocs 3×3 de spin \uparrow ou \downarrow $H'_{int}(\varepsilon)$ s'écrivent :

$$H'_{int}(\varepsilon) = \begin{bmatrix} l\varepsilon_{XX} + m(\varepsilon_{YY} + \varepsilon_{ZZ}) & n\varepsilon_{XY} & n\varepsilon_{XZ} \\ n\varepsilon_{XY} & l\varepsilon_{YY} + m(\varepsilon_{ZZ} + \varepsilon_{XX}) & n\varepsilon_{YZ} \\ n\varepsilon_{XZ} & n\varepsilon_{YZ} & l\varepsilon_{ZZ} + m(\varepsilon_{XX} + \varepsilon_{YY}) \end{bmatrix} \quad (6.14)$$

avec :

$$l = a_v + 2b_v; \quad m = a_v - b_v; \quad n = d_v\sqrt{3}. \quad (6.15)$$

a_v est le potentiel de déformation hydrostatique, b_v le potentiel de déformation uniaxial, et d_v le potentiel de cisaillement de la bande de valence². Même si H_{int} est diagonal en spin, il peut entraîner, par exemple, la relaxation d'un qubit spin-orbite ayant des états de spin texturé. Nous écrivons ensuite les deux états du qubit :

$$\langle \mathbf{r} | \emptyset \rangle = \sum_{i \in \{X, Y, Z\}} \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} a_{i\sigma}(\mathbf{r}) u_{i\sigma}(\mathbf{r}) \quad (6.16a)$$

$$\langle \mathbf{r} | \mathbb{1} \rangle = \sum_{i \in \{X, Y, Z\}} \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} b_{i\sigma}(\mathbf{r}) u_{i\sigma}(\mathbf{r}), \quad (6.16b)$$

et supposons que l'étendue des fonctions enveloppes $\{a_{i\sigma}(\mathbf{r})\}$ et $\{b_{i\sigma}(\mathbf{r})\}$ est bien plus petite que la longueur d'onde caractéristique des phonons à la fréquence de Larmor. Nous pouvons alors finaliser l'intégration (6.10) en approximant le facteur de phase $e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \sim 1$. Une analyse a montré que les termes

2. Nous avons négligé la dépendance en contrainte du couplage spin-orbite Δ_{so} qui est faible dans le silicium.

d'ordres supérieurs à cette approximation ne sont pas pertinents dans la suite de notre travail. Ainsi, l'élément de matrice (6.10) peut être développé de la façon suivante :

$$\left| \langle \emptyset | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} H_{int}(\epsilon_\alpha) | \mathbb{1} \rangle \right|^2 \approx \left| \langle \emptyset | H_{int}(\epsilon_\alpha) | \mathbb{1} \rangle \right|^2 = \sum_{i,j,k,l} H_{ij} H_{kl} S_{ij} S_{kl}^* \quad (6.17)$$

où $H_{ij} = H_{ij}(\epsilon_\alpha) \equiv [H'_{int}]_{ij}$, les indices i, j, k, l parcourrent $\{X, Y, Z\}$, et :

$$S_{ij} = \int d^3\mathbf{r} [a_{i\uparrow}^*(\mathbf{r}) b_{j\uparrow}(\mathbf{r}) + a_{i\downarrow}^*(\mathbf{r}) b_{j\downarrow}(\mathbf{r})] . \quad (6.18)$$

Par conséquent, après intégrations, le taux de relaxation s'écrit :

$$\Gamma_{ph} = \frac{\omega_L^3}{8\pi\hbar\rho} \coth\left(\frac{\hbar\omega_L}{2k_B T}\right) \sum_{\alpha=l,t} \frac{1}{v_\alpha^5} \sum_{n=1}^2 B_n \Lambda_{n\alpha} , \quad (6.19)$$

où les deux termes $\{B_n\}$ sont définis par :

$$B_1 = \sum_i |S_{ii}|^2 \quad (6.20a)$$

$$B_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} |S_{ij} + S_{ji}|^2 , \quad (6.20b)$$

et les paramètres de la branche longitudinale $\{\Lambda_{nl}\}$ et des deux branches transverses $\{\Lambda_{nt}\}$ sont :

$$\begin{aligned} \Lambda_{1l} &= \frac{24b^2}{5} , \quad \Lambda_{2l} = \frac{4d^2}{5} \\ \Lambda_{1t} &= \frac{3}{2} \Lambda_{1l} , \quad \Lambda_{2t} = \frac{3}{2} \Lambda_{2l} \end{aligned} . \quad (6.21)$$

Les deux branches transversales (TA1 et TA2) ont été sommées dans les paramètres $\{\Lambda_{nt}\}$. Les deux termes $\{B_n\}$ décrivent un mélange de bandes dont le préfacteur varie avec les déformations des phonons ($\propto q^2/\omega_L \equiv \omega_L$) et la densité d'état des phonons à la fréquence de Larmor ($\propto \omega_L^2$). Ils sont gouvernés par le recouvrement des différentes fonctions enveloppes. Nous notons que les termes $\{B_n\}$ sont aussi dépendants de ω_L au moins à l'ordre deux. En effet, sans champ magnétique extérieur, les deux états du qubit sont symétriques par renversement du temps et $a_{i\uparrow}^* = b_{j\downarrow}$, $a_{i\downarrow}^* = -b_{i\uparrow}$ [$i \in \{X, Y, Z\}$]. À partir de l'expression des éléments $\{S_{ij}\}$ [éq. (6.18)], ces conditions imposent $S_{ij} = -S_{ji}$, et, en particulier, $S_{ii} = 0$. Ainsi B_1 et B_2 sont nuls à champ magnétique nul et $S_{ii} = \mathcal{O}(B)$, $S_{ij} + S_{ji} = \mathcal{O}(B)$, et $B_1 = \mathcal{O}(B^2)$, $B_2 = \mathcal{O}(B^2)$.

6.2 Application à un qubit spin-orbite de trou sur SOI

Dans cette section, nous appliquons les modèles introduits dans la section 6.1 à un qubit spin-orbite de trou sur SOI représenté sur la figure 6.2. Le dispositif est similaire à celui mesuré dans le chapitre 3, et est identique à celui modélisé dans le chapitre 4. Comme discuté dans les chapitres 2 et 4, le potentiel électrique dans le dispositif est calculé en résolvant l'équation de Poisson par une méthode de volumes finis. Les états du qubits de trou sont obtenus à partir d'un modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes avec une méthode de différences finies. Les angles azimutal θ et polaire φ caractérisant l'orientation du champ magnétique sont représentés dans la figure 6.2.

Pour le modèle de la structure de bandes des phonons, nous utilisons les vitesses de groupes $v_l = 9000 \text{ m/s}$ et $v_t = 5400 \text{ m/s}$. Les potentiels de déformations des bandes de valence sont $a_v = 2.38 \text{ eV}$, $b_v = -2.1 \text{ eV}$, et $d_v = -4.85 \text{ eV}$ [80, 81]. L'amplitude du champ magnétique est ajustée (sauf indication

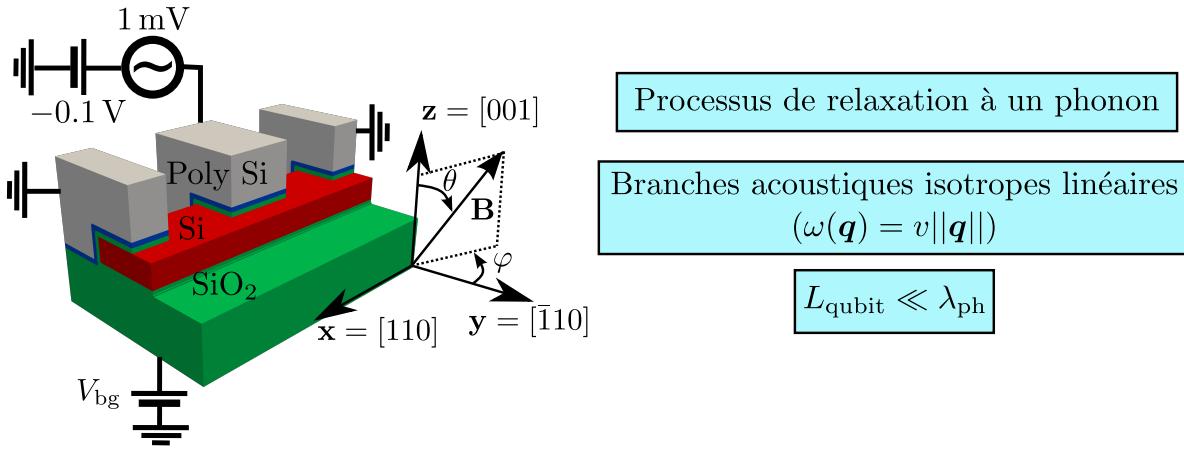


FIGURE 6.2 – Représentation schématique du dispositif identique à celui étudié au chapitre 4 avec les principales hypothèses du modèle de relaxation assisté par les phonons : processus à un phonon, branches acoustiques isotropes linéaires, longueur caractéristique du qubit L_{qubit} beaucoup plus faible que la longueur caractéristique des phonons λ_{ph} . La grille avant est polarisée à $V_{\text{fg}} = -0.1 \text{ V}$, et une modulation d'amplitude $V_{\text{ac}} = 1 \text{ mV}$ peut être appliquée pour entretenir des oscillations de Rabi. La tension de grille arrière est V_{bg} .

contraire) de sorte que la fréquence de Larmor soit $\omega_L/(2\pi) = 10 \text{ GHz}$. À cette fréquence, la longueur d'onde des phonons acoustiques λ_{ph} est plus grande que $\lambda_t = 2\pi v_t/\omega_L = 540 \text{ nm}$, et est donc plus grande que la taille de la boîte quantique ($L_{\text{qubit}} \sim 30 \text{ nm}$), dans le domaine de validité de l'approximation $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sim e^{iL_{\text{qubit}}/\lambda_{\text{ph}}} \sim 1$. La température est fixée à $T = 100 \text{ mK}$. Les résultats sont, cependant, faiblement dépendants de la température $T \leq 100 \text{ mK}$, comme $1 < \coth(\hbar\omega_L/2k_B T) < 1.017$ dans cette intervalle.

Nous discutons l'effet de la fréquence de Larmor sur le taux de relaxation, de l'importance relative des termes de l'équation (6.19), de la dépendance de Γ_{ph} avec le champ électrique, et enfin du point optimal en polarisation électrique et en orientation du champ magnétique pour ce qubit.

6.2.1 Effet de la fréquence de Larmor

La figure 6.3 représente le taux de relaxation en fonction de la fréquence de Larmor du qubit. Le taux de relaxation est $\propto \omega_L^4$ à faible fréquence de Larmor et $\propto \omega_L^5$ à forte fréquence de Larmor. Le comportement $\propto \omega_L^5$ est le résultat du préfacteur $\propto \omega_L^3$ des termes $\{B_n\}$ (déformations des phonons et densité d'état) et de la dépendance $\propto \omega_L^2$ des termes $\{B_n\}$ eux-mêmes, comme discuté précédemment. En effet, les termes $\{B_n\}$ s'annulent à champ magnétique nul quand $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont des états symétriques par renversement du temps l'un de l'autre, et augmentent comme $\omega_L^2 \propto B^2$ une fois qu'un champ magnétique B fini brise la symétrie de renversement du temps. À champ magnétique faible, le taux de relaxation s'éloigne de la dépendance $\propto \omega_L^5$ à cause du préfacteur $\coth[\hbar\omega_L/(2k_B T)] \propto \omega_L^{-1}$. En effet, la population de phonons acoustiques à faible fréquence de Larmor peut être très importante ce qui accroît les processus d'absorption ou d'émission stimulée.

6.2.2 Termes dominants

Pour identifier les différentes contributions au taux de relaxation Γ_{ph} , celui-ci est tracé en fonction de la fréquence de Larmor ω_L du qubit dans la figure 6.4 à $V_{\text{bg}} = -0.15 \text{ V}$ et est décomposé (a) en contributions LA et TA, et (b) en contributions b_v et d_v .

La figure 6.4 a) montre que les phonons transverses dominent le taux de relaxation par un facteur ~ 10 par rapport aux phonons longitudinaux. En fait, le rapport de ces contributions est principalement défini par le rapport de leur vitesse de groupe parce que le taux de relaxation (6.19) contient un préfacteur

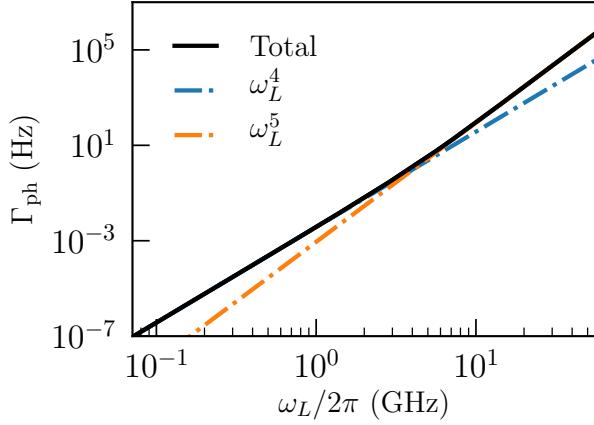


FIGURE 6.3 – Taux de relaxation en fonction de la fréquence de Larmor [$\omega_L/(2\pi)$] à $V_{bg} = -0.15$ V. L’orientation du champ magnétique est $\theta = 45^\circ$, $\varphi = 0$.

$\propto 1/v_\alpha^5$ pour les contributions de la branche α . Dans le silicium, les polarisations transverses impactent ainsi plus fortement le taux de relaxation que la polarisation longitudinale d’un facteur $(v_l/v_t)^5 \sim 13$.

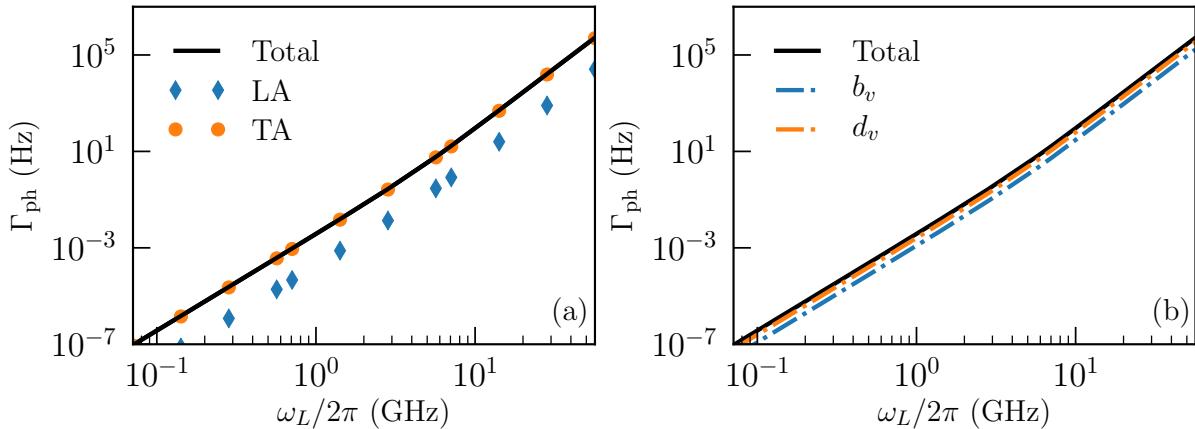


FIGURE 6.4 – Contributions des différents termes de l’équation (6.19) au taux de relaxation en fonction de la fréquence de Larmor ω_L ($V_{bg} = -0.15$ V) qui est dominé par (a) les phonons acoustiques transverses, et (b) le potentiel de cisaillement d_v . L’orientation du champ magnétique est $\theta = 45^\circ$, $\varphi = 0$.

Les contributions des potentiels b_v et d_v au taux de relaxation (6.19) représentés dans la figure 6.4 b), sont similaires, bien que le potentiel de cisaillement d_v semble légèrement dominer. Finalement, le terme $B_2\Lambda_{2t} \propto d^2$ de l’équation (6.19) est la plus grande contribution au taux de relaxation, suivie par le terme $B_1\Lambda_{1t} \propto b^2$.

Nous avons vérifié que les conclusions discutées ci-dessus restent valables sur un grand intervalle de tensions de grille arrière comme la figure 6.5 peut l’attester. Nous discutons en détails de la dépendance de Γ_{ph} avec V_{bg} dans la section suivante.

6.2.3 Effet du champ électrique

Le taux de relaxation Γ_{ph} est tracé avec la fréquence de Rabi f_R en fonction de V_{bg} dans la figure 6.6. Les oscillations de Rabi sont entraînées par une modulation radio-fréquence $V_{ac} = 1$ mV sur la grille avant. Le facteur de qualité $Q_1 = f_R/\Gamma_{ph}$ est aussi tracé sur cette figure. Il donne le nombre d’oscillations de Rabi pouvant être effectué pendant un temps de relaxation $T_1 = \Gamma_{ph}^{-1}$. La prise en compte exclusive des phonons dans cette étude fournit une limite haute du facteur de qualité du qubit.

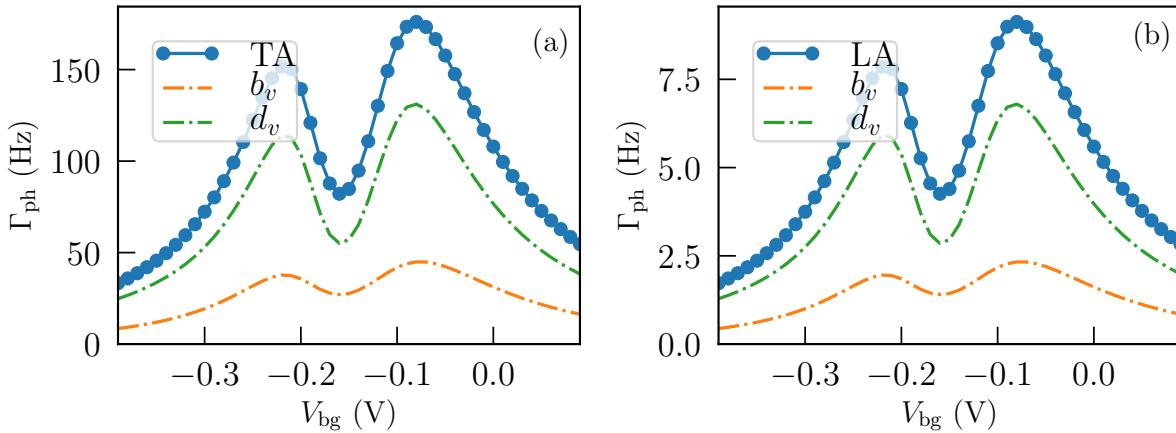


FIGURE 6.5 – Dépendance du taux de relaxation en fonction de la tension de grille arrière V_{bg} à fréquence de Larmor $\omega_L/(2\pi) = 10 \text{ GHz}$, assisté par des phonons acoustiques a) transversaux (TA), et b) longitudinaux (LA). Chacune des polarisations est décomposée en contributions b_v et d_v . L'orientation du champ magnétique est $\theta = 45^\circ, \varphi = 0^\circ$.

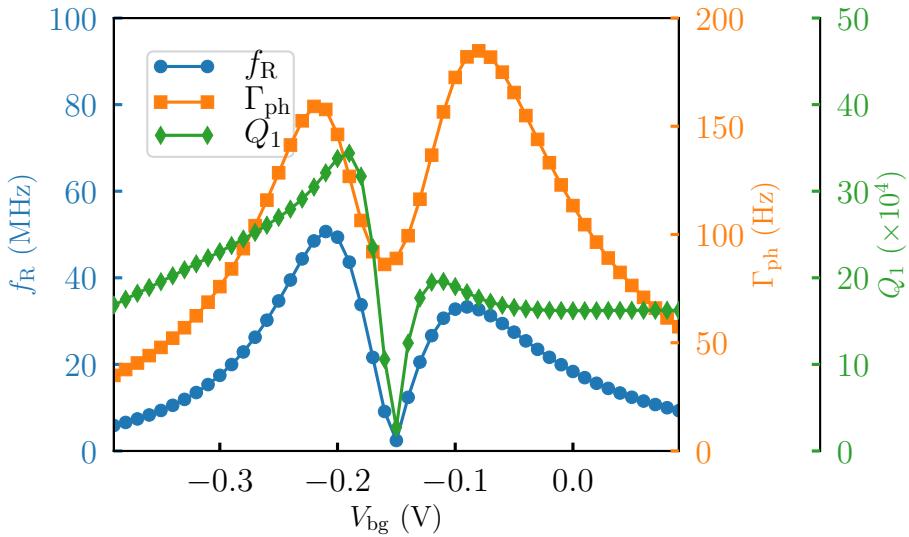


FIGURE 6.6 – Fréquence de Rabi f_R , taux de relaxation Γ_{ph} , et facteur de qualité $Q_1 = f_R/\Gamma_{\text{ph}}$ en fonction de V_{bg} . La fréquence de Larmor est $\omega_L/(2\pi) = 10 \text{ GHz}$. L'orientation du champ magnétique est $\theta = 45^\circ, \varphi = 0$.

Le taux de relaxation montre des variations en fonction de V_{bg} qui imitent celles de la fréquence de Rabi. En particulier, Γ_{ph} affiche un creux près de $V_{\text{bg}} = -0.15 \text{ V}$ où la fonction d'onde du trou présente un centre d'inversion approché (voir chapitre 4). Cela entrave l'action du couplage spin-orbite et découple les trous du champ électrique radio-fréquence de la grille. Les oscillations de Rabi sont ainsi ralenties mais les trous deviennent aussi découplés des bruits électriques à ce point. Le creux dans Γ_{ph} n'est cependant pas aussi prononcé que celui de la fréquence de Rabi. Nous discuterons ce point dans la sous-section suivante. La diminution du taux de relaxation à grandes tensions de grille positives ou négatives est due au fort confinement latéral par le champ électrique statique de la grille (voir chapitre 4). Même si le temps de vie est plus long à grand $|V_{\text{bg}}|$, la fréquence de Rabi est plus petite, ce qui diminue légèrement le facteur de qualité. Le facteur de qualité est maximal près de $V_{\text{bg}} = -0.2 \text{ V}$. Finalement, le qubit peut être ramené au point $V_{\text{bg}} = -0.15 \text{ V}$ entre les manipulations car le temps de vie y est long ($\sim 10 \text{ ms}$) [62, 82].

Les temps de vie limités par les phonons sont typiquement plus petits qu'attendu dans les qubits d'électron [36, 77, 83] (mais restent > 5 ms), à cause au fort couplage spin-orbite dans les bandes de valence. Cela est cependant compensé par de bien plus grandes fréquences de Rabi, si bien que les facteurs de qualité restent significatifs.

6.2.4 Effet de l'orientation du champ magnétique

Nous avons vu dans le chapitre 4 que la fréquence de Rabi dépend fortement de l'orientation du champ magnétique. C'est aussi le cas du taux de relaxation Γ_{ph} et du facteur de qualité. La figure 6.7 représente ces trois grandeurs physiques en fonction de l'orientation du champ magnétique à fréquence de Larmor $\omega_L/(2\pi) = 10$ GHz, et à $V_{\text{bg}} = -0.2$ V. L'anisotropie de la fréquence de Rabi a été discutée dans les chapitres 4 et 5. Le taux de relaxation est maximal près de $\theta = \pi/2$. Ainsi, le facteur de qualité est faible près de $\theta = \pi/2$. Le facteur Q_1 est néanmoins important dans un grand intervalle de θ et est faiblement dépendant de φ . En particulier, il montre un pic près de $\theta = 30^\circ$ et $\theta = 150^\circ$ de l'ordre de quelque dizaines de milliers, près de l'orientation de référence choisie pour les figures 6.3, 6.4, et 6.5.

Pour comprendre les tendances observées, nous construisons un modèle simple similaire à celui établi dans le chapitre 5.

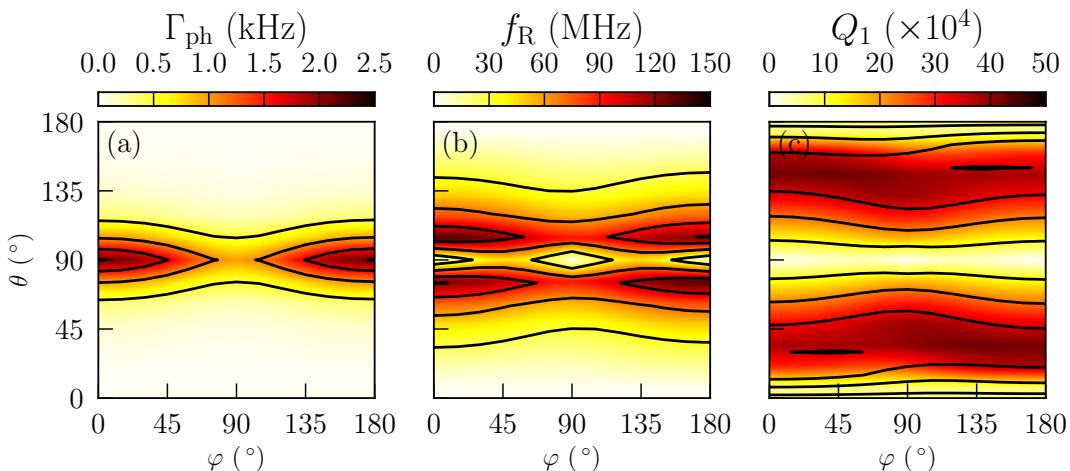


FIGURE 6.7 – (a) Taux de relaxation Γ_{ph} , (b) fréquence de Rabi f_R , et (c) facteur de qualité $Q_1 = f_R/\Gamma_{\text{ph}}$ en fonction de l'orientation du champ magnétique caractérisée par les angles azimutal θ et polaire φ définis dans la figure 6.2, à $V_{\text{bg}} = -0.2$ V. La fréquence de Larmor est $\omega_L/(2\pi) = 10$ GHz dans toutes les figures. Nous remarquons que la carte (b) semble différente de la figure 4.7 parce qu'elle est tracée à fréquence de Larmor constante au lieu d'une amplitude de champ magnétique constante.

6.2.5 Retour sur le modèle de la boîte quantique

Dans cette section, nous reprenons le modèle de la boîte quantique rectangulaire de silicium de taille $L_x \times L_y \times L_z$ étudié au chapitre 5. Nous supposons que le champ électrique extérieur \mathbf{E} est nul. Nous utilisons un modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes pour décrire les bandes de valence. Ce modèle décrit donc le voisinage du point $V_{\text{bg}} = -0.15$ V. Il est ainsi pertinent de travailler dans une base minimale dont les fonctions enveloppes sont de type $s \equiv |111\rangle$ (voir la section 5.1.2). Par souci de simplicité, nous supprimons les indices des enveloppes, et notons la base minimale $\{|j_z\rangle \equiv |111\rangle \otimes |j_z\rangle\}$ où $j_z \in \{\pm 3/2, \pm 1/2\}$. Ensuite, l'hamiltonien $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes dans cette base minimale $\{|+3/2\rangle, |+1/2\rangle, |-1/2\rangle, |-3/2\rangle\}$ peut être diagonalisé exactement mais, pour souligner les tendances, nous considérons une limite de couche mince suivant l'axe z, et nous négligeons dans un premier temps l'effet du confinement latéral.

Les états propres de la boîte quantique sont alors une paire de Kramers fondamentale pure trous lourds ($|\pm 3/2\rangle$), et une paire excitée pure trous légers ($|\pm 1/2\rangle$).

Nous définissons les états du qubit à partir de la paire de Kramers fondamentale. Le potentiel vecteur n'a pas d'effet dans cette base minimale et nous prenons donc en compte seulement l'effet Zeeman. Les deux états $|\pm 3/2\rangle$ ne sont pas couplés par l'hamiltonien Zeeman, et selon la théorie de perturbation de niveaux non dégénérés, nous pouvons écrire les états propres du qubit $\{|\mathbb{1}_1\rangle, |\mathbb{0}_1\rangle\}$ à l'ordre un en champ magnétique :

$$|\mathbb{0}_1\rangle = |+3/2\rangle + Z_0|+1/2\rangle \quad (6.22a)$$

$$|\mathbb{1}_1\rangle = Z_0^*|-1/2\rangle + |-3/2\rangle \quad (6.22b)$$

où $Z_0 = \kappa\mu_B B\sqrt{3}(b_x + ib_y)/(2Q_0)$ est le rapport de l'élément de couplage magnétique entre les trous lourds et trous légers et leur séparation en énergie $2Q_0 \equiv E_{|+3/2\rangle} - E_{|+1/2\rangle} = -\frac{\hbar^2}{m_0}\gamma_2\pi^2/L_z^2$. À partir de l'expression des fonctions $\{|3/2, \pm 3/2\rangle, |3/2, \pm 1/2\rangle\}$ dans la base $\{|X, \uparrow / \downarrow\rangle, |Y, \uparrow / \downarrow\rangle, |Z, \uparrow / \downarrow\rangle\}$ (2.14) et un choix de phase appropriée, l'état $|\mathbb{0}_1\rangle$ peut s'écrire :

$$|\mathbb{0}_1\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}|X\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}Z_0|X\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|Y\uparrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{6}}Z_0|Y\downarrow\rangle - \frac{2}{\sqrt{2}}Z_0|Z\uparrow\rangle, \quad (6.23)$$

et l'état $|\mathbb{1}_1\rangle$:

$$|\mathbb{1}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}Z_0^*|X\uparrow\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|X\downarrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{6}}Z_0^*|Y\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|Y\downarrow\rangle - \frac{2}{\sqrt{2}}Z_0^*|Z\downarrow\rangle, \quad (6.24)$$

Finalement, $S_{ij} = \sum_{i,\sigma} C_{i\sigma}^* C'_{j\sigma}$ avec $|\mathbb{0}_1\rangle = \sum_{i\sigma} C_{i\sigma}|i\sigma\rangle$, $|\mathbb{1}_1\rangle = \sum_{i\sigma} C'_{i\sigma}|i\sigma\rangle$, $i \in \{X, Y, Z\}$, et $i \in \{\uparrow, \downarrow\}$. Les éléments $\{S_{ij}\}$ (6.18) peuvent ainsi s'écrire à l'ordre un en champ magnétique :

$$\begin{cases} S_{xx} = -iS_{xy} = -iS_{yx} = -S_{yy} = -\frac{i}{\sqrt{3}}Z_0^* \\ S_{xz} = S_{yz} = S_{zx} = S_{zy} = S_{zz} = 0 \end{cases}. \quad (6.25)$$

En substituant les expressions des éléments $\{S_{ij}\}$ [éq. (6.25)] dans l'équation (6.20b), nous obtenons :

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{2}{3}|Z_0|^2 = 8\frac{m_0^2}{\hbar^4}(\kappa\mu_B B)^2\frac{L_z^4}{\gamma_2^2}\sin^2\theta, \\ B_2 &= 2B_1 \end{aligned} \quad (6.26)$$

où m_0 est la masse d'un électron libre, $\gamma_2 = 0.339$ est un paramètre de Luttinger des bandes de valence, $\kappa = -0.42$ est le coefficient Zeeman des trous et μ_B est le magnéton de Bohr [48]. Le taux de relaxation du qubit s'écrit ainsi :

$$\Gamma_{\text{ph}} = \frac{\omega_L^3}{8\pi\hbar\rho}\coth\left(\frac{\hbar\omega_L}{2k_B T}\right)\Lambda B_1. \quad (6.27)$$

où le paramètre $\Lambda = \sum_\alpha (\Lambda_{1\alpha} + 2\Lambda_{2\alpha})/v_\alpha^5$ dépend des potentiels de déformations uniaxial et de cisaillement du matériau.

En prenant en compte le confinement latéral à l'ordre un dans les états du qubit (6.22) (comme dans le modèle du chapitre 5), un calcul similaire montre que l'expression (6.26) reste inchangée. Les termes B_1 et B_2 se comportent, comme attendu en $\omega_L^2 \propto B^2$. Ainsi, à cet ordre en L_z , ils ne dépendent pas des dimensions L_x et L_y du canal, et sont donc indépendants du confinement latéral. Pour cette raison, la relaxation induite par les phonons se comporte différemment des oscillations de Rabi qui nécessitent un confinement latéral. Ce résultat provient du fait que les déformations induites par les phonons couplent directement les fonctions de Bloch trous lourds et trous légers contrairement à un champ électrique radio-fréquence. En fait, le champ magnétique dans le plan $\propto B \sin\theta$ mélange la composante $|3/2, +3/2\rangle$ de $|\mathbb{0}\rangle$ avec une enveloppe $|3/2, +1/2\rangle$, qui peut être couplée par les phonons

à la composante majoritaire $|3/2, -3/2\rangle$ de $|1\rangle$ via l'hamiltonien des déformations $H_{int}(\varepsilon)$ [éq. (6.13)]. Le mélange magnétique entre les enveloppes $|3/2, +3/2\rangle$ et $|3/2, +1/2\rangle$ de $|0\rangle$ est inversement proportionnel à la séparation entre les bandes de trous lourds et de trous légers confinées, ce qui donne le dépendance en L_z^4/γ_2^2 dans les équations (6.26), comme pour un puits quantique. Ensuite, d'après le chapitre 5, $f_R \propto \sin \theta$ quand $\theta \rightarrow 0$ ou π , et ainsi les équations (6.26) suggèrent que $Q_1 \rightarrow \infty$ (bien que cela ne soit pas pertinent car $f_R \rightarrow 0$). Les contributions d'ordres supérieurs à l'équation (6.26) donnent un taux Γ_{ph} fini, et la dépendance en φ clairement visible dans la figure 6.6 c), assurant que $Q_1 \rightarrow 0$ quand $\theta \rightarrow 0$ ou π comme montré dans cette même figure. Finalement, nous avons établi $f_R \propto L_z^2$, et $\Gamma_{ph} \propto L_z^4$. Ainsi $Q_1 = f_R/\Gamma_{ph} \propto L_z^{-2}$. Il est donc préférable de réaliser des qubits de faibles hauteurs L_z pour accroître le facteur de qualité Q_1 , bien que la fréquence de Rabi soit plus faible.

6.2.6 Limite du modèle

Finalement, nous discutons les limites du modèle du taux de relaxation ci-dessus. Nous avons étudié le temps de relaxation du qubit en prenant en compte les mécanismes de relaxation dus aux phonons. Mais, d'autres mécanismes peuvent participer à la relaxation du qubit comme le bruit de Johnson-Nyquist provenant de l'excitation thermique des porteurs et des fluctuations du point zéro dans le circuit connecté aux grilles. Cependant ces mécanismes (Johnson-Nyquist et bruit de charge ...) sont extrinsèques au qubit, et sont en principe plus facile à optimiser (par exemple en réduisant les impédances du circuit pour le bruit de Johnson-Nyquist). Les processus à plusieurs phonons et à photons (pertinents à haute température) [84, 85] et des mécanismes supplémentaires liés au couplage spin-orbite, via les bandes de conduction par exemple, négligés dans cette étude peuvent aussi augmenter le taux de relaxation, et ainsi dégrader le facteur de qualité du qubit.

6.3 Conclusions

Nous avons établi le temps de vie d'un qubit spin-orbite de trou limité par les processus de relaxation à un phonon dans le cadre de la description de la bande de valence par une méthode $k \cdot p$ six bandes. Les expressions qui en résultent peuvent en fait être appliquées à la relaxation de charge et de spin dans les qubits de trou. Nous avons appliqué cette théorie à un qubit spin-orbite sur SOI identique à celui étudié au chapitre 4. Nous avons montré que la relaxation de spin induite par les phonons dans ce qubit est dominée par un terme de mélange de bandes qui couple le trou aux phonons acoustiques transverses via le potentiel de déformation d_v des bandes de valence. Nous avons ensuite optimisé le point de polarisation et l'orientation du champ magnétique à la recherche du meilleur facteur de qualité $Q_1 = f_R T_1$ (nombre d'oscillations de Rabi pendant le temps de relaxation T_1). Dans ce cadre, Q_1 peut atteindre quelque dizaines de milliers malgré le fort couplage spin-orbite dans les bandes de valence.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

Ce chapitre conclut ce manuscrit en résumant les concepts et les résultats les plus importants des précédents chapitres. Nous détaillons ensuite les codes développés, et les perspectives de cette thèse.

7.1 Conclusions générales

Dans le chapitre 1, nous avons introduit la brique élémentaire d'un ordinateur quantique : un système quantique à deux niveaux appelé bit quantique (qubit). En 1998, les physiciens Loss et Di Vincenzo ont proposé d'encoder un qubit dans le spin d'un électron piégé dans une boîte quantique. Nous avons discuté différentes implémentations d'un tel objet dans des matériaux semiconducteurs tel que le GaAs et le Si. Le silicium se révèle être un bon matériau hôte pour accueillir un qubit de spin car il présente une faible interaction hyperfine ce qui limite donc sa décohérence. En particulier, l'état d'un qubit de spin peut être contrôlé électriquement via, par exemple, le couplage spin-orbite intrinsèque, ce qui permet d'adresser plus sélectivement les qubits dans des circuits quantiques denses. Ce couplage spin-orbite est plus important dans les bandes de valence que dans la bande de conduction des semiconducteurs, et ainsi les trous se manipulent plus facilement avec des champs électriques que les électrons. En particulier, les équipes du CEA ont démontré la manipulation électrique d'un qubit spin-orbite de trou défini dans des dispositifs CMOS.

Le chapitre 2 discute en détails la structure de bandes de valence autour du point Γ pour des matériaux semiconducteurs de type diamant, et, en particulier, pour le silicium. Nous avons discuté l'effet du couplage spin-orbite qui sépare les six bandes dégénérées en Γ en deux groupes : quatre bandes dégénérées de basses énergies (trous lourds et trous légers), et deux bandes dégénérées de hautes énergies (split-off) distantes de l'énergie de couplage spin-orbite Δ_{so} . Nous avons aussi introduit le code TB_Sim développé au CEA, qui permet notamment de construire une nanostructure, de calculer le potentiel électrique dans celle-ci, et de calculer sa structure électronique avec une méthode $k \cdot p$ six bandes afin d'établir ses énergies et états propres.

Nous avons présenté, dans le chapitre 3, les expériences menées sur les qubits de trou dans un dispositif SOI du CEA. Dans ce dispositif, nous avons montré des oscillations cohérentes d'un spin de trou excitées électriquement avec une fréquence de Rabi très dépendante de l'orientation du champ magnétique. Nous avons discuté comment caractériser la fréquence de Rabi par deux matrices 3×3 : la matrice gyromagnétique \hat{g} et sa réponse avec le champ électrique oscillant \hat{g}' . Ces deux matrices peuvent être obtenues expérimentalement bien que la mesure de \hat{g}' soit très délicate. Nous avons distingué alors deux mécanismes pour les oscillations de Rabi. Le premier, que nous avons appelé izo-Zeeman (IZR), correspond aux modulations \hat{g}' de la matrice \hat{g} qui laissent les facteurs gyromagnétiques et l'énergie Zeeman invariants. Le second, appelé g -TMR, est associé aux modulations des facteurs et axes gyromagnétiques principaux. Nous avons extrait ces deux contributions et nous avons conclus que l'IZR domine les oscillations de Rabi dans le dispositif expérimental ce qui permet, notamment, de préciser la position du qubit dans ce dispositif.

Le chapitre 4 est consacré aux formalismes de calculs de la fréquence de Rabi et à une étude numérique d'un qubit de trou sur SOI. Nous avons introduit trois expressions de la fréquence de Rabi. La première est la définition même de la fréquence de Rabi comme par l'élément de matrice dipolaire entre les deux états du qubit. La seconde est issue d'une théorie de perturbations linéaire en champ magnétique. La fréquence de Rabi est alors exprimée comme la somme des éléments de couplages électriques et magnétiques des états du qubit avec tous les états excités. Cette expression permet une analyse microscopique de la physique du qubit. La dernière expression est celle-obtenue dans le cadre du formalisme de la matrice gyromagnétique \hat{g} , et fait intervenir la matrice gyromagnétique \hat{g} et sa variation avec le champ électrique \hat{g}' . Ces matrices peuvent être calculées à partir des deux états du qubit à champ magnétique nul, et rendent compte de l'anisotropie des fréquences de Larmor et de Rabi à champ magnétique fini, ce qui fait du formalisme de la matrice \hat{g} une approche très efficace du point de vue numérique. Ensuite, nous avons appliqué le formalisme de la matrice \hat{g} à un qubit de trou sur SOI. Nous avons mis en évidence de fortes anisotropies de fréquences de Rabi qui peuvent être expliquées par les symétries du système. Nous avons identifié une paire d'état excité participant en quasi-totalité à la série de perturbations de la fréquence de Rabi. Cette paire d'état présente une enveloppe de type p orientée le long du champ électrique statique. Ces éléments ont ainsi fourni les ingrédients nécessaires pour un modèle minimale de boîte quantique.

Le chapitre 5 présente ce modèle minimal. Nous avons considéré une boîte quantique rectangulaire dans un semiconducteur dont la structure de bandes est décrite par une méthode $k \cdot p$ quatre bandes. Nous avons isolé une base minimale d'états du qubit, suggérée par les simulations numériques du chapitre 4, reproduisant les propriétés du qubit réel. Cela nous a permis d'établir une expression analytique de la fréquence de Rabi qui dépend des paramètres et de l'orientation cristalline du matériau hôte. Nous avons ainsi montré que le silicium (orienté selon [110]) présente la plus grande fréquence de Rabi parmi les semiconducteurs conventionnels grâce à l'anisotropie de ses bandes de valence.

Finalement, dans le chapitre 6 nous avons démontré une expression générique du taux de relaxation Γ_{ph} entre les deux états d'un qubit de trou assisté par des processus à un phonon. Nous l'avons précisée pour un modèle $k \cdot p$ quatre et six bandes et un modèle de phonons acoustiques isotropes, puis nous l'avons appliquée au qubit de trou étudié au chapitre 4. Le temps de relaxation montre une forte dépendance avec la fréquence de Larmor et avec l'orientation du champ magnétique. Finalement, le facteur de qualité, correspondant au nombre d'oscillations de Rabi pendant le temps de relaxation $T_1 = \Gamma_{ph}^{-1}$, peut atteindre plusieurs dizaines de milliers sur un grand intervalle d'orientation de champ magnétique. Il est aussi possible de basculer le qubit d'une polarisation électrique où la manipulation électrique est efficace (mais le temps de vie cours) à une polarisation où le qubit est découpé des champs électriques mais le temps de vie est long.

7.2 Code développé

Cette section mentionne brièvement le code de modélisation que j'ai implémenté pendant cette thèse. En complément de TB_Sim, j'ai développé un code (en python) de modélisation d'un qubit comme une boîte quantique rectangulaire. Ce code a été le support numérique du chapitre 5. Le confinement dans ce système est soit "dur" selon les trois directions de la boîte, soit harmonique suivant un des trois axes. Le système peut être soumis à un champ électrique statique et homogène, et à un champ électrique radiofréquence lui aussi homogène. Le champ magnétique statique auquel le système est soumis est décrit par un hamiltonien Zeeman, et par l'action explicite du potentiel vecteur sur les fonctions enveloppes. Des contraintes homogènes peuvent aussi être appliquées au qubit. Finalement ce code numérique modèle, dont certaines perspectives de cette thèse sont basées sur celui-ci, permet notamment de :

- Décrire la structure de bandes du qubit avec une méthode $k \cdot p$ quatre ou six bandes [éq. (2.17)],
- Calculer les énergies et les états quantiques de la boîte,
- Calculer efficacement la matrice gyromagnétique \hat{g} [éq. (4.14)],
- Obtenir l'anisotropie de la fréquence de Larmor et de la fréquence de Rabi par différent forma-

- lismes [éqs. (3.14), (4.3), (4.8)],
- Implémenter des mécanismes de manipulations électriques quelconques, et en particulier des manipulations pures g -TMR et pures IZR [éqs. (3.19), (3.20)],
 - Caractériser le temps de relaxation assisté par un phonon [éq. (6.19)].

7.3 Perspectives

Dans cette dernière section, nous présentons les quelques pistes à approfondir pour l'étude des propriétés d'un qubit spin-orbite de trou dans le silicium.

Tous d'abord, l'effet des contraintes sur les performances du qubit a été brièvement étudié dans la section 4.3.5 et dans l'annexe G. Dans la boîte quantique rectangulaire restreinte à la base minimale (5.6), nous avons mis en évidence un zéro de la fréquence de Rabi pour une contrainte particulière à un champ électrique statique donné. Dans une base plus grande que la base minimale, et dans une description des bandes de valence avec un modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes, la fréquence de Rabi présente aussi un creux (sans zéro). La fréquence de Rabi montre ainsi des variations non triviales en fonction de la déformation biaxiale ε et du champ électrique E_0 comme illustré dans la figure 7.1. Ces variations méritent une étude plus approfondies afin d'optimiser la manipulation du qubit.

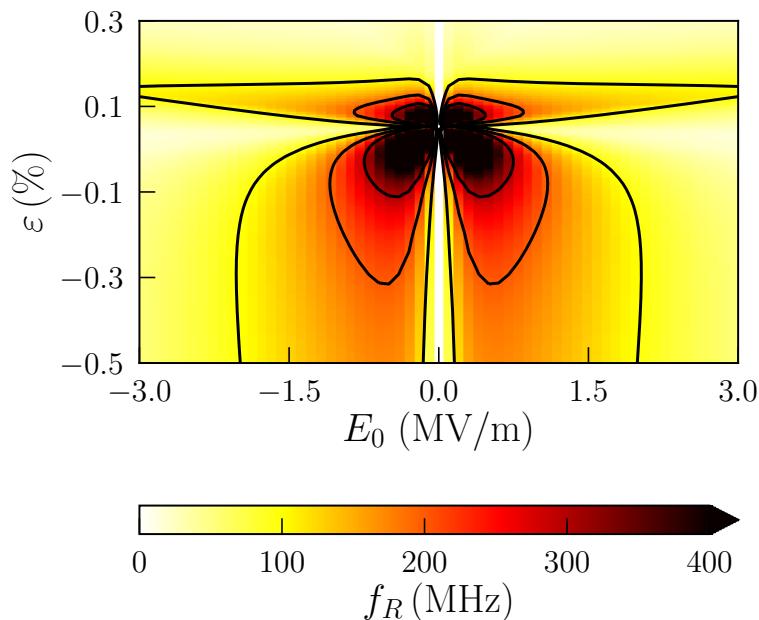


FIGURE 7.1 – Fréquence de Rabi en fonction du champ électrique latéral statique E_0 et de la déformation biaxiale $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = -\nu\varepsilon$, où $\nu = 2c_{12}/c_{11}$ est le coefficient de Poisson biaxial et c_{11}, c_{12} sont les constantes élastiques du silicium. Pour chaque pixel, le champ magnétique de 1 T est orienté afin de maximiser la fréquence de Rabi. Calculé dans un modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes (potentiel vecteur inclus) dans une boîte quantique rectangulaire de taille $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm, et $L_z = 10$ nm. Un champ électrique ac résonant d'amplitude $E_{ac} = 1/30$ mV/nm est appliqué le long de y (voir figure 5.1).

Ensuite, l'effet de la bande de split-off n'est pas trivial, et est donc intéressant à étudier. Par exemple, la figure 7.2 représente la fréquence de Rabi en fonction du champ électrique latéral E_0 calculée à partir d'une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes ($\Delta_{so} = +\infty$) et six bandes ($\Delta_{so} = 44$ meV). La fréquence de Rabi calculée à partir de la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes est plus faible que celle calculée par une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes dans une large gamme de champs électriques ($|E_0| < 0.5$ MV/m). Ainsi un plus grand couplage spin-orbite n'entraîne pas nécessairement de plus grandes fréquences de Rabi. L'effet précis de cette bande de split-off reste donc à étudier.

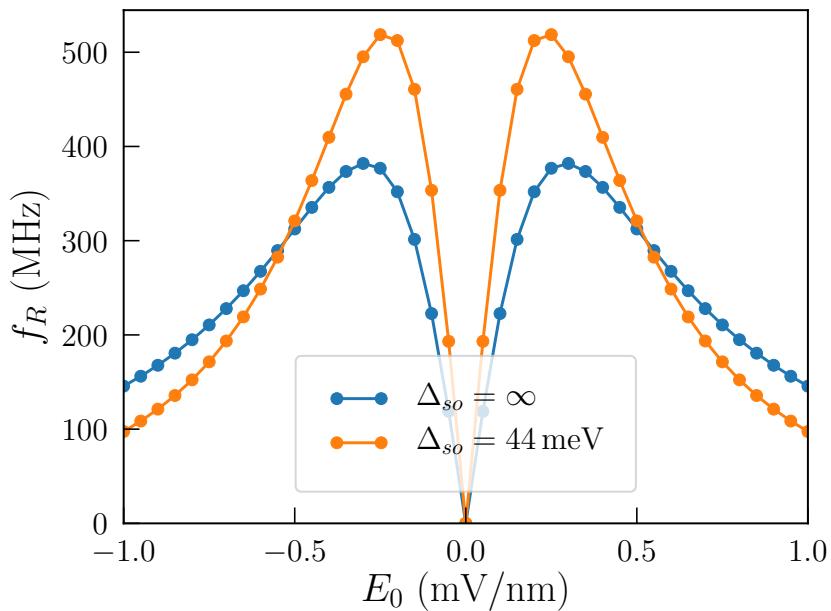


FIGURE 7.2 – Fréquence de Rabi par rapport à l’orientation du champ magnétique en fonction du champ électrique latéral statique calculée à partir d’une description $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre ($\Delta_{so} = \infty$) et six bandes ($\Delta_{so} = 44\text{ meV}$). Calculée dans une boîte quantique rectangulaire de taille $L_x = 40\text{ nm}$, $L_y = 30\text{ nm}$, et $L_z = 10\text{ nm}$ sans contraintes. Pour chaque point, le champ magnétique de 1 T est orienté pour maximiser la fréquence de Rabi.

Finalement, il est pertinent de comprendre quels mécanismes, ou plutôt quelle nature d’excitation électrique maximise la fréquence de Rabi. Le code modèle de la boîte rectangulaire fournit un appui numérique à cette étude. Récemment, Vincent Michal, un post-doctorant du laboratoire, a déterminé analytiquement l’expression de la fréquence de Rabi dans le cas où le champ électrique ac est orienté le long du nanofil ($\mathbf{E}_{ac} \parallel \mathbf{x}$, voir figure 5.1) plutôt que perpendiculairement à celui-ci ($\mathbf{E}_{ac} \parallel \mathbf{y}$, cas étudié dans ce manuscrit). Le cas $\mathbf{E}_{ac} \parallel \mathbf{x}$ est en effet un paradigme de mécanisme IZR, alors que le cas $\mathbf{E}_{ac} \parallel \mathbf{y}$ est un paradigme de la g -TMR. Nous avons pu aussi comparer l’efficacité relative de ces deux mécanismes en fonction des dimensions de la boîte quantique, des contraintes, du champ électrique statique, et des paramètres matériau. Le code pour la boîte quantique a fourni un appui numérique important à cette étude et a permis de valider les modèles analytiques. Un article sur le sujet est en cours de finalisation.

Bibliographie

- [1] J. Bardeen and W. H. Brattain, “The Transistor, a semi-conductor triode,” *Phys. Rev.*, vol. 74, pp. 230–231, 1948.
- [2] M. G. E., “Cramming more components onto integrated circuits,” *Electronics*, vol. 38, 1965.
- [3] J. R. Powell, “The quantum limit to Moore’s law,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 96, no. 8, pp. 1247–1248, 2008.
- [4] K. König, A. Ostendorf, and D. Forschungsgemeinschaft, *Optically induced nanostructures*. Berlin, Boston : De Gruyter, 2015.
- [5] R. Feynman, “Simulating physics with computers,” *Int J Theor Phys*, vol. 21, p. 467–488, 1982.
- [6] D. Deutsch and R. Penrose, “Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer,” *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 400, no. 1818, pp. 97–117, 1985.
- [7] T. D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, Y. Nakamura, C. Monroe, and J. L. O’Brien, “Quantum computers,” *Nature*, vol. 464, no. 7285, p. 45–53, 2010.
- [8] P. W. Shor, “Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer,” *SIAM Journal on Computing*, vol. 26, no. 5, pp. 1484–1509, 1997.
- [9] L. K. Grover, “A fast quantum mechanical algorithm for database search,” in *Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, STOC ’96, (New York, NY, USA), p. 212–219, Association for Computing Machinery, 1996.
- [10] P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics*. Clarendon Press, 1930.
- [11] J. Matthews, A. Politi, A. Stefanov, and J. O’Brien, “Manipulation of multiphoton entanglement in waveguide quantum circuits,” *Nature Photonics*, vol. 3, no. 6, pp. 346 – 350, 2009.
- [12] Y. Nakamura, Y. A. Pashkin, and J. S. Tsai, “Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box,” *Nature*, vol. 398, 1999.
- [13] I. Chiorescu, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans, and J. E. Mooij, “Coherent quantum dynamics of a superconducting flux qubit,” *Science*, vol. 299, no. 5614, pp. 1869–1871, 2003.
- [14] J. M. Martinis, S. Nam, J. Aumentado, and C. Urbina, “Rabi oscillations in a large Josephson-junction qubit,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, p. 117901, 2002.
- [15] D. Loss and D. P. DiVincenzo, “Quantum computation with quantum dots,” *Physical Review A*, vol. 57, p. 120, 1998.
- [16] G. Burkard, R. H. Koch, and D. P. DiVincenzo, “Multilevel quantum description of decoherence in superconducting qubits,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 064503, 2004.
- [17] E. L. Hahn, “Spin echoes,” *Phys. Rev.*, vol. 80, pp. 580–594, 1950.
- [18] F. H. L. Koppens, C. Buizert, K. J. Tielrooij, I. T. Vink, K. C. Nowack, T. Meunier, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, “Driven coherent oscillations of a single electron spin in a quantum dot,” *Nature*, vol. 442, p. 766, 2006.
- [19] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, “Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots,” *Science*, vol. 309, no. 5744, p. 2180, 2005.

- [20] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, and L. P. Kouwenhoven, “Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot,” *Nature*, vol. 430, 2004.
- [21] L. C. Camenzind, L. Yu, P. Stano, J. D. Zimmerman, A. C. Gossard, D. Loss, and D. M. Zumbühl, “Hyperfine-phonon spin relaxation in a single-electron GaAs quantum dot,” *Nature Communications*, vol. 9, 2018.
- [22] J. R. de Laeter, J. K. Böhlke, P. D. Bièvre, H. Hidaka, H. S. Peiser, K. J. R. Rosman, and P. D. P. Taylor, “Atomic weights of the elements. Review 2000 (IUPAC Technical Report),” *Pure and Applied Chemistry*, vol. 75, no. 6, pp. 683 – 800, 2003.
- [23] A. M. Tyryshkin, S. Tojo, J. J. L. Morton, H. Riemann, N. V. Abrosimov, P. Becker, P. H. J., T. Schenkel, M. L. W. Thewalt, K. M. Itoh, and S. A. Lyon, “Electron spin coherence exceeding seconds in high-purity silicon,” *Nature Materials*, vol. 11, no. 2, p. 143, 2012.
- [24] P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors*. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [25] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. Wiley, 8 ed., 2004.
- [26] L. C. Lew Yan Voon and M. Willatzen, *The k p Method*. Berlin : Springer, 2009.
- [27] T. F. Watson, S. G. J. Philips, E. Kawakami, D. R. Ward, P. Scarlino, M. Veldhorst, D. E. Savage, M. G. Lagally, M. Friesen, S. N. Coppersmith, M. A. Eriksson, and L. M. K. Vandersypen, “A programmable two-qubit quantum processor in silicon,” *Nature*, vol. 555, p. 633, 2018.
- [28] B. M. Maune, M. G. Borselli, B. Huang, T. D. Ladd, P. W. Deelman, K. S. Holabird, A. A. Kiselev, I. Alvarado-Rodriguez, R. S. Ross, A. E. Schmitz, M. Sokolich, C. A. Watson, M. F. Gyure, and A. T. Hunter, “Coherent singlet-triplet oscillations in a silicon-based double quantum dot,” *Nature*, vol. 481, p. 344, 2012.
- [29] J. J. Pla, K. Y. Tan, J. P. Dehollain, W. H. Lim, J. J. L. Morton, D. N. Jamieson, A. S. Dzurak, and A. Morello, “A single-atom electron spin qubit in silicon,” *Nature*, vol. 489, p. 541, 2012.
- [30] A. Morello, J. J. Pla, F. A. Zwanenburg, K. W. Chan, K. Y. Tan, H. Huebl, M. Möttönen, C. D. Nugroho, C. Yang, J. A. van Donkelaar, A. D. C. Alves, D. N. Jamieson, C. C. Escott, L. C. L. Hollenberg, R. G. Clark, and A. S. Dzurak, “Single-shot readout of an electron spin in silicon,” *Nature*, vol. 467, 2010.
- [31] V. N. Golovach, M. Borhani, and D. Loss, “Electric-dipole-induced spin resonance in quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 74, p. 165319, 2006.
- [32] M. Pioro-Ladrière, T. Obata, Y. Tokura, Y.-S. Shin, T. Kubo, K. Yoshida, T. Taniyama, and S. Tarucha, “Electrically driven single-electron spin resonance in a slanting Zeeman field,” *Nature Physics*, vol. 4, p. 776, 2008.
- [33] Y. Tokura, W. G. Van Der Wiel, T. Obata, and S. Tarucha, “Coherent single electron spin control in a slanting zeeman field,” *Physical Review Letters*, vol. 96, p. 047202, 2006.
- [34] E. Kawakami, P. Scarlino, D. R. Ward, F. R. Braakman, D. E. Savage, M. G. Lagally, M. Friesen, S. N. Coppersmith, M. A. Eriksson, and L. M. K. Vandersypen, “Electrical control of a long-lived spin qubit in a Si/SiGe quantum dot,” *Nature Nanotechnology*, vol. 9, p. 666, 2014.
- [35] A. Corna, L. Bourdet, R. Maurand, A. Crippa, D. Kotekar-Patil, H. Bohuslavskyi, R. Laviéville, L. Hutin, S. Barraud, X. Jehl, M. Vinet, S. De Franceschi, Y.-M. Niquet, and M. Sanquer, “Electrically driven electron spin resonance mediated by spin–valley–orbit coupling in a silicon quantum dot,” *npj Quantum Information*, vol. 4, p. 6, 2018.
- [36] L. Bourdet and Y.-M. Niquet, “All-electrical manipulation of silicon spin qubits with tunable spin–valley mixing,” *Physical Review B*, vol. 97, p. 155433, 2018.
- [37] H. Watzinger, C. Kloeffel, L. Vukusic, M. D. Rossell, V. Sessi, J. Kukucka, R. Kirchschlager, E. Lausecker, A. Truhlar, M. Glaser, A. Rastelli, A. Fuhrer, D. Loss, and G. Katsaros, “Heavy-hole states in germanium hut wires,” *Nano Letters*, vol. 16, p. 6879, 2016.

- [38] H. Watzinger, J. Kukučka, L. Vukušić, F. Gao, T. Wang, F. Schäffler, J.-J. Zhang, and G. Katsaros, “A germanium hole spin qubit,” *Nature Communications*, vol. 9, p. 3902, 2018.
- [39] B. Voisin, R. Maurand, S. Barraud, M. Vinet, X. Jehl, M. Sanquer, J. Renard, and S. De Franceschi, “Electrical control of g -factors in a few-hole silicon nanowire MOSFET,” *Nano Letters*, vol. 16, no. 7, pp. 88–92, 2016.
- [40] R. Maurand, X. Jehl, D. Kotekar-Patil, A. Corna, H. Bohuslavskyi, R. Laviéville, L. Hutin, S. Barraud, M. Vinet, M. Sanquer, and S. de Franceschi, “A CMOS silicon spin qubit,” *Nature Communications*, vol. 7, p. 13575, 2016.
- [41] A. Crippa, R. Maurand, L. Bourdet, D. Kotekar-Patil, A. Amisse, X. Jehl, M. Sanquer, R. Laviéville, H. Bohuslavskyi, L. Hutin, S. Barraud, M. Vinet, Y.-M. Niquet, and S. De Franceschi, “Electrical spin driving by g -Matrix modulation in spin-orbit qubits,” *Physical Review Letters*, vol. 120, p. 137702, 2018.
- [42] A. Crippa, R. Ezzouch, A. Aprá, A. Amisse, L. Hutin, B. Bertrand, M. Vinet, M. Urdampilleta, T. Meunier, M. Sanquer, X. Jehl, R. Maurand, and S. de Franceschi, “Gate-reflectometry dispersive readout and coherent control of a spin qubit in silicon,” *Nature Communications*, vol. 10, 2019.
- [43] J. Singh, *Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures*. Cambridge University Press, 2003.
- [44] L. P., “A note on the quantum-mechanical perturbation theory ,” *J. Chem. Phys*, vol. 19, 1951.
- [45] J. M. Luttinger and W. Kohn, “Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields,” *Phys. Rev.*, vol. 97, pp. 869–883, 1955.
- [46] O. Madelung, ed., *Semiconductors - group IV elements and III-V compounds*. Springer Berlin Heidelberg, 1991.
- [47] Y. M. Niquet, D. Rideau, C. Tavernier, H. Jaouen, and X. Blase, “Onsite matrix elements of the tight-binding Hamiltonian of a strained crystal : Application to silicon, germanium, and their alloys,” *Physical Review B*, vol. 79, p. 245201, 2009.
- [48] R. Winkler, *Spin-orbit coupling in two-dimensional electron and hole systems*. Berlin : Springer, 2003.
- [49] J. M. Luttinger, “Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors : general theory,” *Physical Review*, vol. 102, p. 1030, 1956.
- [50] L. Bourdet, J. Li, J. Pelloux-Prayer, F. Triozon, M. Cassé, S. Barraud, S. Martinie, D. Rideau, and Y.-M. Niquet, “Contact resistances in trigate and FinFET devices in a non-equilibrium Green’s functions approach,” *Journal of Applied Physics*, vol. 119, p. 084503, 2016.
- [51] G. Sleijpen and H. Van der Vorst, “A Jacobi–Davidson iteration method for linear eigenvalue problems,” *SIAM Review*, vol. 42, no. 2, p. 267, 2000.
- [52] Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst, eds., *Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems : a practical guide*. Philadelphia : SIAM, 2000.
- [53] M. Graf and P. Vogl, “Electromagnetic fields and dielectric response in empirical tight-binding theory,” *Physical Review B*, vol. 51, p. 4940, 1995.
- [54] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, “Electron transport through double quantum dots,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 75, pp. 1–22, 2002.
- [55] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, “Spins in few-electron quantum dots,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 79, pp. 1217–1265, 2007.
- [56] D. Kotekar-Patil, A. Corna, R. Maurand, A. Crippa, A. Orlov, S. Barraud, L. Hutin, M. Vinet, X. Jehl, S. De Franceschi, and M. Sanquer, “Pauli spin blockade in CMOS double quantum dot devices,” *physica status solidi (b)*, vol. 254, no. 3, p. 1600581, 2017.

- [57] J. M. Elzerman, R. Hanson, J. S. Greidanus, L. H. Willems van Beveren, S. De Franceschi, L. M. K. Vandersypen, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, “Few-electron quantum dot circuit with integrated charge read out,” *Phys. Rev. B*, vol. 67, p. 161308, 2003.
- [58] Y. Kato, R. C. Myers, D. C. Driscoll, A. C. Gossard, J. Levy, and D. D. Awschalom, “Giga-hertz electron spin manipulation using voltage-controlled g-tensor modulation,” *Science*, vol. 299, no. 5610, p. 1201, 2003.
- [59] N. Ares, G. Katsaros, V. N. Golovach, J. J. Zhang, A. Prager, L. I. Glazman, O. G. Schmidt, and S. De Franceschi, “SiGe quantum dots for fast hole spin Rabi oscillations,” *Applied Physics Letters*, vol. 103, no. 26, p. 263113, 2013.
- [60] J. Cornwell, ed., *Group theory in physics*. San Diego : Academic Press, 1997.
- [61] B. Voisin, V.-H. Nguyen, J. Renard, X. Jehl, S. Barraud, F. Triozon, M. Vinet, I. Duchemin, Y. M. Niquet, S. de Franceschi, and M. Sanquer, “Few-electron edge-state quantum dots in a silicon nanowire field-effect transistor,” *Nano Letters*, vol. 14, p. 2094, 2014.
- [62] C. Kloeffel, M. Trif, P. Stano, and D. Loss, “Circuit QED with hole-spin qubits in Ge/Si nanowire quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 88, p. 241405, 2013.
- [63] J. Mansir, P. Conti, Z. Zeng, J. J. Pla, P. Bertet, M. W. Swift, C. G. Van de Walle, M. L. W. Thewalt, B. Sklenard, Y. M. Niquet, and J. J. L. Morton, “Linear hyperfine tuning of donor spins in silicon using hydrostatic strain,” *Physical Review Letters*, vol. 120, p. 167701, 2018.
- [64] J. J. Pla, A. Bienfait, G. Pica, J. Mansir, F. A. Mohiyaddin, Z. Zeng, Y. M. Niquet, A. Morello, T. Schenkel, J. J. L. Morton, and P. Bertet, “Strain-induced spin-resonance shifts in silicon devices,” *Physical Review Applied*, vol. 9, p. 044014, 2018.
- [65] M. L. Lee, E. A. Fitzgerald, M. T. Bulsara, M. T. Currie, and A. Lochtefeld, “Strained Si, SiGe, and Ge channels for high-mobility metal-oxide-semiconductor field-effect transistors,” *Journal of Applied Physics*, vol. 97, p. 011101, 2005.
- [66] Y. Sun, S. E. Thompson, and T. Nishida, “Physics of strain effects in semiconductors and metal-oxide-semiconductor field-effect transistors,” *Journal of Applied Physics*, vol. 101, p. 104503, 2007.
- [67] C. Kloeffel, M. Trif, and D. Loss, “Strong spin-orbit interaction and helical hole states in Ge/Si nanowires,” *Physical Review B*, vol. 84, p. 195314, 2011.
- [68] C. Kloeffel, M. J. Rančić, and D. Loss, “Direct Rashba spin-orbit interaction in Si and Ge nanowires with different growth directions,” *Physical Review B*, vol. 97, p. 235422, 2018.
- [69] P. Stano and J. Fabian, “Control of electron spin and orbital resonances in quantum dots through spin-orbit interactions,” *Physical Review B*, vol. 77, p. 045310, 2008.
- [70] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, “Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals,” *Physical Review*, vol. 98, p. 368, 1955.
- [71] N. Ares, V. N. Golovach, G. Katsaros, M. Stoffel, F. Fournel, L. I. Glazman, O. G. Schmidt, and S. De Franceschi, “Nature of tunable hole g factors in quantum dots,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 046602, 2013.
- [72] K. W. Böer and U. W. Pohl, *Elasticity and phonons*, p. 111. Cham : Springer International Publishing, 2018.
- [73] W. Weber, “Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and $\alpha - \text{Sn}$,” *Phys. Rev. B*, vol. 15, pp. 4789–4803, 1977.
- [74] G. P. Srivastava, *The physics of phonons*. New-York : Taylor & Francis, 1990.
- [75] L. M. Woods, T. L. Reinecke, and R. Kotlyar, “Hole spin relaxation in quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 69, p. 125330, 2004.

- [76] C. Lü, J. L. Cheng, and M. W. Wu, “Hole spin relaxation in semiconductor quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 71, p. 075308, 2005.
- [77] C. Tahan and R. Joynt, “Relaxation of excited spin, orbital, and valley qubit states in ideal silicon quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 89, p. 075302, 2014.
- [78] G. E. Pikus and G. L. Bir *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)*, vol. 1, p. 1642, 1959. [Sov. Phys. Solid State **1**, 1502(1960)].
- [79] T. B. Bahder, “Eight-band $k\cdot p$ model of strained zinc-blende crystals,” *Physical Review B*, vol. 41, p. 11992, 1990.
- [80] L. D. Laude, F. H. Pollak, and M. Cardona, “Effects of uniaxial stress on the indirect exciton spectrum of Silicon,” *Physical Review B*, vol. 3, p. 2623, 1971.
- [81] Y.-H. Li, X. G. Gong, and S.-H. Wei, “Ab initio all-electron calculation of absolute volume deformation potentials of IV-IV, III-V, and II-VI semiconductors : The chemical trends,” *Physical Review B*, vol. 73, p. 245206, 2006.
- [82] F. Maier, C. Kloeffel, and D. Loss, “Tunable g factor and phonon-mediated hole spin relaxation in Ge/Si nanowire quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 87, p. 161305, 2013.
- [83] P. Huang and X. Hu, “Spin relaxation in a Si quantum dot due to spin-valley mixing,” *Physical Review B*, vol. 90, p. 235315, 2014.
- [84] M. Trif, P. Simon, and D. Loss, “Relaxation of hole spins in quantum dots via two-phonon processes,” *Physical Review Letters*, vol. 103, p. 106601, 2009.
- [85] L. Petit, J. M. Boter, H. G. J. Eenink, G. Droulers, M. L. V. Tagliaferri, R. Li, D. P. Franke, K. J. Singh, J. S. Clarke, R. N. Schouten, V. V. Dobrovitski, L. M. K. Vandersypen, and M. Veldhorst, “Spin lifetime and charge noise in hot silicon quantum dot qubits,” *Physical Review Letters*, vol. 121, p. 076801, 2018.
- [86] Y. Onodera and M. Okazaki, “Tables of basis functions for double point groups,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 21, no. 11, p. 2400, 1966.
- [87] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and strain induced effects in semiconductors*. New York : Wiley, 1974.

Annexe A

Paramètres de la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Coefficients L , M et N

En utilisant la définition de la section 2.1.1, les coefficients L , M et N de l'hamiltonien (2.9) peuvent s'exprimer en fonction des termes de la série de perturbations [45] :

$$\begin{aligned} L &= H_{XX}^{xx} \\ M &= H_{XX}^{yy} \\ N &= H_{XY}^{xy} + H_{XY}^{yx} \end{aligned}, \quad (\text{A.1})$$

où $H_{ij}^{\alpha\beta}$ est défini dans l'équation (2.8).

Couplage spin-orbite

Le paramètre Δ_{so} introduit dans l'équation (2.13) qui définit la force du couplage spin-orbite d'un matériau dans une description $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ six bandes peut s'écrire [48] :

$$\Delta_{so} = \frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \langle X | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | Y \rangle. \quad (\text{A.2})$$

où \hbar est la constante de Planck réduite, c est la vitesse de la lumière dans le vide, m_0 est la masse d'un électron dans le vide, ∇V est le gradient du potentiel, $\hat{\mathbf{p}}$ est l'impulsion, et $|X\rangle$, $|Y\rangle$ sont deux fonctions de Bloch définies dans la section 2.1.1.

Action du champ magnétique sur les fonctions de Bloch

Cette section donne les expressions du paramètre κ , provenant de l'effet du potentiel vecteur sur les fonctions de Bloch, et de la matrice \mathbf{K} .

Paramètre κ

Le paramètre κ introduit dans l'équation (2.24) peut s'exprimer [49] $3\kappa + 1 = H_{XY}^{xy} - H_{XY}^{yx}$ avec $H_{XY}^{xy,yx}$ définies dans la série de perturbations (2.8).

Matrice \mathbf{K}

Nous avons vu que l'effet total du champ magnétique sur les fonctions de Bloch peut s'écrire $H_Z = \mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{K}$ où $\mathbf{K} = (K_x, K_y, K_z)$.

Dans $\{|3/2, +3/2\rangle, |3/2, +1/2\rangle, |3/2, -1/2\rangle, |3/2, -3/2\rangle, |1/2, +1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle\}$, les composantes de \mathbf{K} (en supposant la facteur gyromagnétique $g_0 = 2$) sont [49] :

$$K_x = - \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3}\kappa & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' & 0 \\ \sqrt{3}\kappa & 0 & 2\kappa & 0 & 0 & -\frac{\kappa'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 2\kappa & 0 & \sqrt{3}\kappa & \frac{\kappa'}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\kappa & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' \\ -\sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' & 0 & \frac{\kappa'}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \kappa'' \\ 0 & -\frac{\kappa'}{\sqrt{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' & \kappa'' & 0 \end{pmatrix} \quad (A.3)$$

$$K_y = - \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3}\kappa & 0 & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' & 0 \\ i\sqrt{3}\kappa & 0 & -2i\kappa & 0 & 0 & i\frac{\kappa'}{\sqrt{2}} \\ 0 & 2i\kappa & 0 & -i\sqrt{3}\kappa & i\frac{\kappa'}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3}\kappa & 0 & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' \\ -i\sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' & 0 & -i\frac{\kappa'}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -i\kappa'' \\ 0 & -i\frac{\kappa'}{\sqrt{2}} & 0 & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\kappa' & i\kappa'' & 0 \end{pmatrix}$$

$$K_z = - \begin{pmatrix} 3\kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa & 0 & 0 & \sqrt{2}\kappa' & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 0 & 0 & \sqrt{2}\kappa' \\ 0 & 0 & 0 & -3\kappa & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\kappa' & 0 & 0 & \kappa'' & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\kappa' & 0 & 0 & -\kappa'' \end{pmatrix}$$

où $\kappa' = 1 + \kappa$ et $\kappa'' = 1 + 2\kappa$. Cette matrice \mathbf{K} a la même forme dans les axes $\mathbf{x} = [100]$, $\mathbf{y} = [010]$, et $\mathbf{z} = [001]$ que dans les axes $\mathbf{x} = [110]$, $\mathbf{y} = [\bar{1}10]$, et $\mathbf{z} = [001]$.

Dans le sous espace $j = 3/2$ (trous lourds, trous légers) correspondant aux blocs 4×4 en haut à gauche de chaque élément de \mathbf{K} (délimités par des pointillés), H_Z est rigoureusement équivalent à $-2\kappa\mu_B\mathbf{B} \cdot \mathbf{J}$, où $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ est le moment angulaire total des fonctions de Bloch [49].

Annexe B

Hamiltonien effectif : rotation de la base de spin

Dans cette annexe, nous discutons les effets d'un changement de base pour les états $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ du qubit sur la matrice \hat{g} . Soit R la matrice de passage d'une base de spin $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ vers une nouvelle base $\{|\uparrow'\rangle, |\downarrow'\rangle\}$ définie par une transformation unitaire générique :

$$R = \begin{pmatrix} \alpha e^{i\theta} & -\beta^* \\ \beta e^{i\theta} & \alpha^* \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

où $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Dans la base $\{|\uparrow'\rangle, |\downarrow'\rangle\}$, les matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma}' = {}^t(\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3)$ s'écrivent :

$$\sigma'_i = {}^\dagger R \sigma_i R, \quad (\text{B.2})$$

pour $i \in \{1, 2, 3\}$, avec $\{\sigma_i\}$ les matrices de Pauli dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Chaque matrice σ'_i peut néanmoins se redécomposer dans la base des $\{\sigma_i\}$, et s'écrire sous la forme :

$$\sigma'_i = \sum_j U_{ji} \sigma_j, \quad (\text{B.3})$$

soit $\boldsymbol{\sigma}' = {}^t \hat{U} \boldsymbol{\sigma}$ avec la matrice $\hat{U} = \{U_{ij}\}$ suivante :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \text{Re}[(\alpha^2 - \beta^2)e^{i\theta}] & -\text{Im}[(\alpha^2 + \beta^2)e^{i\theta}] & -2\text{Re}[\alpha\beta e^{i\theta}] \\ \text{Im}[(\alpha^2 - \beta^2)e^{i\theta}] & \text{Re}[(\alpha^2 + \beta^2)e^{i\theta}] & -2\text{Im}[\alpha\beta e^{i\theta}] \\ 2\text{Re}[\alpha^*\beta] & 2\text{Im}[\alpha^*\beta] & |\alpha|^2 - |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

Par conséquent, dans la base $\{|\uparrow'\rangle, |\downarrow'\rangle\}$, $H = \frac{1}{2}\mu_B {}^t \boldsymbol{\sigma}' \cdot \hat{g}' \cdot \mathbf{B}$, où $\hat{g}' = {}^t \hat{U} \hat{g}$. La matrice \hat{U} est unitaire et a pour déterminant +1. Par conséquent, toute rotation de la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ entraîne une rotation correspondante de \hat{g}' . Réciproquement, toute matrice 3×3 unitaire U de déterminant +1 peut être associée à une transformation unitaire R de la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Finalement, appliquer un changement de base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \rightarrow R\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ est équivalent à remplacer $\boldsymbol{\sigma}$ par ${}^t \hat{U} \boldsymbol{\sigma}$. En particulier, la matrice \hat{U} issue de la décomposition en valeurs singulières de la matrice \hat{g} [éq. (3.4)] est ainsi équivalente à un changement de base de spin comme décrit ci-dessus.

Annexe C

Résonance électrique de spin iso-Zeeman dans un potentiel harmonique

Prenons l'exemple d'un électron dans une boîte quantique très confinée suivant l'axe **z** avec un potentiel harmonique $U(x, y) = m\omega_0^2(x^2 + y^2)/2$ dans le plan (xy) , où m est la masse d'un électron libre, et ω_0 caractérise la courbure de ce potentiel. Un champ magnétique **B** est appliqué au système, et permet de définir les deux états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ du qubit. Un champ électrique uniforme radio-fréquence $\mathbf{E} = E_0(e_x\mathbf{x} + e_y\mathbf{y}) \sin(\omega t)$ où $e_x^2 + e_y^2 = 1$ est appliqué dans le plan (xy) et engendre des oscillations entre les états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ à la résonance.

D'après Golovach et Loss [31] l'hamiltonien effectif de ce système peut s'écrire (pour un champ **E** statique) :

$$H = \frac{1}{2}g_0\mu_B\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} + g_0\mu_B(\mathbf{B}\times\boldsymbol{\Omega})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{C.1})$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ sont les matrices de Pauli, $\boldsymbol{\Omega} = -\frac{eE_0}{m\omega_0^2}(e_y/\lambda_-, e_x/\lambda_+, 0)$ avec $\lambda_{\pm} = \hbar/(m(\beta \pm \alpha))$, α et β étant les constantes spin-orbite de Rashba et Dresselhauss, g_0 est le facteur gyromagnétique d'un électron dans le vide. Ainsi, la matrice \hat{g} à champ $E_0 = 0$ s'identifie à $\hat{g} = \text{diag}(g_0, g_0, g_0)$. La matrice \hat{g}' est définie comme la dérivée de la matrice \hat{g} par rapport à E_0 s'écrit :

$$\hat{g}' = 2g_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\Theta_y \\ 0 & 0 & \Theta_x \\ \Theta_y & -\Theta_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

où $\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Omega}/E_0 = (\Theta_x, \Theta_y, 0)$. Le facteur gyromagnétique g_0 est isotrope et ne varie pas lorsque le champ radio-fréquence est appliqué ($\hat{G}' = 0$) mais la matrice \hat{g}' est non nulle. En utilisant l'équation (3.14) pour la fréquence de Rabi, nous trouvons ensuite :

$$hf_R = g_0\mu_B|\mathbf{B}\times\boldsymbol{\Omega}|, \quad (\text{C.3})$$

ce qui est bien l'expression proposée par Golovach et Loss [31]. Le formalisme de la matrice \hat{g} capture donc bien les oscillations de Rabi de type IZR.

Annexe D

Équivalence entre le formalisme de la matrice \hat{g} et la série de perturbation

Pour prouver l'équivalence entre les équations (4.8) et (4.16) nous choisissons un vecteur $\mathbf{z} \parallel \mathbf{B}$ pour une orientation donnée (et arbitraire) de \mathbf{B} , et nous écrivons $\hat{g}(V_0)$ dans la base $\{|0_0\rangle, |1_0\rangle\}$. Puisque $|0_0\rangle$ et $|1_0\rangle$ sont états propres de $M_{1,z}$, $g_{13} = g_{23} = 0$ dans l'équation (4.14), et ainsi $\hat{g}\mathbf{b} = g_{33}\mathbf{z}$, $g = g_{33}$. Par conséquent :

$$\begin{aligned} f_R &= \frac{\mu_B B V_{\text{ac}}}{2h} |\mathbf{v}| \text{ avec } \mathbf{v} = (-g'_{23}, g'_{13}, 0) \\ &= \frac{\mu_B B V_{\text{ac}}}{2h} |g'_{13} + ig'_{23}| \\ &= \frac{BV_{\text{ac}}}{h} \left| \frac{\partial}{\partial V} \langle 1_0 | M_{1,z} | 0_0 \rangle \right|. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

La dérivée ci-dessus peut facilement être calculée en traitant l'opérateur D_1 comme une perturbation à l'ordre un. Bien que $|0_0\rangle$ et $|1_0\rangle$ soient des états dégénérés de $H_0(V_0, \mathbf{B})$, ils ne sont pas couplés par le champ électrique, et la théorie des perturbations non-dégénéré s'applique :

$$\frac{\partial}{\partial V} |0_0\rangle = -e \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle n, \sigma | D_1 | 0_0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, \sigma\rangle \quad (\text{D.2a})$$

$$\frac{\partial}{\partial V} |1_0\rangle = -e \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle n, \sigma | D_1 | 1_0 \rangle}{E_0 - E_n} |n, \sigma\rangle. \quad (\text{D.2b})$$

Nous avons ensuite :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial V} \langle 1_0 | M_{1,z} | 0_0 \rangle &= -e \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle 1_0 | M_{1,z} | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | D_1 | 0_0 \rangle}{E_0 - E_n} \\ &\quad - e \sum_{n>0,\sigma} \frac{\langle 1_0 | D_1 | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | M_{1,z} | 0_0 \rangle}{E_0 - E_n}. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

La substitution de l'équation (D.3) dans l'expression (D.1) entraîne bien l'équation (4.8) comme attendu.

Annexe E

Calcul numérique de la dérivée de la matrice \hat{g}

Pour établir la fréquence de Rabi à partir du formalisme de la matrice \hat{g} , nous devons calculer la dérivée de la matrice \hat{g} par rapport à la tension de grille modulée. Dans cette partie, nous discutons la méthodologie pour le calcul numérique de \hat{g}' . Nous étudions une paire de Kramers quelconque, et nous notons $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ les états de cette paire calculés à une polarisation électrique $V = V_0$. La matrice $\hat{g}(V_0)$ dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ est facilement obtenue à partir des équations (4.14). En effectuant les même calculs à $V = V_0 \pm \delta V$ (où δV est petit) nous obtenons $\hat{g}(V_0 \pm \delta V)$ dans une autre base $\{|\uparrow_{\pm}\rangle, |\downarrow_{\pm}\rangle\}$. La dérivée de la matrice \hat{g} , $\hat{g}'(V_0)$, peut en principe être calculée en différences finies :

$$\hat{g}'(V_0) = \frac{\hat{g}(V_0 + \delta V) - \hat{g}(V_0 - \delta V)}{2\delta V}. \quad (\text{E.1})$$

Cependant, l'équation ci-dessus n'a aucun sens (sauf cas particulier). En effet les états $\{|\uparrow_{-}\rangle, |\downarrow_{-}\rangle\}$ et $\{|\uparrow_{+}\rangle, |\downarrow_{+}\rangle\}$ sont calculés de manière indépendante, et sont définis à une transformation unitaire près : rien n'impose de passer de l'un à l'autre par continuité. L'idée est de construire les états $\{|\uparrow'_{+}\rangle, |\downarrow'_{+}\rangle\}$ (respectivement les états $\{|\uparrow'_{-}\rangle, |\downarrow'_{-}\rangle\}$) qui soient le prolongement analytique des états $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ lorsque la polarisation varie de $+\delta V$ (respectivement de $-\delta V$). D'après les équations (D.2), les états $\{|\uparrow'_{\pm}\rangle\}$ doivent rester (au premier ordre en δV) orthogonaux à $|\downarrow\rangle$ et de même $\{|\downarrow'_{\pm}\rangle\}$ doivent rester orthogonaux à $|\uparrow\rangle$. Par conséquent, les états $\{|\uparrow'_{\pm}\rangle\}$ et $\{|\downarrow'_{\pm}\rangle\}$ pertinents doivent vérifier :

$$\begin{pmatrix} \langle \uparrow'_{\pm} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow'_{\pm} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow'_{\pm} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow'_{\pm} | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \alpha_{\pm} \mathbb{1}_2, \quad (\text{E.2})$$

où $0 < \alpha_{\pm} \leq 1$. Nous recherchons donc la transformation unitaire P_{\pm} dans le sous espace $\{|\uparrow_{\pm}\rangle, |\downarrow_{\pm}\rangle\}$, tel que les états $|\sigma'_{\pm}\rangle = P_{\pm}|\sigma_{\pm}\rangle$ satisfassent les équations ci-dessus. En résolvant ce problème, nous pouvons définir de manière unique P_{\pm} , tel que :

$$P_{\pm} = \beta_{\pm} \begin{pmatrix} \langle \uparrow_{\pm} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow_{\pm} | \uparrow \rangle \\ \langle \uparrow_{\pm} | \downarrow \rangle & \langle \downarrow_{\pm} | \downarrow \rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{E.3})$$

où :

$$\begin{aligned} \beta_{\pm}^{-2} &= |\langle \uparrow_{\pm} | \uparrow \rangle|^2 + |\langle \downarrow_{\pm} | \uparrow \rangle|^2 \\ &= |\langle \uparrow_{\pm} | \downarrow \rangle|^2 + |\langle \downarrow_{\pm} | \downarrow \rangle|^2. \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

$$\alpha_{\pm}^2 = \beta_{\pm}^{-2}$$

Finalement, les différences finies (E.1) peuvent être utilisées en toute sécurité dans la nouvelle base $\{|\uparrow'_{\pm}\rangle, |\downarrow'_{\pm}\rangle\}$:

$$|\uparrow'_{\pm}\rangle = \beta_{\pm} (\langle \uparrow_{\pm} | \uparrow \rangle |\uparrow_{\pm}\rangle + \langle \downarrow_{\pm} | \uparrow \rangle |\downarrow_{\pm}\rangle) \quad (\text{E.5a})$$

$$|\downarrow'_{\pm}\rangle = \beta_{\pm} (\langle \uparrow_{\pm} | \downarrow \rangle |\uparrow_{\pm}\rangle + \langle \downarrow_{\pm} | \downarrow \rangle |\downarrow_{\pm}\rangle). \quad (\text{E.5b})$$

Annexe F

Théorie des groupes pour les matrices \hat{g} et \hat{g}'

Dans cette annexe, nous donnons quelques détails concernant l’application de la théorie des groupes aux matrices \hat{g} et \hat{g}' [60]. Nous supposons que l’hamiltonien du système est un hamiltonien effectif $H(V_0, \mathbf{B})$ donné par l’équation (4.13). Pour toute opération R qui laisse invariant le système, et pour tous états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$, nous devons avoir :

$$\langle \varphi_1 | H(V, \mathbf{B}) | \varphi_2 \rangle = \langle \Gamma_S(R) \varphi_1 | H(V, \hat{\Gamma}_B(R) \mathbf{B}) | \Gamma_S(R) \varphi_2 \rangle, \quad (\text{F.1})$$

où $\Gamma_S(R)$ est la représentation du groupe de symétrie dans l’espace de Hilbert du qubit, et $\hat{\Gamma}_B(R)$ est la représentation du groupe de symétrie dans l’espace du vecteur champ magnétique. Cela implique :

$$H(V, \mathbf{B}) = \Gamma_S^\dagger(R) H(V, \hat{\Gamma}_B(R) \mathbf{B}) \Gamma_S(R). \quad (\text{F.2})$$

Les matrices $\hat{\Gamma}_B(R)$ dans les axes $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\}$ sont données dans la table F.1 pour les plans miroirs σ_{yz} , σ_{zx} et σ_{xy} . Avec un choix approprié pour les états dégénérés $\{| \uparrow\downarrow \rangle, | \downarrow\uparrow \rangle\}$ du qubit sans champ magnétique, les matrices $\Gamma_S(R)$ prennent la forme donnée dans la table F.2 [86]. Le groupe double D_{2h} a deux représentations irréductibles possibles pour un doublet de Kramers qui diffèrent par le signe de $\Gamma_S(\sigma_{xy})$ mais les conclusions restent identiques que le doublet de Kramers appartienne à l’une ou l’autre des représentations irréductibles.

Matrice \hat{g}

En utilisant la forme de l’hamiltonien effectif (4.13), et l’équation (F.2) nous obtenons :

$$\sigma \cdot \hat{g}(V_0) \mathbf{B} = [\Gamma_S^\dagger(R) \sigma \Gamma_S(R)] \cdot \hat{g}(V_0) \hat{\Gamma}_B(R) \mathbf{B}, \quad (\text{F.3})$$

pour chaque opération de symétrie R et tout champ magnétique \mathbf{B} , où :

$$\Gamma_S^\dagger \sigma \Gamma_S = (\Gamma_S^\dagger \sigma_1 \Gamma_S, \Gamma_S^\dagger \sigma_2 \Gamma_S, \Gamma_S^\dagger \sigma_3 \Gamma_S). \quad (\text{F.4})$$

En développant cette relation pour les plans miroirs σ_{yz} , σ_{zx} et σ_{xy} , et nous pouvons construire les tables 4.1 et 4.2.

$\sigma_{\alpha\beta}$	σ_{yz}	σ_{zx}	σ_{xy}
$\Gamma_B(\sigma_{\alpha\beta})$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

TABLE F.1 – Représentation $\hat{\Gamma}_B(\sigma_{\alpha\beta})$ dans les axes $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\}$.

$\sigma_{\alpha\beta}$	σ_{yz}	σ_{zx}	σ_{xy}
$\Gamma_S(\sigma_{\alpha\beta})$	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$

TABLE F.2 – Représentation $\Gamma_S(\sigma_{\alpha\beta})$.

Matrice \hat{g}'

Pour établir les conditions sur la dérivée de la matrice $\hat{g}'(V_0)$, nous devons généraliser les équations (4.1) et (4.2) et considérer l'hamiltonien comme une fonction de \mathbf{B} et comme une fonctionnelle du potentiel électrique total $V_{\text{elec}}(V, \mathbf{r})$ dans le dispositif. Ainsi,

$$\begin{aligned} \hat{g}'(V_0) &= \frac{\partial \hat{g}}{\partial V} \Big|_{V=V_0} = \int d^3\mathbf{r} \frac{\delta \hat{g}}{\delta V_{\text{elec}}(\mathbf{r})} \frac{\partial V_{\text{elec}}(V, \mathbf{r})}{\partial V} \Big|_{V=V_0} \\ &= \int d^3\mathbf{r} \frac{\delta \hat{g}}{\delta V_{\text{elec}}(\mathbf{r})} D_1(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

où la dérivée de la fonctionnelle $\delta \hat{g} / \delta V_{\text{elec}}(\mathbf{r})$ est évaluée au potentiel électrique $V_{\text{elec}}(V_0, \mathbf{r})$. De manière similaire à \hat{g} , nous obtenons en utilisant les équations (F.2) et (F.5) :

$$\begin{aligned} \sigma \cdot \left[\int d^3\mathbf{r} \frac{\delta \hat{g}}{\delta V_{\text{elec}}(\mathbf{r})} D_1(\mathbf{r}) \right] \mathbf{B} = \\ \left[\Gamma_S^\dagger(R) \sigma \Gamma_S(R) \right] \cdot \left[\int d^3\mathbf{r} \frac{\delta \hat{g}}{\delta V_{\text{elec}}(\mathbf{r})} D_1(\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{r}) \right] \hat{\Gamma}_B(R) \mathbf{B}, \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

où $\hat{\Gamma}_R(R)$ est une représentation du groupe de symétrie dans l'espace réel (défini par une matrice de rotation standard). Cette relation impose des conditions non-triviales sur $\hat{g}'(V_0)$ dans au moins deux cas :

1. $D_1(\mathbf{r}) = D_1(\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{r})$ – ou encore, D_1 est invariant par l'opération de symétrie R . L'équation (F.6) est la même que l'équation (F.3) avec \hat{g} remplacée par \hat{g}' , et ainsi R impose les mêmes conditions sur $\hat{g}(V_0)$ et $\hat{g}'(V_0)$ (première ligne de la table 4.3). En introduisant la modulation du champ électrique $\mathbf{E}_1 = -\nabla D_1$, et en appliquant le gradient de part et d'autre de l'égalité, nous obtenons $\mathbf{E}_1(\mathbf{r}) = \hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{E}_1(\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{r})$. Ainsi la modulation du champ électrique doit être "paire" sous la transformation R .
2. $D_1(\mathbf{r}) = -D_1(\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{r})$. Alors l'équation (F.6) impose que $\hat{g}'(V_0)$ prend la forme donnée dans la seconde ligne de la table 4.3. Comme la matrice \hat{g} ne doit pas changer si $D_1(\mathbf{r})$ est une constante (qui se traduit par $\int d^3\mathbf{r} \delta \hat{g} / \delta V_{\text{elec}}(\mathbf{r}) = 0$), la condition ci-dessus peut se généraliser en $D_1(\mathbf{r}) + D_1(\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{r}) = K$ (K est indépendant de \mathbf{r}). Par conséquent, $\mathbf{E}_1(\mathbf{r}) = -\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{E}_1(\hat{\Gamma}_R(R)\mathbf{r})$ doit être "impaire" sous la transformation R .

Ces conditions sont le résultat de l'interaction entre la parité de l'hamiltonien du champ magnétique (défini dans la table F.1) et la parité de l'hamiltonien du champ électrique (définie ci-dessus). Quand les parités sont incompatibles, la somme des contributions de chaque paire d'états excités est zéro dans l'équation (4.8), ne laissant aucune connexion entre les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ du qubit.

Annexe G

Contraintes et fréquence de Rabi pour un trou léger

Nous considérons la boîte quantique rectangulaire, dont la structure électronique est décrite par une méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ quatre bandes (voir chapitre 5), soumise à une contrainte biaxiale homogène dans le plan (xy) tel que $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\parallel}$, $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp} = -\nu\varepsilon_{\parallel}$, où $\nu = 2c_{12}/c_{11}$ est le coefficient de Poisson biaxial et c_{11}, c_{12} sont les constantes élastiques du matériau de la boîte.

Dans la base $\{|+3/2\rangle, |+1/2\rangle, |-1/2\rangle, |-3/2\rangle\}$, l'hamiltonien des contraintes Bir-Pikus [87] est :

$$H_{\text{BP}} = \begin{pmatrix} \Delta E_{\text{HH}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta E_{\text{LH}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta E_{\text{LH}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta E_{\text{HH}} \end{pmatrix}, \quad (\text{G.1})$$

avec :

$$\Delta E_{\text{HH}} = [(\nu - 2)a_v - (\nu + 1)b_v]\varepsilon_{\parallel} \quad (\text{G.2a})$$

$$\Delta E_{\text{LH}} = [(\nu - 2)a_v + (\nu + 1)b_v]\varepsilon_{\parallel}, \quad (\text{G.2b})$$

et a_v, b_v sont les potentiels de déformation hydrostatique et uniaxial de la boîte. Les contraintes décalent donc les purs trous lourds des purs trous légers. Elles sont introduites en remplaçant P par $P + (\nu - 2)a_v\varepsilon_{\parallel}$ et Q par $Q - (\nu + 1)b_v\varepsilon_{\parallel}$ dans l'équation (5.8).

Dans la base minimale \mathcal{B} , il existe une relation entre l'hamiltonien total \mathcal{H}_{tot} (incluant les champs magnétique et électrique) sans contrainte et avec contrainte. Nous remarquons que \mathcal{H}_{tot} ne dépend pas de L_z qu'à travers la variable $\eta \equiv L_z^{-2}$, et que :

$$\mathcal{H}_{\text{tot}}(\varepsilon_{\parallel}, \eta) = \mathcal{H}_{\text{tot}}(0, \eta') + (\nu - 2)a_v\varepsilon_{\parallel}, \quad (\text{G.3})$$

avec :

$$\eta' - \eta = \frac{1}{L_z^{2'}} - \frac{1}{L_z^2} = \frac{m_0(\nu + 1)b_v}{\hbar^2\pi^2\gamma_2}\varepsilon_{\parallel}. \quad (\text{G.4})$$

Par conséquent, l'effet des contraintes biaxiales est introduit par une modification de la longueur de fort confinement $\eta = L_z^2$ dans la fréquence de Rabi, qui suit la loi d'échelle :

$$f_R(\varepsilon_{\parallel}, \eta) = |f_R(0, \eta')|. \quad (\text{G.5})$$

En particulier, l'effet des contraintes biaxiales de compression (respectivement de tension) est équivalent à une diminution (respectivement augmentation) de L_z^2 (comme b_v est typiquement négatif). Nous notons que $L_z^{2'}$ peut diverger et devenir négatif à grandes contraintes de tension. Des valeurs positives et négatives de $L_z^{2'}$ donnent lieu à des fréquences de Rabi identiques à l'ordre L_z^2/L_x^2 et L_z^2/L_y^2 [éqs

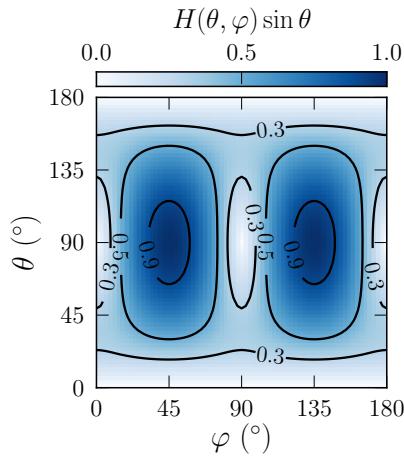


FIGURE G.1 – La fonction $H(\theta, \varphi) \sin \theta$ caractérise la dépendance de la fréquence de Rabi d'un trou léger à l'orientation du champ magnétique.

(5.39) et (G.6)], mais ce n'est pas nécessairement le cas aux ordres supérieurs. Cette relation d'échelle s'applique au qubit défini par n'importe quelle paire d'états de la boîte quantique.

Il doit être gardé à l'esprit que l'état fondamental passe d'un caractère presque pur trous lourds à un caractère presque pur trous légers à grandes contraintes en tension. Dans une couche mince, les états de plus basses énergies presque purs trous légers sans contrainte sont les états $\{|\tilde{1}+, \sigma\rangle\}$ définis par les équations (5.15). En suivant le même raisonnement que pour l'état trous lourds $|\tilde{1}-\rangle$, seule la paire $\{|\tilde{2}+, \sigma\rangle\}$ contribue à la fréquence de Rabi des états $\{|\tilde{1}+, \sigma\rangle\}$ dans l'équation (5.23). La fréquence de Rabi de cette paire est à l'ordre L_z^2/L_y^2 :

$$f_R^{(2)} = \frac{2^8 m_0 e^3}{3^4 \pi^9 \hbar^4} B |E_0| E_{ac} \frac{\gamma_3 |\kappa|}{\gamma_2 (\gamma_1 - \gamma_2)^2} L_y^6 \frac{L_z^2}{L_y^2} H(\theta, \varphi) \sin \theta, \quad (\text{G.6})$$

avec :

$$H(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1 + 4 \tan^2 \theta \sin^2 2\varphi}{1 + 4 \tan^2 \theta}}. \quad (\text{G.7})$$

La fonction $H(\theta, \varphi)$ est tracée dans la figure G.1. La dépendance angulaire est très différente de la paire $|\tilde{1}-\rangle$ de trous lourds mais le préfacteur est identique à celui de l'équation (5.39) avec $(\gamma_1 + \gamma_2)^2$ remplacé par $(\gamma_1 - \gamma_2)^2$ au dénominateur. La fréquence de Rabi peut donc être, en principe, légèrement plus grande pour des états de trous légers que pour des états de trous lourds (à même L_x , L_y , suffisamment petit L_z et petites contraintes). Ce résultat est lié au fait que les trous lourds suivant \mathbf{z} (avec une masse $m_z = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$) sont en fait légers dans le plan (xy) (avec une masse $m_{xy} = m_0/(\gamma_1 + \gamma_2)$) tandis que les trous légers suivant l'axe \mathbf{z} ($m_z = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma_2)$) sont lourds dans le plan (xy) ($m_{xy} = m_0/(\gamma_1 - \gamma_2)$), et d'où répondent donc plus fortement au champs électrique et magnétique [voir les expressions de P et Q dans l'équation (5.8)]. La fréquence de Rabi d'une paire de trous légers est maximale pour $\theta = 90^\circ$, $\varphi = 45^\circ$ (modulo 90°), tandis que la fréquence de Rabi d'une paire de trous lourds est maximale quand $\varphi = 0^\circ$ (modulo 180°) mais pour un angle θ qui dépend des dimensions du qubit. La fréquence de Larmor est aussi moins anisotrope pour une paire de trous légers (puisque $|g_x| \simeq |g_y| \simeq 4|\kappa|$, $|g_z| \simeq 2|\kappa|$).

La composition trous lourds h_1^2 , et la fréquence de Rabi de l'état fondamental du qubit sont représentées en fonction de la déformation biaxiale $\varepsilon_{||}$ sur la figure G.2 a), dans une boîte de silicium ayant pour cotés $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm et $L_z = 10$ nm. Elles sont calculées à partir de la solution exacte de l'hamiltonien dans la base \mathcal{B} ($\nu = 0.77$, $b_v = -2.1$ eV). L'amplitude du champ électrique radiofréquence est $E_{ac} = 0.03$ mV/nm et du champ magnétique est $B = 1$ T est orienté selon la direction qui maximise la fréquence de Rabi pour chaque $\varepsilon_{||}$. Pour $\varepsilon_{||} < \varepsilon_{||}^* = 0.0625\%$, les états du qubit ont un

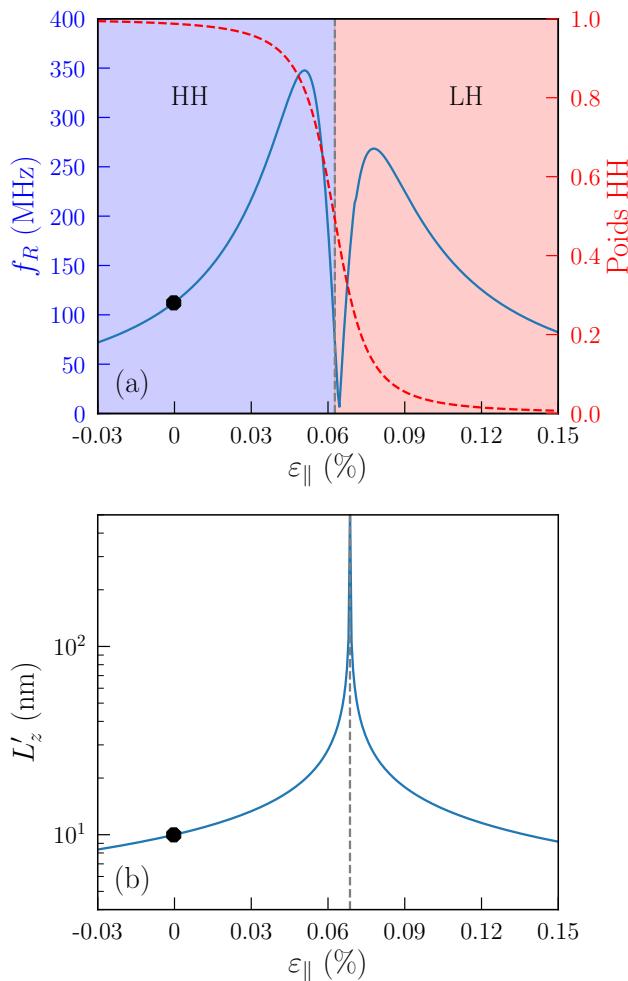


FIGURE G.2 – (a) Composition en trous lourds (trait pointillé rouge, axe de droite) et fréquence de Rabi (trait plein bleu, axe de gauche) de la paire fondamentale du qubit en fonction de ε_{\parallel} dans une boîte de silicium avec pour cotés $L_x = 40$ nm, $L_y = 30$ nm et $L_z = 10$ nm. Elles sont calculées à partir de la solution exacte de l’hamiltonien dans la base \mathcal{B} . L’amplitude du champ électrique radio-fréquence est $E_{ac} = 0.03$ mV/nm, celle du champ électrique statique $E_0 = 0.1$ MV/m et celle du champ magnétique est $B = 1$ T. \mathbf{B} est orienté selon la direction qui maximise la fréquence de Rabi pour chaque ε_{\parallel} . La transition d’un état fondamental plutôt trous lourds (HH) vers un état plutôt trous légers (LH) se fait vers $\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^* = 0.0625$ %. (b) Longueur effective $L_z' = \sqrt{|L_z^{2\prime}|}$ en fonction de ε_{\parallel} [éq. (G.4)]. $L_z^{2\prime}$ diverge à $\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} = 0.0686$ %, est positive pour $\varepsilon_{\parallel} < \varepsilon_{\parallel}^{\infty}$ et négative pour $\varepsilon_{\parallel} > \varepsilon_{\parallel}^{\infty}$. Le point de référence sans contrainte $\varepsilon_{\parallel} = 0$ est mis en évidence par un disque noir sur les deux figures.

caractère plutôt trous lourds, tandis que pour $\varepsilon_{\parallel} > \varepsilon_{\parallel}^*$, ils sont plutôt trous légers. La fréquence de Rabi diminue à grandes contraintes de tension ou de compression car les états trous lourds et trous légers sont très séparés en énergie par cette contrainte ce qui supprime le mélange trous lourds/trous légers nécessaire aux oscillations de Rabi [de manière équivalente, $L_z^{2\prime} \rightarrow 0$, comme illustré dans la figure G.2 b)].

La fréquence de Rabi montre un pic séparé en deux par un creux près de (mais pas exactement à) la transition $\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^*$. Ce pic est le résultat d’une augmentation de la longueur effective $L_z^{2\prime}$ (fort mélange entre les trous lourds et trous légers) bien que ni l’équation (5.39) ni l’équation (G.6) ne soient applicables autour de $\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^*$. Le creux est centré à la contrainte $\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}^0 = 0.0643$ % où $h_1 = h_2$, $l_1 = l_2$ (le creux est centré soit sur $h_1 = h_2$, $l_1 = l_2$ ou sur $h_2 = -l_1$, $h_1 = l_2$ en fonction des dimensions de la boîte). Les états propres de l’hamiltonien H_{4k-p} peuvent être alors tous factorisés comme des produits d’une seule enveloppe par des fonctions de Bloch mixtes trous lourds/trous légers. Comme les enveloppes, et/ou les fonctions de Bloch des différents états doivent être orthogonales, les états du qubit

et les états excités ne peuvent plus être couplés en même temps par E_{ac} et H_Z dans l'équation (5.23). Le creux devient moins profond (mais ne disparaît pas) dans une base plus grande. Ainsi, les qubits de trous se trouvent être très sensible à la contrainte, et l'intervalle de ε_{\parallel} exploitable pour augmenter la fréquence de Rabi est très étroit. La fréquence de Rabi reste plus grande pour des états presque purs trous lourds que pour des états presque pur trous légers près du pic [où les équations (5.39) et (G.6), qui suggèrent un comportement opposé ne sont plus valables].

Annexe H

Décomposition de la fréquence de Rabi

La fréquence de Rabi de la boîte quantique dans la base minimale s'écrit $f_R = \frac{e}{\hbar} B |E_0| E_{ac} \left| \Pi_{\tilde{1}+} + \Pi_{\tilde{2}-} + \Pi_{\tilde{2}+} \right|$ à l'ordre un en champs électrique et magnétique. L'équation pour $\Pi_{\tilde{2}-}$ est :

$$BE_0\Pi_{\tilde{2}-} = \frac{D_1}{E_{1-} - E_{2-}} \times \left\{ \lambda_{2-}^{1-} \left[-4\alpha\beta(Z_1^{(2)} - Z_1^{(1)}) - 2\beta^2(Z_2^{(2)} - Z_2^{(1)}) + 2\alpha^2(Z_2^{(2)*} - Z_2^{(1)*}) \right] \right. \\ \left. + \lambda_{2+}^{1-} \left[-4\alpha\beta Z_3^{(2)} - 2\beta^2 Z_4^{(2)} + 2\alpha^2 Z_4^{(2)*} \right] \right. \\ \left. + \lambda_{1+}^{2-} \left[-4\alpha\beta Z_3^{(1)} - 2\beta^2 Z_4^{(1)} + 2\alpha^2 Z_4^{(1)*} \right] \right\}, \quad (\text{H.1})$$

avec :

$$D_1 = \langle 2-, \uparrow | y | 1-, \uparrow \rangle = -\frac{16L_y}{9\pi^2}(h_1 h_2 + l_1 l_2) \quad (\text{H.2})$$

et :

$$Z_1^{(i)} = \langle i-, \uparrow | H_z | i-, \uparrow \rangle = \kappa\mu_B B(3h_i^2 - l_i^2)b_z \quad (\text{H.3a})$$

$$Z_2^{(i)} = \langle i-, \uparrow | H_z | i-, \downarrow \rangle = 2\kappa\mu_B B(\sqrt{3}h_i l_i b_- + l_i^2 b_+) \quad (\text{H.3b})$$

$$Z_3^{(i)} = \langle i-, \uparrow | H_z | i+, \uparrow \rangle = -4\kappa\mu_B B h_i l_i b_z \quad (\text{H.3c})$$

$$Z_4^{(i)} = \langle i-, \uparrow | H_z | i+, \downarrow \rangle = 2\kappa\mu_B B \left[\frac{\sqrt{3}}{2}(h_i^2 - l_i^2)b_- + l_i h_i b_+ \right]. \quad (\text{H.3d})$$

L'équation pour $\Pi_{\tilde{2}+}$ est :

$$BE_0\Pi_{\tilde{2}+} = \frac{D_2}{E_{1-} - E_{2+}} \times \left\{ \lambda_{2-}^{1-} \left[-4\alpha\beta Z_3^{(2)} - 2\beta^2 Z_4^{(2)} + 2\alpha^2 Z_4^{(2)*} \right] \right. \\ \left. + \lambda_{1+}^{2+} \left[-4\alpha\beta Z_3^{(1)} - 2\beta^2 Z_4^{(1)} + 2\alpha^2 Z_4^{(1)*} \right] \right. \\ \left. + \lambda_{2+}^{1-} \left[-4\alpha\beta(Z_5^{(1)} - Z_1^{(1)}) - 2\beta^2(Z_6^{(2)} - Z_2^{(1)}) + 2\alpha^2(Z_6^{(2)*} - Z_2^{(1)*}) \right] \right\}, \quad (\text{H.4})$$

où :

$$D_2 = \langle 2+, \uparrow | y | 1-, \uparrow \rangle = \frac{16L_y}{9\pi^2}(h_2 l_1 - h_1 l_2) \quad (\text{H.5})$$

et :

$$Z_5^{(i)} = \langle i+, \uparrow | H_z | i+, \uparrow \rangle = \kappa\mu_B B(3l_i^2 + h_i^2)b_z \quad (\text{H.6a})$$

$$Z_6^{(i)} = \langle i+, \uparrow | H_z | i+, \downarrow \rangle = 2\kappa\mu_B B(-\sqrt{3}h_i l_i b_- + h_i^2 b_+). \quad (\text{H.6b})$$

Enfin, l'équation pour $\Pi_{\tilde{1}+}$ est :

$$BE_0\Pi_{\tilde{1}+} = \frac{-4\alpha\beta Z_3^{(1)} - 2\beta^2 Z_4^{(1)} + 2\alpha^2 Z_4^{(1)*}}{E_{1-} - E_{1+}} \times \left[D_1(\lambda_{2-}^{1+} + \lambda_{2+}^{1-}) + D_2(\lambda_{2+}^{1+} - \lambda_{2-}^{1-}) \right]. \quad (\text{H.7})$$

Les coefficients α et β sont définis par l'équation (5.28), et les termes $\{h_i, l_i\}$ le sont par l'équation (5.12).

Titre

Modélisation de la manipulation électrique des qubits de trou dans le silicium.

Résumé

Les bits quantiques (qubits) de spin sont des dispositifs dans lesquels l'information est stockée comme une superposition cohérente des deux états de spin d'une particule. Une des perspectives de ces dispositifs est d'exploiter le parallélisme massif permis par une telle superposition de solutions. Le CEA Grenoble étudie notamment des qubits de spin de trou dans le silicium, car leur manipulation électrique est plus facile que les qubits d'électron grâce au couplage spin-orbite fort dans les bandes de valence. Cette thèse porte ainsi sur la modélisation de la manipulation électrique de ces qubits de trou. Tout d'abord, nous introduisons les méthodes k.p décrivant la structure des bandes de valence du silicium, et qui permettent de construire des modèles numériques et analytiques. Puis nous présentons les expériences menées au CEA Grenoble sur ces qubits dérivés des technologies CMOS. Ces expériences mettent en évidence les fortes anisotropies magnétiques des fréquences de Larmor et de Rabi, qui caractérisent respectivement la dynamique et la manipulation du qubit. Nous introduisons un formalisme de matrice gyromagnétique qui décrit complètement ces deux fréquences. De plus, nous montrons comment les symétries impactent la forme de cette matrice, et comment elles expliquent l'anisotropie magnétique des qubits. Ensuite, nous identifions grâce à la simulation numérique, les mécanismes microscopiques à l'œuvre lors de la manipulation électrique du spin, ce qui nous permet de construire un modèle minimal de qubit de trou. Ce modèle démontre que le silicium est un matériau hôte idéal pour un tel qubit grâce à la forte anisotropie de ces bandes de valence. Pour terminer, nous étudions numériquement l'impact des phonons sur le temps de vie des qubits de trou. Nous montrons que le temps de relaxation est suffisamment grand pour effectuer plusieurs dizaines de milliers d'opérations malgré le couplage spin-orbite fort.

Mots clefs : Information quantique, Physique numérique, Physique théorique, Bits quantiques, Silicium, Spin

Title

Modeling of the electrical manipulation of hole silicon qubits

Abstract

Spin quantum bits (qubits) are devices in which information is stored as a coherent superposition of two spin states of a particle. One of the perspectives of these devices is to exploit a massive parallelism allowed by such a superposition of solutions. The CEA Grenoble is studying in particular hole spin qubits in silicon, because their electrical manipulation is easier than electron qubits thanks to the strong spin-orbit coupling of the valence bands. This thesis thus focuses on the modeling of the electrical manipulation of these hole qubits. First of all, we introduce the k.p methods that describe the valence bands structure of silicon, and which allow to build numerical and analytical models. Then we present the experiments carried out by CEA Grenoble on these qubits derived from CMOS technologies. These experiments reveal the strong magnetic anisotropy of the Larmor and Rabi frequency, which respectively characterise the dynamic and the manipulation of the qubit. We introduce a gyromagnetic matrix formalism that completely describe these two frequencies. In addition, we show how symmetries impact the shape of this matrix, and how they explain the magnetic anisotropy of qubits. Next, we identify through numerical simulation, the microscopic mechanisms underlying the electrical manipulation of spin, which then allow us to build a minimal model for hole qubits. This model demonstrates that silicon is an ideal host material for a such qubit thanks to the strong anisotropy of its valence bands. Finally, we study numerically the impact of phonons on the lifetime of hole qubits. We show that the relaxation time is large enough to perform tens of thousand of operations despite the strong spin-orbit coupling.

Key words : Quantum information, Numerical physics, Theoretical physics, Quantum bits, Silicon, Spin