HAL
open science

Transport dans des nanostructures en présence de corrélations électroniques : courants d'équilibre et hors équilibre

Alexandre Popoff

▶ **To cite this version:**

Alexandre Popoff. Transport dans des nanostructures en présence de corrélations électroniques : courants d'équilibre et hors équilibre. Matière Condensée [cond-mat]. Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, 2008. Français. NNT : . tel-00366851

HAL Id: tel-00366851

https://theses.hal.science/tel-00366851v1

Submitted on 9 Mar 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de la Méditerranée
Centre de physique théorique

Transport dans des nanostructures en présence de corrélations électroniques : courants d'équilibre et hors équilibre

Thèse
présentée pour obtenir le grade de docteur
de l'Université de la Méditerranée
spécialité: physique théorique

par

Alexandre Popoff

le 23 octobre 2008

devant le jury composé de

Roland Hayn (président)
Dominique Mailly (rapporteur)
Pascal Simon (rapporteur)
Thierry Martin (directeur de thèse)
Thibaut Jonckheere (invité)

Résumé

Université de la Méditerranée
Centre de physique théorique

Transport dans des nanostructures en présence de corrélations électroniques: courants d'équilibre et hors équilibre.

par Alexandre Popoff

Courant Josephson dans une jonction "S/2DQ/S" : Nous caractérisons les effets d'Andreev croisés (CAR) dans une jonction composée de deux points quantiques couplés à deux contacts supraconducteurs. En présence d'un flux magnétique intérieur, la présence ou non de CAR influe directement sur la période d'oscillation du courant critique. Techniquement, on calcule l'énergie libre dans le formalisme d'intégrales de chemins et on utilise une approche de champs moyens pour traiter l'interaction coulombienne. On obtient ainsi le courant Josephson, le nombre d'occupation moyen et des diagrammes de phases pour la transition $0 - \pi$.

Courant dans une jonction "S/QD/S+N" : nous caractérisons la présence d'un contact normal dans une jonction de référence composée d'un point quantique couplé à deux contacts supraconducteurs. Un tel système pourrait servir à simuler la décohérence dans le transport. Nous montrons que la première harmonique du courant est déphasée en présence du contact normal. D'autres effets sur les réflections multiples d'Andreev sont observés. Techniquement, nous utilisons le formalisme de Keldysh et une approche de champs moyens pour traiter l'interaction coulombienne.

Bruit dans une fourche "nanotube de carbone-métal" : nous étudions le bruit en régime photo-assisté dans un système composé d'un nanotube de carbone de longueur finie couplé en son centre à un métal normal. Les corrélations de courant montrent les effets de l'interaction coulombienne dans le nanotube ainsi que les marches caractéristiques du régime photo-assisté.

Table des matières

Résumé iii

Abréviations ix

1 Introduction générale 1
1.1 Les thèmes . . . 2
1.1.1 CNT-SQUID . . . 2
1.1.2 Transition cohérent-incohérent dans le courant . . . 3
1.1.3 Nanotube de carbone et bruit . . . 4
1.2 L'organisation . . . 5

I Signature du CAR dans un SQUID 7

2 Introduction aux jonctions π 9
2.1 Avant-propos . . . 9
2.2 Courant Josephson et jonction π . . . 10
2.3 Deux points quantiques . . . 13

3 Fonction de partition du SQUID 17
3.1 Les contacts supraconducteurs . . . 17
3.2 Hamiltonien Tunnel . . . 19
3.3 Le modèle d'impureté (point quantique) . . . 21
3.4 Courant Tunnel . . . 21
3.5 Fonction de partition de la jonction . . . 23
3.6 Transformation de Hubbard-Stratonovich . . . 25
3.7 Cas général avec flux interne . . . 26
3.8 Equation de Gap dans une jonction simple . . . 26

4 Diagrammes de phases, doublement de période 29
4.1 Deux points indépendants . . . 29
4.2 Contacts ponctuels et doublement de période . . . 30
4.3 Points d'injections séparés . . . 32
4.4 Résumé . . . 33

II Signature du MAR **35**

5 Introduction au MAR **37**
5.1 Le transport cohérent et incohérent . . . 37
5.1.1 L'explication de Thouless sur la transition cohérent-incohérent . . 38
5.2 Réflections multiples en théorie hamiltonienne . . . 40
5.3 Quelques travaux sur le MAR . . . 41

6 Transport hors-équilibre et MAR **43**
6.1 Modèle hamiltonien . . . 43
6.2 Action générale et espace de Nambu-Keldysh . . . 44
6.2.1 Une question de notation . . . 46
6.3 Courant . . . 47
6.4 Formule finale du courant pour le numérique . . . 49
6.4.1 Interaction coulombienne . . . 50

7 Résultats numériques MAR **53**
7.1 Système sans interaction coulombienne . . . 53
7.1.1 Vérifications sans le contact normal . . . 53
7.1.2 Signature de la transition incohérent-cohérent dans les harmoniques 54
7.1.3 Sur les harmoniques . . . 54
7.1.4 La représentation amplitude-phase . . . 55
7.2 Description du déphasage en fonction de Γ_N et Γ_S . . . 57
7.3 Interaction coulombienne . . . 58
7.3.1 Courant DC . . . 58
7.3.2 Première harmonique sans le contact normal $\Gamma_N = 0$ . . . 60
7.3.3 Première harmonique avec $\Gamma_N \neq 0$ . . . 61
7.4 Résumé . . . 61

III Liquide de Luttinger : bruit **63**

8 Nanotube de carbone et STM **65**
8.1 Avant-propos . . . 65
8.2 Le bruit . . . 65
8.3 Le bruit, caractérisation de charges anormales . . . 66
8.4 Quelques mots sur la bosonisation . . . 68
8.5 Le modèle . . . 70
8.6 Bruit en présence de contacts métalliques . . . 72
8.6.1 Calcul perturbatif du bruit . . . 72
8.7 Conclusion . . . 78
8.7.1 Les marches de $\partial_V S$ . . . 78

9 Conclusion générale **81**

A Fonction de partition et états cohérents **83**
A.1 Dérivation . . . 85

A.2 Intégration 85
A.3 L'identité 87
A.4 La trace 88
A.5 Fonction de partition en intégrales de chemins 89

B Conventions sur les fréquences de Matsubara 93

C Intégration des contacts 95

D Transformation de Hubbard-Stratonovich 99

E La matrice M 101
E.1 Deux impuretés en présence d'un flux intérieur 101
E.2 Distance d'injection quelconque 106

F Méthode du col 109

G Fonctions de Green des supraconducteurs 111
G.1 La fonction "f" du CAR 112
G.2 Calcul de la fonction "g" du *cotunneling* 115

H La coupure dans la fonction de *cotunneling* 117

I Introduction des tensions dans les amplitudes Tunnel 121

Bibliographie 125

Abréviations

BCS	**B**ardeen **C**ooper **S**chrieffer
CAR	**C**ross **A**ndreev **R**eflections
h.c.	**h**ermitien **c**onjugué
MAR	**M**ultiple **A**ndreev **R**eflections
S/QD/S	**S**uperconductor / **Q**uantum **D**ot / **S**uperconductor
SQUID	**S**uperconducting **Q**uantum **I**nterference **D**evices
STM	**S**canning **T**unneling **M**icroscope

Chapitre 1

Introduction générale

Le cadre de cette thèse est l'étude théorique de quelques phénomènes intervenant à l'échelle nanoscopique. Les phénomènes y sont régis par la mécanique quantique mais font intervenir un grand nombre de particules. Dans ce cas, la théorie des champs appliquée à la physique statistique devient un outil approprié où les paradigmes de la physique des particules donnent une base solide pour la matière condensée. Dans cette thèse, on profitera ainsi de la formulation de la mécanique quantique en termes d'intégrales de chemins pour calculer une énergie libre à l'équilibre thermodynamique ou bien une fonction de partition en utilisant un contour temporel fermé (contour de Schwinger-Keldysh).
Avec un grand nombre de particules et des interactions fondamentales comme l'interaction coulombienne, il n'est pas possible en général de calculer des quantités mesurables comme le courant électrique. Les modèles utilisés sont ainsi, pour la plupart, des hamiltoniens effectifs qui ont permis de dégager les caractéristiques essentielles intervenant à l'échelle nanoscopique.
Quelles sont alors ces caractéristiques nanoscopiques dont on veut une modélisation ? Prenons par exemple le phénomène de supraconductivité ; plusieurs thèmes y sont associés comme une résistance nulle (c'est-à-dire une résistance non-mesurable par des méthodes conventionnelles), l'effet Meissner (champ magnétique nul à l'intérieur du supraconducteur), transition de phase, etc.
On peut dire que les phonons jouent un rôle essentiel dans la supraconductivité, pourtant, si l'on veut décrire certaines courbes expérimentales, par exemple une caractéristique courant-tension dans une jonction $S/I/S$ (supraconducteur/isolant/supraconducteur), il s'est avéré suffisant d'utiliser un modèle ne tenant compte que des électrons avec une interaction *ad hoc*. Ces modèles historiques constituent la base ou les axiomes de cette thèse en électronique moléculaire. Le principe général est le suivant : on part des modèles hamiltoniens et on trouve une expression pour le courant ou le bruit ; suivant le cas, il est plus simple de calculer l'énergie libre pour ensuite prendre sa dérivée par rapport à un certain paramètre, de faire intervenir une fonction génératrice, d'utiliser une équation continuité, etc. Le cadre théorique que l'on se donne est la théorie des champs appliquée

à la matière condensée. Notre but est alors essentiellement de décrire, d'étudier de manière générale des nano-systèmes qui sont déjà réalisables expérimentalement ou bien, réalisables en principe dans un avenir que l'on espère toujours le plus proche possible. La théorie des champs est ici utilisée en tant qu'outil et n'est pas l'objet d'étude de cette thèse, ce qui nous pousse à mettre la majeure partie de la théorie et des calculs techniques en annexe dans le but de faciliter la lecture du manuscrit.
Nous allons aborder trois types de conducteurs (les supraconducteurs, les métaux normaux et les nanotubes de carbone) à travers trois thèmes.

1.1 Les thèmes

1.1.1 CNT-SQUID [1]

Pour mesurer le courant passant à travers un objet nanoscopique, il faut le connecter à un circuit de mesure par des "contacts". On utilisera dans ce manuscrit deux types de contacts : métalliques et supraconducteurs.
La théorie des contacts métalliques est déjà assez bien connue et décrite par un gaz libre d'électrons (bien entendu, la dimensionalité du conducteur et l'interaction coulombienne n'est cependant pas un problème trivial dans un conducteur métallique).
On caractérise généralement la supraconductivité par une résistance nulle en dessous d'une température critique $T_c \approx 4.2$K pour le mercure (Onnes 1911). Mais la supraconductivité ne se résume pas à un conducteur parfait. Si l'on applique un faible champ magnétique (la supraconductivité est détruite pour un champ magnétique critique qui est par définition le plus petit champ magnétique qui détruit la supraconductivité), le champ magnétique à l'intérieur du supraconducteur est nul (effet Meissner, 1933). Cette effet est particulièrement spectaculaire dans une expérience où l'on place un aimant sur un supraconducteur : au-dessus de la température critique, l'aimant repose sur le supraconducteur ; en dessous de la température critique, l'aimant lévite au-dessus du matériau supraconducteur.
L'effet Josephson constitue une part importante des applications de la supraconductivité. Si l'on prend deux supraconducteurs séparés par une couche d'isolant d'une épaisseur de l'ordre de 10Å, un courant peut passer à travers la jonction, alors qu'on est à l'équilibre. En utilisant une boucle contenant deux jonctions Josephson, on peut observer des interférences dûes aux deux chemins possibles que peuvent suivre les électrons. Le courant dépend alors du flux magnétique passant dans la boucle ; le système est alors appelé SQUID (voir le graphe 2.4 pour un SQUID utilisant un nanotube de carbone), et en particulier, le courant critique permet de détecter les faibles variations du flux. Dans la course à la miniaturisation, par exemple, il est désormais envisagé d'étudier la magnétisation de molécule Mn_{12} [1].
D'un point de vue théorique, dans les expériences de Cleuziou *et al.* [1], il est montré

1. Carbone NanoTube-Superconducting QUantum Interference Device

que le signe du courant dans chaque branche du SQUID dépend de la parité du nombre d'occupation dans les points quantiques (qui sont ici les portions de nanotube entre les contacts supraconducteurs) : si le nombre d'occupation est impaire le courant est déphasé de π (ce qui correspond à un courant Josephson négatif). Ce comportement provient alors de l'interaction entre le spin de l'électron du point quantique et le spin de électron arrivant sur ce point quantique. Un scénario a été donné par Kivelson et Spivak [2] où ce déphasage de π est dû aux relations d'anticommutation que les électrons doivent satisfaire. On [3] peut également voir ce comportement en termes d'un champ moyen qui est différent de zéro quand on a effectivement le déphasage de π dans le courant ; nous adopterons ce point de vue.
Dans la première partie de cette thèse, la motivation est donc double : d'un point de vue "technologique", on souhaite décrire le SQUID de nanotube de [1], mais aussi certaines de ses variantes. D'un point de vue théorique, nous voulons discuter plus précisément des corrélations électroniques liées à la supraconductivité, qui seraient peut-être plus facilement visibles (ou pas) dans ce type nano-SQUID, nous permettant de progresser dans la compréhension de la théorie et des méthodes utilisées.

1.1.2 Transition cohérent-incohérent dans le courant

Prenons une jonction composée de deux contacts métalliques séparés par une fine couche d'isolant ; si on applique une différence de potentiel entre les deux contacts, le courant passe par effet tunnel à travers la jonction et suit une loi d'Ohm. Si on remplace les métaux par des supraconducteurs, il n'y a pas de courant avant une tension V telle que $eV = \Delta$ où Δ est le gap. En faisant varier la température, on s'apperçoit que le gap dépend de la température : le gap est nul à la température critique ($\Delta(T_c) = 0$) et augmente jusqu'à obtenir une valeur maximale à une température nulle. Toutefois, si l'isolant est remplacé par un métal ou un point quantique, un courant peut passer dans la jonction grâce à des réflexions (d'Andreev) entre les bornes supraconductrices. On est ainsi dans un régime que l'on dit *cohérent* (cohérence de phase des paires de Cooper) où l'on voit les effets de la supraconductivité dans le courant.
Maintenant, si on met un réservoir (par exemple métallique) sur le "chemin" qu'empreinte les électrons (voir la figure 6.1), les électrons devraient perdre leurs cohérences dans ce réservoir (régime *incohérent*). Le contact métallique devrait ainsi détruire la cohérence de phase dans la jonction principale $S/QD/S$ par ce qu'on appelle un *effet de proximité inverse* (par opposition à l'*effet de proximité* qui induit de la supraconductivité dans un matériau qui n'est pas supraconducteur).
Par l'étude du courant, on souhaite ainsi caractériser ces deux régimes de transport et voir comment l'effet de *proximité inverse* se manifeste dans le courant.

1.1.3 Nanotube de carbone et bruit

Dans la dernière partie de cette thèse, à travers la thématique du bruit, on étudiera un objet mésoscopique ubique : le nanotube de carbone. Jusqu'à présent, nous n'avons étudié que le courant pour caractériser nos jonctions nanoscopiques. Il existe toutefois d'autres possibilités d'études données par les corrélations de courant. En particulier, définissons le bruit par la transformée de Fourier de la valeur moyenne $\langle I(t)I(0)\rangle$ où $I(t)$ est le courant au temps t :

$$S(\omega) = \int dt\ e^{i\omega t}\langle I(t)I(0)\rangle. \tag{1.1}$$

La relation entre cette fonction de corrélation et le courant n'est pas évidente mais, dans certains cas donne quelques résultats surprenants. Un exemple connu est celui donné par Schottky qui montre en 1918 que le bruit associé à un courant constant I d'électrons est proportionnel à ce même courant par la relation

$$S = 2e|I|. \tag{1.2}$$

Un autre résultat plus surprenant est celui obtenu pour les états de bords dans le régime de l'effet Hall quantique fractionnaire où on a $S/2I = e/3$ [4], caractérisant les excitations fractionnaires dans le courant de rétrodiffusion. L'interprétation donnée aux relations du type *Schottky* est que le rapport $S/2I$ nous donne sous certaines conditions [2] la charge effective caractérisant le courant.
Considérons maintenant un système dont le courant dépend également de la position $I(x,t)$ (pour fixer les idées, on peut penser x comme la coordonnée spatiale sur un nanotube qui est ici unidimensionnel, voir la figure 8.1). On peut alors calculer les corrélations de courant $C(x,t;x',t') \sim \langle I(x,t)I(x',t')\rangle$ [3] et en prendre la transformée de Fourier à $x' = x$ ce qui définit le bruit ou bien, on peut calculer ces corrélations à $x' = -x$ définissant ainsi les corrélations croisées. Pendant un temps, le signe des corrélations semblait alors caratériser la statistique des excitations transmises (fermioniques ou bosoniques), toutefois on peut montrer [5, 6] que cette interprétation n'est pas indépendante du système expérimental ; d'une manière générale, le bruit théorique n'est pas nécessairement le bruit mesuré. Nous allons dans cette thèse aborder la question de la charge des excitations, en considérant l'injection d'électrons dans un nanotube de carbone ; il est en principe possible [7] de caractériser les charges des excitations dans le nanotube par une analyse du bruit à fréquence finie pour une tension constante, mais ceci impose certaines contraintes expérimentales. Pour essayer de se ramener à un bruit à fréquence nulle, on introduit une composante alternative dans la tension (régime photo-assisté). Le résultat sera négatif pour la détection de charge à fréquence nulle, mais le bruit montrera des

2. Dans beaucoup de cas la relation de Schottky nous donne bien la charge effective mais pour les liquides de Luttinger, ce n'est pas nécessairement vrai ; elle donne cependant de précieuses indications sur ce qui se passe dans le système.

3. Comme on le verra dans la suite, il y a des corrections dans l'expression des corrélations, mais elles seront toujours négligées devant $\langle I(x,t)I(x',t')\rangle$.

effets directs du régime photo-assisté ainsi que les effets du paramètres d'interaction coulombienne.

1.2 L'organisation

Puisque les thèmes abordés dans cette thèse ont des motivations relativement indépendantes, chacun bénéficie d'une introduction spécifique au sujet, puis est suivi d'une partie théorique et se termine par une présentation de nos résultats numériques.

- Le premier thème concerne la modélisation théorique du SQUID de nanotube de carbone. La théorie des jonctions du type supraconducteur/point quantique/supraconducteur permettait d'obtenir le courant Josephson et d'autres caractéristiques propres à ce type de jonction. En généralisant à deux points quantiques, une nouvelle problèmatique concernant les corrélations entre systèmes apparaît naturellement dans la théorie ; les supraconducteurs sont une source de (quasi)-particules corrélées et dans des géométries en forme de fourche, différents phénomènes ont été identifiés (*cotunneling*, réflexions d'Andreev croisés). Ainsi, l'étude théorique de ce type de jonction permettra d'étudier les relations entres ces phénomènes de corrélations et ceux qui sont propres à des jonctions simples $S/QD/S$. Ces notions sont présentées dans le chapitre 2.
- Nous décrirons la théorie générale au chapitre 3 dont les cas particuliers sont par exemple la jonction simple $S/QD/S$ selon Rozhkov et Arovas [3] ou le SQUID de Cleuziou *et al.* [1]. Enfin les résultats numériques seront présentés au chapitre 4.
- Au chapitre 5, on introduit le sujet de la transition entre un régime de transport cohérent et incohérent dans une jonction $S/QD/S$ que l'on couple à une réservoir métallique.
- Puis nous abordons la théorie du transport hors-équilibre à-la-Keldysh au chapitre 6 où l'on établit les équations spécifiques à notre système que l'on résoud ensuite numériquement. Les résultats numériques sont alors présentés au chapitre 7.
- Au chapitre 8, on introduit la thématique de la détection de charge anormale qui motive la géométrie utilisée : nous étudions un nanotube de longueur L connecté à ses extrémités à des bornes métalliques et en son centre à la pointe d'un microscope à effet tunnel. Ce dernier chapitre fait une excursion dans la physique du bruit et permet d'obtenir quelques renseignements sur le régime photo-assisté (une tension alternative comme source de courant) et sur le paramètre d'interaction coulombienne dans le nanotube.

Les annexes regroupent les parties jugées techniques ou purement calculatoires.

- L'annexe A présente une introduction aux états cohérents et à l'écriture de la fonction de partition en termes d'intégrales de chemins. Une fois les principaux résultats énoncés, on donnera directement le résultat du passage des hamiltoniens en opérateurs à l'action en variables de Grassmann.

- L'annexe B regroupe les conventions prises sur les transformées de Fourier des champs *grassmanniens*.
- L'annexe C montre la façon dont on "intègre sur les contacts", autrement dit, on montre comment calculer une intégrale gaussienne de la forme $e^{-a\psi^2+b\psi}$ sur des champs grassmanniens ψ.
- L'annexe D décrit une façon de passer d'une interaction quartique à une interaction quadratique en utilisant une transformation de Hubbard-Stratonovich. Cette transformation permet par exemple, en principe de passer d'un problème d'interactions quartiques fermioniques à un problème d'intégrales sur des champs réels. En particulier, si le champ est constant après une méthode du col décrite en annexe F, on fait alors une approximation de type "champs moyens".
- L'annexe E regroupe les calculs amenant à l'écriture de la matrice $\mathcal{M}$ qui contient toute l'information sur le SQUID de nanotube de carbone qui est le premier sujet abordé dans cette thèse. L'écriture de cette matrice est la dernière étape avant le travail numérique.
- L'annexe G décrit le calcul de la fonction de Green d'un supraconducteur à l'équilibre.
- L'annexe H montre la façon dont on détourne la difficulté d'un problème de divergence dans une composante de la fonction de Green du supraconducteur à l'équilibre.
- L'annexe I contient la transformation unitaire qui permet de placer les potentiels chimiques d'un problème hors-équilibre dans les amplitudes Tunnel.

Première partie

Signature du CAR dans un SQUID

Chapitre 2

Introduction aux jonctions π

2.1 Avant-propos

Dans cette première partie, on étudie la transition de phase π se produisant dans une jonction supraconducteur/deux points quantiques/supraconducteur (pour plus de légèreté, on parlera de jonction S/2QD/S). Le formalisme utilisé permet ici essentiellement d'obtenir l'énergie libre F du système. A partir de la fonction F calculée numériquement, on peut obtenir le courant Josephson, leurs nombres moyens d'occupation et des diagrammes de phases.
Pour ce faire, on suit principalement l'article de Rozhkov et Arovas [3] dans lequel ils étudient le courant Josephson d'une jonction S/QD/S avec l'énergie libre du système. Comme eux, on utilise une approximation (sur les champs de Hubbard-Stratonovich) afin de la calculer sans faire appel à des algorithmes de calculs exacts d'intégrales de chemins. Les champs de Hubbard-Stratonovich ainsi approximés sont alors classiques (au sens où il n'y a qu'un seul chemin contribuant aux intégrales de chemins) et obéissent à une "équation de mouvement".
Durant ce travail, notre attention a été particulièrement tournée vers l'élaboration expérimentale (Cleuziou *et al.* [1]) d'un SQUID à nanotubes de carbone (voir la figure 2.4). Dans cette expérience, les nanotubes ont des niveaux d'énergies suffisamment séparés pour être considérés comme des points quantiques. Les calculs que nous avons effectués donneraient alors une description théorique d'un tel SQUID en partant d'un modèle microscopique du courant Josephson et de la jonction π (on peut citer Duhot et Mélin [8] pour une approche différente des expériences de Cleuziou *et al.* [1]). Les courbes expérimentales du courant critique apportent en particulier une preuve de la transition π et nos calculs permettent de retrouver qualitativement les courbes de la figure 2.4. Cependant, ce SQUID n'est qu'un cas particulier du modèle général utilisé ici. Nous avons remarqué que, pour des contacts ponctuels, le courant critique (en tant que fonction du flux magnétique intérieur à la boucle du SQUID) voit sa période doubler par rapport à la période d'oscillation obtenue sans effets d'Andreev croisés (acronyme

anglais : CAR) ; ce doublement de période n'est pas visible dans l'expérience de Cleuziou *et al.* [1] qu'on décrit par d'autres limites dans le modèle. On montre ici que ce doublement de période a pour cause directe le CAR qui est l'un de deux effets typiques des jonctions supraconductrices en forme de fourche : les réflections croisées d'Andreev et le "cotunneling".
Pour des contacts non ponctuels, la question est délicate et pose le problème de savoir si les distances considérées ne sont pas si petites qu'elles donneraient des absurdités dans un modèle mésoscopique. Les difficultés se traduisent ainsi : pour des contacts ponctuels, les quantités semblent bien définies ; mais pour des contacts étendus, lorsque l'on prend la limite vers le modèle de contacts ponctuels, la quantité reliée au *cotunneling* diverge. Mathématiquement, le supraconducteur (par sa fonction de Green) implique de devoir calculer les moments d'une distribution de Cauchy (ou de Lorentz), distribution n'ayant ni moyenne ni moments d'ordre supérieur. Le modèle général (inspiré par l'hamiltonien Tunnel de Choi *et al.* [9]) utilisé ici ne donne alors pas de manière continue, le modèle de contact ponctuel et pourrait demander plus de justifications, voir être remis en cause. L'accord qualitatif et expérimental avec Cleuziou *et al.* [1] n'est donné que pour des limites bien définies où la divergence du "cotunneling" est contournée.
Enfin, on propose une équation donnant la température critique de la transition π qui n'a cependant pas été étudiée plus en détail.

2.2 Courant Josephson et jonction π

En physique mésoscopique, un intérêt particulier se porte sur les interfaces entre différents types de conducteurs (métaux, supraconducteurs, nanotubes de carbone, matériaux ferromagnétiques, etc). En effet, plusieurs observables comme le courant, la conductance ou le bruit permettent d'étudier certaines de leurs caractéristiques. Suite à la théorie microscopique de la supraconductivité BCS selon Bardeen, Cooper et Schrieffer de 1957, une intense activité de recherche a permis d'élaborer assez rapidement une théorie du transport Tunnel (Cohen *et al.* [10] 1962) à travers une jonction $S/I/S$ (supraconducteur/isolant/supraconducteur). En 1962, Josephson mettait en avant la possibilité d'obtenir un courant à l'équilibre en déphasant les supraconducteurs. La théorie du transport Tunnel permettait d'obtenir les coefficients intervenant dans la formule de Josephson, à partir d'une théorie microscopique.
Les jonctions du type supraconducteur/impureté magnétique/supraconducteur ont été discutées dès 1969 avec Shiba et Soda, en passant par Glazman et Matveev en 1989 [11]. Les impuretés dans les matériaux réels peuvent engendrer une forte répulsion coulombienne entre deux électrons occupant un même niveau d'énergie. Il y a alors une distinction importante entre le courant hors-équilibre porté majoritairement par le passage individuel d'électrons et le courant Josephson d'équilibre mettant en jeu le passage d'une paire d'électrons corrélés. Dans ce cas, en 1992, Kivelson et Spivak [2] démontraient la possibilité d'une inversion du signe du courant Josephson (voir la figure 2.1) qui était

déjà discutée depuis la fin des années 70. En outre, ce changement de signe du courant peut se voir comme un déphasage de π du courant Josephson (qui est typiquement une fonction sinusoïdale) et on parlera alors de jonction π (jonction 0 quand il n'y a pas de déphasage). A la figure 2.1, on peut voir que l'impureté doit être occupée une fois

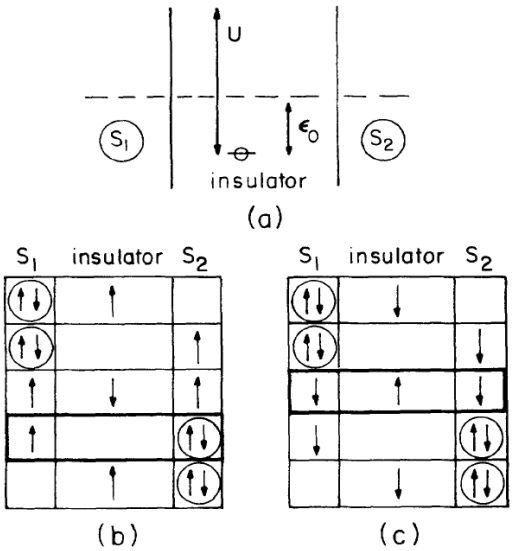

FIGURE 2.1: (a) Représentation de Kivelson et Spivak [2] d'une jonction S/I/S où l'isolant peut contenir un état localisé de niveau d'énergie ϵ_0 en présence d'une forte interaction coulombienne U. (b) Représentation de la séquence d'états intermédiaires menant au transfert d'une paire de Cooper du contact S_1 au contact S_2 dans le cas où l'impureté a un spin $\uparrow$. La boîte du haut représente l'état initial. Le premier état intermédiaire consiste à passer l'électron de l'impureté dans S_2. Ensuite, un électron de la paire de Cooper de S_1 passe dans l'impureté. Cette électron est nécessairement de spin $\downarrow$ afin de pouvoir reformer une paire de Cooper dans S_2 à l'étape suivante qui est encadrée. A cette étape l'électron de l'impureté passe dans S_2 mais pour retrouver l'ordre initial, il est nécessaire de permuter les deux électrons. Le signe du courant est alors négatif. Après cette étape, on retrouve l'état initial de l'impureté. (c) Même représentation qu'en (b) des états intermédiaires en faisant attention à l'état initial de l'impureté qui a maintenant un spin $\downarrow$. On a également une permutation de deux électrons dans cette séquence conduisant à un signe négatif.

pour donner le mécanisme d'inversion de signe. Cette occupation dépend des paramètres Γ (paramètre de transmission Tunnel), U (interaction coulombienne) et ϵ_0 (énergie dans l'impureté). L'étude simultanée de tous ces paramètres est réalisée par Rozhkov et Arovas [3] et la méthode utilisée, qui est non perturbative en Γ, permet de voir le phénomène de jonction π comme une transition de phase. Cependant, la méthodologie avait été proposée en 1959 par Hubbard [12] qui envisageait l'application d'un certaine transformation (de Hubbard-Stratonovich) à des cas de transitions de phase. Dans le formalisme d'intégrales de chemins, cette transformation permet ainsi de traiter de la même manière la transition "métal-supraconducteur" (voir par exemple [13]) dans le modèle de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) et la transition "jonction 0 - jonction π".

Dans les travaux de Rozhkov et Arovas [3], les interactions coulombiennes dans le point quantique sont alors caractérisées par le paramètre γ^* qui apparaît naturellement avec

la transformation de Hubbard-Stratonovich : soit $\gamma^* = 0$ et la fonction est dans la phase 0, soit $\gamma^* \neq 0$ et la jonction est dans la phase π. Pour ne pas entrer dans le détail des calculs qu'on repousse au prochain chapitre, on peut comprendre le rôle de γ^* en faisant l'analogie avec le cas d'un supraconducteur BCS de gap Δ où l'on a $\Delta = 0$ pour la phase métallique et $\Delta \neq 0$ pour la phase supraconductrice. Le gap Δ et le paramètre γ^* de la jonction π doivent satisfaire leurs équations de consistance qui ont une solution triviale égale à zéro qui minimise l'énergie libre alors que pour certaines valeurs des paramètres du système, il existe des solutions non nulles qui minimisent l'énergie libre. Ces paramètres qui interviennent dans la jonction $S/QD/S$ sont l'énergie du point quantique, l'intensité de l'interaction coulombienne U, le gap des supraconducteurs Δ et le coefficient de transmission Γ (qui n'est pas restreint à être petit). En général, on trace le courant en fonction de la phase (Josephson), notée δ dans [3] (notée ϕ dans notre travail).

On peut alors caractériser la jonction π de trois manières :

1. un signe négatif du courant Josephson pour une phase δ dans l'intervalle $]0, \pi[$
2. le paramètre γ^* non nulle minimisant l'énergie libre
3. une impureté occupée en moyenne une fois.

La première et la deuxième caractéristiques peuvent servir à définir la jonction π. La troisième caractéristique donne seulement une condition nécessaire d'après notre diagramme de phase (voir la figure 4.1 où l'on peut trouver une région occupée une fois mais qui ne correspond pas à une phase π).

Dans [3], on définit en plus deux autres phases $0'$ et π'

1. la jonction est dans la phase $0'$ si le minimum global de l'énergie libre est en $\gamma^* = 0$ mais qu'il existe des minima locaux ailleurs
2. la jonction est dans la phase π' si le minimum global de l'énergie libre est en $\gamma^* \neq 0$ mais qu'il existe un minimum local en 0.

Ces définitions prennent leurs sens quand on étudie graphiquement l'énergie libre mais dans cette thèse, on a choisi de caractériser la jonction π par le signe du courant, ce qui rend inaccessible les subtilités des phases $0'$ et π' (puisque ce qui compte alors est seulement le minimum global). La figure 2.2 montre les trois caractérisations de la jonctions π en fonction du déphasage δ entre les deux contacts supraconducteurs.

Les résultats précédents supposent une température proche de zéro et ne traîtent pas de l'effet Kondo [1] ; l'impureté occupée une fois de manière marquée avec $U/\Gamma \gg 1$ et $-\epsilon_0/\Gamma \ll 1$ peut être considérée comme une impureté magnétique avec un spin 1/2 comme degré de liberté. Dans ce cas, d'après [15, 14], le comportement de la jonction est uniquement déterminée par Δ/T_K où T_K est la température Kondo et la transition de phase 0-π se fait sans la discontinuité à $T = 0$ K.

1. Quand le température diminue, on s'attend à ce que la résistance du matériau diminue également, mais en dessous d'une température T_K (température Kondo), la résistance se met à croître (effet Kondo). La supraconductivité quant à elle donne une résistance nulle en dessous d'une température critique et la question de la compétition entre les deux effets a donné lieu à de nombreuses études comme celle de Choi *et al.* [14] montrant que la supraconductivité domine l'effet Kondo pour $\Delta/T_K \ll 1$ avec une transition à $\Delta \sim T_K$.

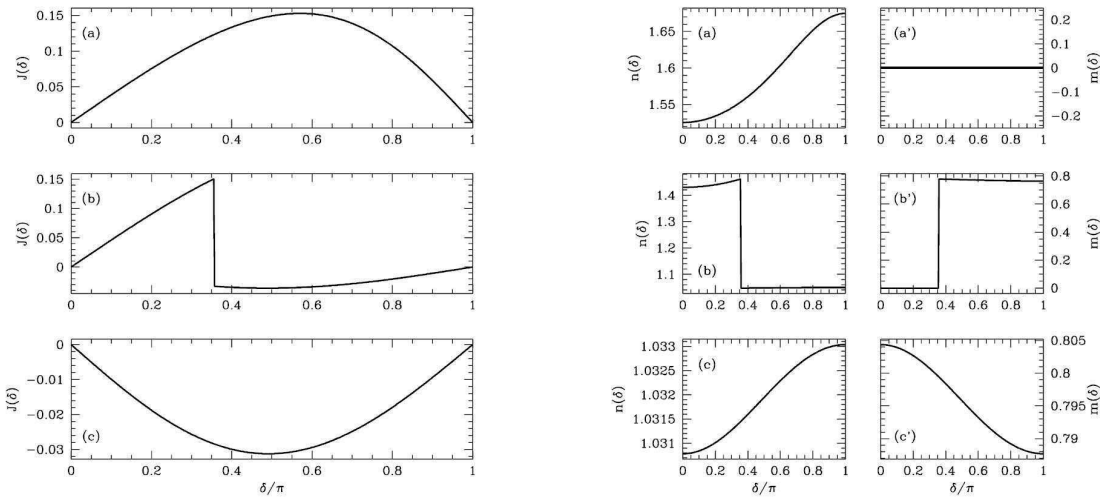

FIGURE 2.2: (Graphes provenant de [3]) A gauche : courant Josephson $J(\delta)$ en unités de $2e\Delta/\hbar$ en fonction de la phase Josephson δ. A droite : nombre moyen d'occupation $n(\delta)$ et aimantation $m = \gamma^*/U$ (où γ^* est le champ de Hubbard-Stratonovich dont la valeur est fixée par la méthode du col et U l'interaction coulombienne dans le point quantique) en fonction de la phase Josephson δ avec un niveau d'énergie dans le point quantique $\epsilon/\Delta = -2$ et un coefficient de transmission $\Gamma/\Delta = 1$ où Δ est le gap des supraconducteurs. En partant du haut et pour la première ligne, on a $U/\Delta = 2.1$, pour la deuxième $U/\Delta = 2.6$ et pour la troisième $U/\Delta = 2.9$.

2.3 Deux points quantiques

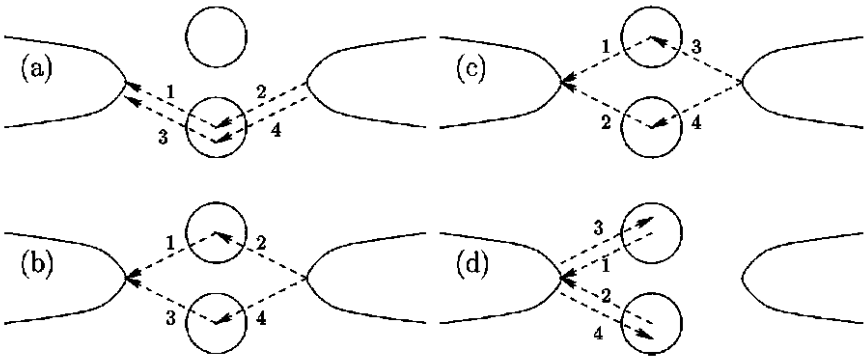

FIGURE 2.3: Liste partielle de [9] des processus virtuels dominants associés au transfert d'électrons en théorie perturbative à l'ordre quatre. Les flèches numérotées indiquent la direction et l'ordre dans lequel les charges sont transférées entre les supraconducteurs et les points quantiques (cercles) qui sont occupés une fois dans l'état fondamental ; l'occupation par un électron d'un point quantique est une condition nécessaire pour obtenir une jonction π. Les processus (a) et (b) sont du même ordre de grandeur et contribuent au transport direct d'électron.

Si le courant Josephson à travers une impureté est fortement affecté par les interactions coulombiennes (il n'y a pas de jonction π sans elles), la présence d'une deuxième impureté en parallèle conduit à de nouveaux processus. On est maintenant dans une géométrie de SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) qu'on a schématisé à la figure 3.1. Le transport de deux électrons d'une même paire de Cooper par le même

point quantique est nommé l'effet d'Andreev direct. Si on se place dans le formalisme d'intégrale de chemin, il correspond au transport de la jonction simple décrit par [3]. Mais on peut imaginer le transfert de deux électrons d'une même paire de Cooper sur deux points différents (effet d'Andreev croisé ou CAR) ou bien le transfert d'un électron d'une impureté à une autre (cotunneling). Dans les travaux de Choi *et al.* [9] en théorie perturbative en présence d'une forte interaction coulombienne dans les impuretés (l'impureté est alors occupée une fois dans son état fondamental), on peut établir une liste partielle des processus intervenant dans le courant Josephson (voir la figure 2.3). Le courant dépend alors du spin (l'hamiltonien effectif contient un couplage spin/spin) et devrait permettre de détecter la symétrie de la paire de Cooper (état singulet ou triplet) autrement dit, on peut distinguer les supraconducteurs conventionnels et non conventionnels.
Dans notre travail, puisque l'on traite de manière non perturbative le couplage Tunnel, on ne peut pas isoler les processus dominants et *a fortiori* identifier le CAR ou le *cotunneling* par des diagrammes similaires à la ceux de la figure 2.3. Toutefois, on trouve dans les travaux de Sauret *et al.* [16] des intégrales spécifiques correspondant à ces processus dans une géométrie en fourche du type supraconducteur/deux points quantiques/deux métaux. Ces intégrales nous permettent d'identifier les phénomènes mis en jeu alors qu'on ne dispose que de l'énergie libre. Notre travail sur le courant Josephson dans une jonction $S/2QD/S$ permet alors de caractériser le CAR et le *cotunneling* avec un couplage Tunnel non perturbatif.

Nous allons maintenant montrer que ces processus ont une signature particulière et se manifestent par un doublement de période du courant critique $I_c(\alpha)$ en fonction du flux magnétique α interne à la boucle du SQUID ; la phase des impuretés (0 ou π) permet d'amplifier ou non le phénomène. Théoriquement, on généralise à deux impuretés le formalisme utilisé par Rozhkov et Arovas [3]. Les deux impuretés peuvent subir une transition de phase 0-π et désormais, le *cotunneling* et le CAR jouent un rôle dans le courant Josephson. Du point de vue expérimental, le SQUID de nanotubes de carbone de Cleuziou *et al.* [1] permet déjà de comparer certains de nos résultats.

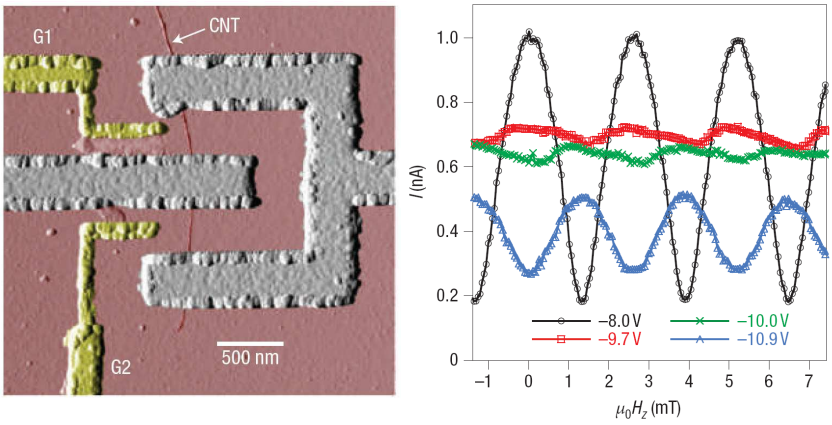

FIGURE 2.4: A gauche : SQUID de [1] constitué d'un nanotube de carbone (voir la flèche CNT) ; en gris, on peut voir les contacts supraconducteurs et en jaune les grilles permettant de jouer sur la parité du nombre d'occupation dans les points quantiques (qui sont ici les morceaux de nanotube entre deux contacts). A droite : courant critique en fonction du champ magnétique H_z interne à la petite boucle délimitée par le nanotube et les supraconducteurs, pour différentes valeurs de tensions de grille contrôlant les niveaux d'énergies (on favorise ou non un nombre d'occupation paire ou impaire d'un point quantique). Ils fixent la tension de grille à 12.5V dans un des points quantiques le plaçant ainsi dans l'état 0, puis font varier la tension de grille du deuxième point quantique (de la courbe noire à la courbe bleue) changeant ainsi son nombre d'occupation et ainsi l'état de la jonction. La courbe noire correspond alors à deux jonctions dans le même état 0. Les courbes rouges et vertes correspondent à la transition 0-π dans le deuxième point quantique. La courbe bleue correspond à une jonction 0 et une jonction π (le deuxième point quantique est désormais une jonction π).

Chapitre 3

Fonction de partition du SQUID

Ce chapitre contient les détails techniques relatifs à la fonction de partition qui permet d'obtenir le courant Josephson dans la jonction représentée à la figure 3.1. On part des hamiltoniens correspondant aux supraconducteurs, aux impuretés (ou points quantiques) et au couplage Tunnel. On utilise les états cohérents pour obtenir la fonction de partition en termes de variables de Grassmann. On peut alors simplifier le problème en intégrant sur les variables correspondant aux contacts supraconducteurs. Ceci nécessite ensuite de calculer la fonction de Green décrivant la jonction simple à une impureté mais également les fonctions décrivant le *cotunneling* et les effets d'Andreev croisés (CAR) (notées respectivement g et f). L'interaction coulombienne des points quantiques est traitée par une transformation de Hubbard-Stratonovich qui introduit des variables auxiliaires calculées en pratique par la méthode du col. On obtient alors la fonction de partition du système et une équation de consistance (provenant de la méthode du col). Les résultats numériques seront présentés au chapitre suivant.

3.1 Les contacts supraconducteurs

En physique mésoscopique, il est courant de décrire des contacts supraconducteurs j directement par l'hamiltonien

$$H_j = \sum_k \left(\sum_\sigma \xi_k c^\dagger_{jk\sigma} c_{jk\sigma} \right) + \Delta^* c^\dagger_{jk\uparrow} c^\dagger_{j,-k\downarrow} + \Delta c_{j,-k\downarrow} c_{jk\uparrow} \tag{3.1}$$

avec $\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$ où μ est le potentiel chimique dans le supraconducteur et $c_{jk\sigma}$ est l'opérateur fermionique d'annihilation du supraconducteur j pour un électron de vecteur d'onde k et de spin σ. Toutefois en partant d'un hamiltonien plus général, on peut mettre en place les outils théoriques nécessaires sur un exemple bien connu. La supraconductivité

met en jeu un couplage effectif entre électrons tel qu'on ait a priori

$$H_{\mathrm{S}} = \sum_{k,\sigma} \xi_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} - g A^\dagger A \tag{3.2}$$

avec $A = \sum_{k,|\xi_k|<\omega_D} c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$ et $A^\dagger = \sum_{k,|\xi_k|<\omega_D} c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow}$ où ω_D est la fréquence de Debye et g une constante de couplage. On montre (voir l'annexe A) que la fonction de partition $Z = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta H}$ peut s'écrire sous la forme d'intégrales de chemins sur des variables de Grassmann (pour le cas fermionique) avec des conditions aux bords antipériodiques, et des variables complexes pour des bosons et conditions aux bords périodiques. On peut résumer ainsi : à partir d'un hamiltonien $H(c^\dagger, c)$ écrit dans l'ordre normal (tous les opérateurs de création à gauche et d'annihilation à droite), l'action correspondante s'écrit

$$S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \bar{c}\partial_\tau c + H(\bar{c}, c)$$

avec $Z = \int \mathcal{D}(\bar{c}, c)\, e^{-S}$. L'ordre normal est important et intervient explicitement dans la construction de Z en intégrales de chemins. En utilisant cette prescription et en introduisant des champs auxiliaires $\bar{\Delta}$ et Δ d'une transformation de Hubbard-Stratonovich (voir l'annexe D), on obtient

$$Z = \int_{c(\beta)=-c(0)} \mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta, \bar{c}, c)\, e^{-\int \mathrm{d}\tau\ \frac{|\Delta|^2}{g}} \exp\left[-\int \mathrm{d}\tau \sum_k \begin{pmatrix} \bar{c}_{k\uparrow} & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \mathcal{G}_k^{-1}(\Delta, \bar{\Delta}) \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ \bar{c}_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \right].$$

avec

$$\mathcal{G}_k^{-1}(\Delta, \bar{\Delta}) = \begin{pmatrix} \partial_\tau + \xi_k & \Delta(\tau) \\ \bar{\Delta}(\tau) & \partial_\tau - \xi_k \end{pmatrix}.$$

Connaissant les intégrales gaussiennes sur des variables de Grassmann (voir l'annexe A), on peut intégrer sur $\bar{c}$ et c

$$Z \propto \int \mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta)\, e^{-S_{\mathrm{eff}}}$$

avec

$$S_{\mathrm{eff}} = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\, \frac{\bar{\Delta}\Delta}{g} + \sum_k \mathrm{Tr} \ln(\mathcal{G}_k^{-1})$$

où $\ln\det = \mathrm{Tr}\ln$. Le déterminant ne dépend pas de la base choisie et on choisit la base qui est utilisée dans la transformée de Fourier en termes de fréquences de Matsubara (voir l'annexe B pour les conventions)

$$\begin{aligned} \Psi_k(\tau) &:= \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}(\tau) \\ \bar{c}_{-k\downarrow}(\tau) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\omega_n \tau} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow n} \\ \bar{c}_{-k\downarrow n} \end{pmatrix} \\ \bar{\Psi}_k(\tau) &:= \begin{pmatrix} \bar{c}_{k\uparrow}(\tau) & c_{-k\downarrow}(\tau) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} \begin{pmatrix} \bar{c}_{k\uparrow n} & c_{-k\downarrow n} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ce type d'intégrale est évalué par la méthode du col [1] et donne une contrainte sur Δ qui est l'équation du gap si Δ est indépendant de τ. Si on note $\Delta = \Delta_1 - i\Delta_2$ la valeur de Δ qui satisfait à l'équation du gap (à la méthode du col en général), on a

$$\mathcal{G}^{-1} = \partial_\tau + \xi_k \sigma_z + \Delta_1 \sigma_x + \Delta_2 \sigma_y$$

où $\sigma_{x,y,z}$ sont les matrices de Pauli. De manière assez générale, le "gap" est complexe et en toute rigueur Δ peut dépendre du spin des électrons si l'appariement entre électrons est généralisé. La fonction Δ découple $A = \sum_{k,|\xi_k|<\omega_D} c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$ (voir l'annexe D) de sorte qu'on aurait dû écrire $\Delta_{\downarrow\uparrow}$ pour Δ. De même, $A^\dagger = \sum_{k,|\xi_k|<\omega_D} c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow}$ est découplé par $\bar{\Delta}_{\downarrow\uparrow}$. Mais l'interaction électron-électron n'est pas toujours sous la forme $-gA^\dagger A$ et il est nécessaire d'introduire des fonctions d'appariement $\Delta_{\sigma,\sigma'}(x, x', \tau)$ dont les diverses symétries amènent à des propriétés non conventionnelles de la supraconductivité. Dans notre étude, on suppose (conventionnellement) que le gap du contact supraconducteur j est complexe $\Delta_j = |\Delta_j| e^{i\phi_j/2}$ mais que la transformation unitaire définie par

$$U = \exp\left(\sum_j \frac{\phi_j}{4} \sum_{k,\sigma} c^\dagger_{jk\sigma} c_{jk\sigma}\right)$$

sur l'hamiltonien total permet de transférer la phase ϕ dans les amplitudes Tunnel ; la phase ϕ est alors la phase Josephson. On considère donc désormais que les amplitudes de transfert Tunnel sont déphasées (voir (3.4)) ce qui va permettre l'existence d'un courant d'équilibre (effet Josephson).

3.2 Hamiltonien Tunnel

L'hamiltonien Tunnel décrivant le couplage entre un supraconducteur j et une impureté a s'écrit de manière générale sous la forme

$$H_T^{ja} = \sum_{k,q,\sigma} T_{jqk} d^\dagger_{aq\sigma} c_{jk\sigma} + T^*_{jqk} c^\dagger_{jk\sigma} d_{aq\sigma}$$

où $d_{aq\sigma}$ est l'opérateur fermionique d'annihilation du point quantique a pour un électron de vecteur d'onde q. On suppose alors que les électrons concernés par l'effet tunnel ont des vecteurs d'ondes k proches du vecteur d'onde de Fermi k_F et une énergie ε_k proche de l'énergie de Fermi E_F. On considère alors souvent que l'amplitude de transition $T_{jqk}(\varepsilon_k)$ est indépendante de l'énergie de l'électron puisqu'on a $T_{jqk}(\varepsilon_k) = T(E_F + \delta E) \simeq T_{jqk}(E_F) + T'_{jqk}(E_F)\delta E$ avec typiquement $\delta E \simeq \Delta \simeq 1\text{meV}$. Donc, en général, l'amplitude Tunnel est définie à l'énergie de Fermi. De même que les vecteurs d'ondes k et q sont proches du vecteur d'onde de Fermi, on a aussi $T_{jqk} = T_{j,k_F+\delta k,k_F+\delta q} \simeq T_{j,k_F,k_F} +$

1. $I(\lambda) = \int_a^b \mathrm{d}x\, e^{-A(x)/\lambda} \approx \sqrt{2\pi/A''(x_c)} e^{-A(x_c)/\lambda}$ pour $\lambda \to 0^+$ et x_c minimum global de $A(x)$.

$\nabla_k T_{jkq}|_{k_F} \cdot \delta\mathbf{k} + \nabla_q T_{jkq}|_{k_F} \cdot \delta\mathbf{q}$. On choisit alors l'amplitude Tunnel constante par rapport à k et q :

$$H_T^{ja} = \sum_{k,q,\sigma} T_j d^\dagger_{aq\sigma} c_{jk\sigma} + T_j^* c^\dagger_{jk\sigma} d_{aq\sigma}.$$

Dans le cas de Cleuziou *et al.* [1], les niveaux d'énergies sont contrôlables ; on choisit ici de ne considérer qu'un seul état possible, éliminant ainsi la dépendance en q des variables $d_{aq\sigma}$. Si on fait la somme sur k, on a $\sum_k c_{jk\sigma} = c_{j\sigma}(x = 0)$. On souhaite maintenant regarder les effets non locaux qui interviennent lorsqu'on considère deux points d'injections précis r_1 et r_2 ; en suivant Choi *et al.* [9] on a donc $\sum_{k_j} e^{ik_j \cdot r_{ja}} c_{jk\sigma} = c_{j\sigma}(x = a)$ qu'on introduit dans l'hamiltonien Tunnel. Il faut également décider quels sont les sauts possibles. Si on veut se rapprocher des expériences de Cleuziou *et al.* [1], il n'y a pas de saut Tunnel entre points quantiques de sorte que l'hamiltonien Tunnel du système est

$$H_T = \sum_{a=1,2} \sum_{j=L,R} H_T^{ja} = \sum_{j,k,a} T_j \ \mathrm{e}^{-ik\cdot r_{ja}} (d^\dagger_{a\uparrow} c_{jk\uparrow} + d^\dagger_{\downarrow} c_{jk\downarrow}) + h.c. \tag{3.3}$$

avec

$$\begin{aligned} T_R &= t_R e^{i\phi/4} \\ T_L &= t_L e^{-i\phi/4} \end{aligned} \tag{3.4}$$

où ϕ est la phase Josephson. Pour la notation, il est pratique d'utiliser les spineurs de Nambu

$$\Psi_{jk} = \begin{pmatrix} c_{jk\uparrow} \\ c^\dagger_{j,-k\downarrow} \end{pmatrix} \quad d_a = \begin{pmatrix} d_{a\uparrow} \\ d^\dagger_{a\downarrow} \end{pmatrix} \tag{3.5}$$

pour écrire :

$$H_T = \sum_{a=1,2} \sum_{j,k} \left[e^{ik\cdot r_{ja}} \Psi^\dagger_{jk} \mathcal{T}_j d_a + e^{-ik\cdot r_{ja}} d^\dagger_a \mathcal{T}_j^\dagger \Psi_{jk} \right] \tag{3.6}$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_L &= t_L \begin{pmatrix} e^{i\phi/4} & 0 \\ 0 & -e^{-i\phi/4} \end{pmatrix} = t_L \sigma_z e^{i\sigma_z \phi/4} \\ \mathcal{T}_R &= t_R \begin{pmatrix} e^{-i\phi/4} & 0 \\ 0 & -e^{i\phi/4} \end{pmatrix} = t_R \sigma_z e^{-i\sigma_z \phi/4}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Si on part des variables de Grassmann à la place des opérateurs dans (3.3), on obtient les mêmes expressions. Ainsi, lors du passage aux états cohérents, le terme Tunnel aura la même expression (3.6), mais en termes de variables de Grassmann ; ceci est discuté dans l'annexe A.

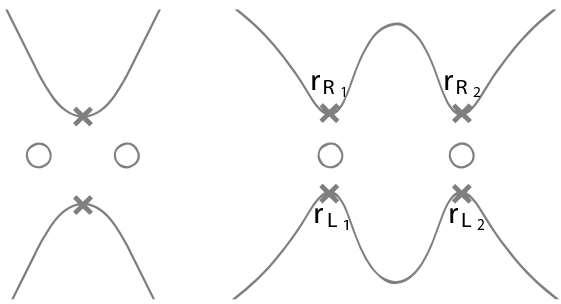

FIGURE 3.1: Représentations de la jonction supraconducteur/deux points quantiques/-supraconducteur. A gauche, modèle avec des contacts ponctuels où les points d'injections à partir des contacts supraconducteurs sont repérés par des croix ; à droite, les points d'injections sont différents et repérés par les vecteurs $\mathbf{r}_{j_a}$ avec $j = L, R$ et $a = 1, 2$; un cas particulier : le CNT-SQUID correspond à $|\mathbf{r}_{L_1} - \mathbf{r}_{L_2}| = 0$ et $|\mathbf{r}_{R_1} - \mathbf{r}_{R_2}|$ supérieur à la longueur de cohérence dans le supraconducteur.

3.3 Le modèle d'impureté (point quantique)

L'hamiltonien d'un point quantique "a" libre est donné par

$$H_D^a = \sum_{k\sigma} \epsilon_k d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma} + (e\hat{n} - Q_G)^2/2C$$

où $\hat{n}$ est l'opérateur du nombre d'occupation total dans le point quantique. Le premier terme est le terme cinétique dans l'impureté et le deuxième décrit l'énergie de charge. La charge $Q_G = CV_G$ est reliée à la tension de grille V_G par une capacité C. On étudie un modèle à un niveau d'énergie tel que $\hat{n} = n_\uparrow + n_\downarrow$ avec $n_\sigma = d_\sigma^\dagger d_\sigma$ donnant alors

$$\begin{aligned} H_D^a &= \sum_\sigma (\epsilon_\sigma - eV_G) n_\sigma + e^2/2C(n_\uparrow + n_\downarrow)^2 \\ &= \sum_\sigma (\tilde{\epsilon}_\sigma - \mu_G) n_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow \end{aligned} \tag{3.8}$$

avec $U = e^2/C$, $\tilde{\epsilon}_\sigma = \epsilon_\sigma + U/2$ et on pose $\mu_G = eV_G$.

3.4 Courant Tunnel

On veut étudier le courant Tunnel passant dans la jonction $S/2QD/S$ de la figure 3.1. L'hamiltonien total s'écrit

$$H = H_0 + H_T$$

où H_0 décrit les contacts supraconducteurs et les deux points quantiques. L'hamiltonien Tunnel est donné par (en oubliant pour l'instant les déphasages $e^{ik\cdot r}$)

$$H_T = \sum_{a,j,k,\sigma} T_j c_{jk\sigma}^\dagger d_{a\sigma} + h.c.$$

Dans la théorie du transport Tunnel où l'on considère que les contacts sont deux régions bien distinctes, les relations de commutations sont

$$\{c^\dagger_{jk\sigma}, c_{j'k'\sigma'}\} = \{c_{jk\sigma}, c_{j'k'\sigma'}\} = 0 \tag{3.9}$$

pour $j \neq j'$ et les relations canoniques habituelles pour les électrons, si $j = j'$. Dans le calcul du courant, on travaille avec l'hamiltonien réduit décrivant un supraconducteur qui ne conserve pas le nombre de particule [2]

$$H_j = \sum_{k\sigma} \xi_k c^\dagger_{jk\sigma} c_{jk\sigma} + \Delta^* c^\dagger_{jk\uparrow} c^\dagger_{j,-k\downarrow} + \Delta c_{j,-k\downarrow} c_{j,k\uparrow}.$$

Le courant tunnel est cependant donné par

$$i\hbar\partial_t N_j = [H_T, N_j]$$

avec $N_j = \sum_{k\sigma} c^\dagger_{jk\sigma} c_{jk\sigma}$ (les opérateurs sont écrits dans la représentation de Heisenberg). Ceci donne directement l'opérateur courant

$$I_j(t) = -e\partial_t N_j = \frac{ie}{\hbar} \sum_{a,k,\sigma} [T_j d^\dagger_{a\sigma}(t) c_{jk\sigma}(t) - T^*_j c^\dagger_{jk\sigma}(t) d_{a\sigma}(t)].$$

ou encore en utilisant (3.5) et (3.7) (en unités de $e/\hbar$)

$$I_j = i \sum_{a,k} \Psi^\dagger_{jk} \sigma_z \mathcal{T}_j d_a + h.c.$$

On introduit l'opérateur I de courant traversant la jonction de gauche à droite

$$I = \frac{1}{2}(I_L - I_R) = \frac{\partial}{\partial(\phi/2)} H_T.$$

En travaillant à l'équilibre, on a $\langle I_L \rangle = -\langle I_R \rangle$, et donc

$$\begin{aligned} \langle I \rangle &= Z^{-1} \mathrm{Tr} \left\langle e^{-\beta H} \frac{\partial}{\partial(\phi/2)} H_T \right\rangle \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial\phi} F \end{aligned}$$

avec $Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$ et l'énergie libre du système $F(\phi) = -\beta^{-1} \ln Z$. Le courant Josephson (désormais, noté I) peut donc se calculer à partir de l'énergie libre. Pour obtenir la fonction de partition, on va maintenant utiliser sa représentation en intégrales de chemins.

2. Il faut se référer aux travaux intenses des années 60 (par exemple [10]) sur la supraconductivité et le courant Tunnel où la question se pose par exemple de savoir si les termes supplémentaires dans le courant provenant de l'hamiltonien (3.2) sont importants ou non. En ce qui concerne le courant, l'approximation de champs moyens donnant l'hamiltonien (3.10) donne également le "bon courant". Dans le même état d'esprit (voir par exemple l'article de Prange [17]), les relations de commutations (3.9) ne sont pas immédiats. On a alors $i\hbar\partial_t N_j = [H, N_j] \approx [H_T, N_j]$.

3.5 Fonction de partition de la jonction

De la même manière qu'on a obtenu la fonction de partition d'un supraconducteur libre, on utilise la représentation de $Z = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta H}$ dans la base d'états cohérents (voir annexe A) amenant à une fonction de partition en fonction de variables de Grassmann avec des conditions aux bords anti-périodiques. L'action correspondant à l'hamiltonien (3.8) $H_D^a(d_{a\sigma}^\dagger, d_{a\sigma})$ s'écrit alors

$$S_D = \sum_a \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \bar{d}_{a\uparrow}\partial_\tau d_{a\uparrow} + \bar{d}_{a\downarrow}\partial_\tau d_{a\downarrow} + H_D^a(\bar{d}_{a\sigma}, d_{a\sigma})$$

avec

$$H_D^a(\bar{d}_{a\sigma}, d_{a\sigma}) = \tilde{\epsilon}_\alpha(n_{a\uparrow} + n_{a\downarrow}) + U_a n_{a\uparrow} n_{a\downarrow}$$

où $n_{a\sigma} = \bar{d}_{a\sigma} d_{a\sigma}$. En introduisant la notation $d_a = \begin{pmatrix} d_{a\uparrow} \\ \bar{d}_{a\downarrow} \end{pmatrix}$ et $\bar{d}_a = \begin{pmatrix} \bar{d}_{a\uparrow} & d_{a\downarrow} \end{pmatrix}$, l'action des impuretés s'écrit

$$S_D(\bar{d}_a, d_a) = \sum_a \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \bar{d}_a \partial_\tau d_a + \tilde{\epsilon}_a(\bar{d}_a \sigma_z d_a) - \frac{U_a}{2}(\bar{d}_a d_a)^2$$

avec la relation valable pour les variables de Grassmann

$$n_\uparrow n_\downarrow = -\frac{1}{2}(n_\downarrow - n_\downarrow)^2.$$

Avec les notations suivantes $\Psi_{jk} = \begin{pmatrix} \psi_{jk\uparrow} \\ \bar{\psi}_{j,-k\downarrow} \end{pmatrix}$ et $\bar{\Psi}_{jk} = \begin{pmatrix} \bar{\psi}_{jk\uparrow} & \psi_{j,-k\downarrow} \end{pmatrix}$, on rappelle ici l'action des supraconducteurs

$$S_S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \sum_{j,k} \overline{\Psi}_{jk}(\partial_\tau + \xi_k \sigma_z + \Delta\sigma_x)\Psi_{jk}\,.$$

La partie couplage provenant de l'hamiltonien tunnel (3.6) donne en termes de variables de Grassmann

$$H_T = \sum_a \sum_{j,k} \bar{\Psi}_{jk} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{aj}} \mathcal{T}_j d_a + \bar{d}_a \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{aj}} \mathcal{T}_j^\dagger \Psi_{jk}$$

et enfin la fonction de partition s'écrit

$$Z = \int \prod_{jk} \mathcal{D}\overline{\Psi}_{jk} \mathcal{D}\Psi_{jk} \prod_a \mathcal{D}\bar{d}_a \mathcal{D}d_a \mathrm{e}^{-S}, \quad \begin{matrix} \Psi_{jk}(0) = -\Psi_{jk}(\beta) \\ d_a(0) = -d_a(\beta) \end{matrix}$$

avec

$$S = S_D + S_S + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\, H_T.$$

Pour calculer Z, on peut commencer par intégrer (voir l'annexe C) sur les contacts (intégrer sur les variables ψ), ce qui donne une constante Z_S

$$Z = Z_S \int \prod_a \mathcal{D}\bar{d}_a \mathcal{D}d_a \ \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}}$$

avec

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{eff}} &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \ \sum_a \overline{d}_a(\tau)\left(\partial_\tau + \tilde{\epsilon}_a\sigma_z\right) d_a(\tau) - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \ \int_0^\beta \mathrm{d}\tau' \ \sum_{a,b} \overline{d}_a(\tau)\Sigma^{ab}(\tau-\tau')d_b(\tau') \\ &\quad - \sum_a \frac{U_a}{2}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \ (\bar{d}_a(\tau)d_a(\tau))^2 \end{aligned} \tag{3.10}$$

où on définit

$$\Sigma^{ab}(\tau) = \sum_{j,k} \mathcal{T}_j^\dagger \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ja}} G_k(\tau) \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jb}} \mathcal{T}_j$$

tel que G_k soit la solution de

$$(\partial_\tau + \xi_k\sigma_z + \Delta\sigma_x)G_k(\tau,\tau') = \delta(\tau'-\tau)\,.$$

On montre dans l'annexe G que

$$\begin{aligned} \Sigma^{11}_{\omega_n} &= \Sigma^{22}_{\omega_n} = \alpha_{\omega_n}\left[i\omega_n - \Delta\cos\frac{\phi}{2}\sigma_x - \gamma\Delta\sin\frac{\phi}{2}\sigma_y\right] \\ \Sigma^{12}_{\omega_n} &= \begin{pmatrix} \left[i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r)\right]\left(|t_L|^2+|t_R|^2\right) & -\Delta f_{\omega_n}(r)\left[|t_R|^2 e^{i\phi/2} + |t_L|^2 e^{-i\phi/2}\right] \\ -\Delta f_{\omega_n}(r)\left[|t_R|^2 e^{-i\phi/2} + |t_L|^2 e^{i\phi/2}\right] & \left[-i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r)\right]\left(|t_L|^2+|t_R|^2\right) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

avec $\omega_n = 2\pi\beta^{-1}(n+1/2)$, $\alpha_{\omega_n} = \frac{\pi\nu(0)(t_R^2+t_L^2)}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}$ et $\gamma = \frac{t_L^2-t_R^2}{t_L^2+t_R^2}$. Par la suite on pose $t_L = t_R := t$ et nous donne en particulier

$$\Sigma^{12}_{\omega_n} = \Sigma^{21}_{\omega_n}.$$

En pratique et a posteriori, le courant Josephson converge bien pour $\Delta < |\omega_n| \ll E_F$; dans ces conditions, les fonctions f_{ω_n} et g_{ω_n} (représentant respectivement le CAR et le *cotunneling*) sont données par (voir annexe G)

$$\begin{aligned} |t|^2 f_{\omega_n}(r) &= \frac{\Gamma}{2E_F}\frac{\sin(k_F r)}{k_F r\eta} \\ |t|^2 g_{\omega_n}(r) &= \frac{\Gamma}{2}\frac{\cos k_F r}{k_F r}\,. \end{aligned}$$

La divergence en $r = 0$ de la fonction g_{ω_n} est discutée à la section 4.3.

3.6 Transformation de Hubbard-Stratonovich

La fonction de partition (3.10) contient un terme quartique $(\bar{d}_a d_a)^2$. On peut alors essayer de le rendre quadratique par une transformation de Hubbard-Stratonovich, ce qui permettrait de mettre la fonction de partition sous le forme d'une intégrale gaussienne que l'on sait en principe calculer. On utilise une transformation différente de celle utilisée dans l'annexe D puisqu'on n'utilise qu'un champ X réel :

$$\mathrm{e}^{\frac{U_a}{2}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ (\bar{d}d)^2} = \int \mathcal{D}X\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{2U_a}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \left(X_a^2 - 2U_a(\bar{d}d)X_a\right)}. \tag{3.11}$$

Dans notre cas, on a besoin de deux champs auxiliaires ($X_{a=1,2}$) pour les deux points quantiques. Comme dans le travail de Rozhkov et Arovas [3], on néglige les fluctuations temporelles des champs auxiliaires ($\int \mathcal{D}X_a \to \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}X_a$), puis on utilise les fréquences de Matsubara pour tous les champs. La forme obtenue est celle d'une intégrale gaussienne sur des variables de Grassmann et se calcule directement en donnant un déterminant (le calcul général est donné dans l'annexe E)

$$Z = Z_S \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{a=1,2} \mathrm{d}X_a\ \exp\left(\sum_a \frac{-\beta X_a^2}{2U_a}\right) \prod_{n\in\mathbb{Z}} \det \mathcal{M}_{\omega_n}(X_1, X_2)$$

avec

$$\mathcal{M}_{\omega_n} = \begin{pmatrix} -i\omega_n + \tilde{\epsilon}_1\sigma_z - X_1 - \Sigma^{11}_{\omega_n} & -\Sigma^{12}_{\omega_n} \\ -\Sigma^{21}_{\omega_n} & -i\omega_n + \tilde{\epsilon}_2\sigma_z - X_2 - \Sigma^{22}_{\omega_n} \end{pmatrix}.$$

On évalue cette intégrale par la méthode du col (voir l'annexe F) donnant

$$Z = Z_S 2\pi e^{-A(\mathbf{X}_0)} \left[\det A^{(2)}(\mathbf{X}_0)\right]^{-1/2}$$

avec

$$\begin{aligned} A(X_1, X_2) &= +\frac{\beta}{2U_1}X_1^2 + \frac{\beta}{2U_2}X_2^2 - \sum_{n\in\mathbb{Z}} \ln\det \mathcal{M}_{\omega_n} \\ \left[A^{(2)}(\mathbf{X}_0)\right]_{ij} &= \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} A(\mathbf{X}_0) = \partial_{ij} A(\mathbf{X}_0). \end{aligned} \tag{3.12}$$

et $\mathbf{X}_0$ est le minimum global de $A(X_1, X_2)$ pour une phase donnée ϕ. En remarquant que $\mathcal{M}_{\omega_{-(n+1)}} = \mathcal{M}^*_{\omega_n}$ qui découle directement de $\omega_{-(n+1)} = -\omega_n$, l'énergie libre $F = -\beta^{-1}\ln Z$ est finalement (voir l'annexe E)

$$F = \frac{\bar{X}_1^2}{2U_1} + \frac{\bar{X}_2^2}{2U_2} - \beta^{-1}\sum_{n\geq 0} \ln\left(\det \mathcal{M}_{\omega_n}(\bar{X}_1, \bar{X}_2) \det \mathcal{M}^*_{\omega_n}(\bar{X}_1, \bar{X}_2)\right). \tag{3.13}$$

La méthode numérique permettant de calculer le courant Josephson suit les étapes suivantes

- On se donne une phase ϕ.
- On minimise la fonction donnée par (3.12) (ou l'énergie libre (3.13)) par un algorithme de *steepest descent* : comme on peut avoir accès aux dérivées partielles par rapport à X_1 et X_2, on utilise un algorithme simple qui nous donne un minimum local ou global en se donnant la fonction à minimiser et ses dérivées partielles.
- A partir de $F(\phi)$ ainsi obtenue, on dérive numériquement pour obtenir le courant Josephson $I = 2\partial_\phi F$.

La vérification supplémentaire consiste à s'assurer que le minimum fourni par l'algorithme est bien le minimum global.

3.7 Cas général avec flux interne

Par la suite, on souhaite voir l'influence d'un flux α traversant la boucle du SQUID où les distances d'injections sont quelconques. On introduit quatre phases α_1, α_2, β_1, β_2 dans les amplitudes de saut Tunnel

$$\begin{aligned} H_T &= \sum_{k,\sigma} t_L e^{-\imath\phi/4} e^{\imath\alpha_1} d^\dagger_{1\sigma} c_{L,k\sigma} + t_R e^{\imath\phi/4} e^{\imath\alpha_2} c^\dagger_{R,k\sigma} d_{1\sigma} + h.c. \\ &\quad + t_L e^{-\imath\phi/4} e^{\imath\beta_1} d^\dagger_{2\sigma} c_{L,k\sigma} + t_R e^{\imath\phi/4} e^{\imath\beta_2} c^\dagger_{R,k\sigma} d_{2\sigma} + h.c. \end{aligned} \tag{3.14}$$

Pour simplifier, on suppose que $\alpha_1 = \alpha_2 = -\beta_1 = -\beta_2 := \alpha/4$, ce qui modifie les éléments de la matrice $\mathcal{M}_{\omega_n}$ (voir l'annexe E)

$$\mathcal{M}^{12}_{\omega_n}(\alpha) = |t|^2 \sum_{j=1,2} \begin{pmatrix} -(i\omega_n f_j + g_j) e^{i(-1)^{j+1}\alpha/2} & \Delta f_j e^{i(-1)^j \phi/2} \\ \Delta f_j e^{i(-1)^{j+1}\phi/2} & -(i\omega_n f_j - g_j) e^{i(-1)^j \alpha/2} \end{pmatrix} = \mathcal{M}^{21}_{\omega_n}(-\alpha)$$

$$\mathcal{M}^{ll}_{\omega_n}(\alpha) = \begin{pmatrix} -i\omega_n(\gamma_n + 1) + \tilde{\epsilon}_l - X_l & \Delta\gamma_n \cos\left(\frac{\phi + (-1)^l \alpha}{2}\right) \\ \Delta\gamma_n \cos\left(\frac{\phi + (-1)^l \alpha}{2}\right) & -i\omega_n(\gamma_n + 1) - \tilde{\epsilon}_l - X_l \end{pmatrix}$$

où $l = 1, 2$ identifie les blocs diagonaux de $\mathcal{M}_{\omega_n}$, $\gamma_n = \Gamma/\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}$ et on a utilisé la notation pratique $j = 1, 2$ pour $j = L, R$.

3.8 Equation de Gap dans une jonction simple

On finit ce chapitre par une remarque sur l'équation de consistance des champs X de Hubbard-Stratonovich. Par analogie avec les supraconducteurs conventionnels, le champ de Hubbard-Stratonovich satisfait à une équation de consistance, nommée équation de gap (ici, minimisation de l'énergie libre). On peut ensuite définir la température critique

T_c dans la transition métal-supraconducteur par $\Delta(T_c^-) = 0$ (le gap tend vers zéro juste en dessous de la température critique) ; on utilise alors l'équation de consistance en fixant la température à T_c et en prenant un gap nul. Le rapport a la remarquable propriété de ne pas dépendre de la coupure (fréquence de Debye ω_D)

$$\frac{2\Delta}{T_c} \approx 3,53.$$

L'équation de consistance de X pour le système entier $S/QD/S$ est

$$\partial_X F = 0 = \frac{X}{U} - T\partial_X \sum_{|\omega_n|<\omega_D} \ln\det \mathcal{M}_{\omega_n}(X).$$

Dans la jonction π, il existe une transition de phase déterminée par la valeur du champ auxiliaire $X(T_c^-) = 0$. L'équation suivante définit alors la température critique

$$0 = \frac{1}{T_c} - U\,\frac{1}{X}\partial_X \sum_{|\omega_n|<\omega_D} \ln\det \mathcal{M}_{\omega_n}(X)\Bigg|_{X\to 0}$$

avec $\omega_n = 2\pi T_c(n + 1/2)$. Si on s'attend à un rapport $2X/T_c$ intéressant, l'étude numérique resterait à faire.

Chapitre 4

Diagrammes de phases, doublement de période

Dans les applications numériques, les contacts supraconducteurs ont les mêmes coefficients de transmission Γ et le même gap Δ.

4.1 Deux points indépendants

Quand les deux points quantiques sont séparés par une distance plus grande que la longueur de cohérence de la paire de Cooper, les effets d'Andreev croisés (CAR) et le *cotunneling* tendent vers 0 : on a $f_{\omega_n}(\infty) = g_{\omega_n}(\infty) = 0$. La matrice $\mathcal{M}_{\omega_n}$ devient diagonale par bloc donnant ainsi une énergie libre (3.13) totale qui est la somme des énergies libres F_a décrivant des points quantiques a indépendants. Le courant total ($I = 2\partial_\phi F = 2\partial_\phi(F_1 + F_2) = I_1 + I_2$) est donc la somme des courants I_a provenant de chaque point. Chaque point peut subir une transition de phase et donner une jonction π (voir la partie gauche de la figure (4.1)). Dans ce formalisme, on peut avoir accès directement au nombre moyen d'occupation $n_a = \partial_{\tilde{\epsilon}_a} F$ sur le point a en dérivant par rapport à l'énergie $\tilde{\epsilon}_a$ de l'impureté a (voir la partie droite de la figure 4.1). Si ces impuretés sont identiques, on peut obtenir un diagramme de phase des états 0 et π en calculant le rapport

$$R = \frac{\int_0^\pi \mathrm{d}\phi\, I(\phi)}{\int_0^\pi \mathrm{d}\phi\, |I(\phi)|}. \tag{4.1}$$

Si $R = 1$, la jonction est dans la phase 0, si $R = -1$ la jonction est dans la phase π, si $-1 < R < 1$ la jonction présente une transition de phase dans le courant Josephson (discontinuité dans le courant). Dans le cas général où les deux points quantiques ne sont pas indépendants et sont couplés par le *cotunneling* et les effets d'Andreev croisés, le rapport R nous renseigne seulement sur l'état global de la jonction. Pour étudier le

contraste du SQUID et les mêmes quantités que Cleuziou *et al.* [1], on a d'abord besoin de définitions.

Definition 4.1. *Courant critique et contraste* On définit le courant critique noté $J_{\mathrm{MAX}}(\alpha)$ comme étant le maximum sur ϕ du courant Josephson $J(\phi;\alpha)$ dépendant du flux Josephson ϕ et du flux α passant dans la boucle du SQUID ; le contraste noté C est alors défini par

$$C = \frac{\max_\alpha(J_{\mathrm{MAX}}(\alpha)) - \min_\alpha(J_{\mathrm{MAX}}(\alpha))}{\max_\alpha(J_{\mathrm{MAX}}(\alpha)) + \min_\alpha(J_{\mathrm{MAX}}(\alpha))}\,.$$

Le courant critique $J_{\mathrm{MAX}}(\alpha)$ est reporté dans la figure (4.2) pour les trois cas suivants
- a) les deux points quantiques sont dans la phase π (valeurs numériques pour la phase π : $\epsilon/\Delta = -5$, $U/\Delta = 10$, $\Gamma/\Delta = 1$) ;
- b) un des points reste dans la phase π et l'autre dans la phase 0 (valeurs numériques pour la phase 0 : $\epsilon/\Delta = -0.1$, $U/\Delta = 10$, $\Gamma/\Delta = 1$)
- c) les deux points sont dans la phase 0.

Dans tous les cas, la périodicité du signal en tant que fonction du flux (α est en unités du quantum de flux $2\pi\phi_0$) est de π. On remarque cependant un déphasage de $\pi/2$ entre les cas π-π et 0-π. Le contraste est donc maximal quand les points quantiques sont dans le même état. Dans la figure (4.2), la cas $\pi - \pi$ fournit une amplitude plus petite que le cas 0-0 mais leurs amplitudes dépendent fortement des paramètres choisis. Ces résultats sont qualitativement en accord avec le SQUID de Cleuziou *et al.* [1] dont les résultats sont présentés à la figure (2.4).
On peut toutefois se dire que le cas expérimental de [1] (voir la figure 2.4) correspond au cas asymétrique où $r_L = 0$ et $r_R \to \infty$ (on rappelle que la figure 4.2 correspond au cas où r_L, r_R tendent vers l'infini). Dans ce cas, les résultats qualitatifs restent identiques. On peut interpréter cela par l'impossibilité pour une paire de Cooper de se reformer du côté où $r_R \to \infty$ (donc avec une longueur de cohérence infinie).

4.2 Contacts ponctuels et doublement de période

Pour des contacts ponctuels ($r = 0$), les effets d'Andreev croisés se réduisent à (voir l'annexe G)

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r) = \frac{\pi\nu(0)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}$$

avec $\Delta, |\omega_n| \ll E_F$. D'autre part, le *cotunneling* est donnée par

$$g_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\mathbf{k}\frac{\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}}{\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}\right)^2 + \omega_n^2 + \Delta^2}.$$

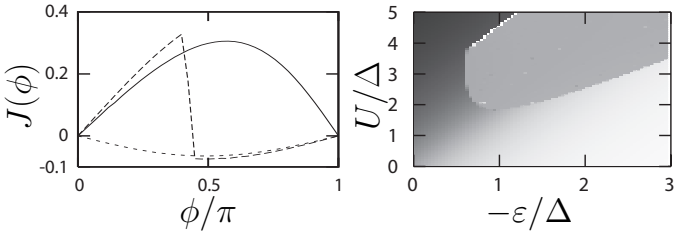

FIGURE 4.1: A Gauche : courant Josephson $J(\phi)$ en unités de $2e\Delta/\hbar$ dans le cas symétrique où les corrélations entre points quantiques n'interviennent pas (*i.e.* $r_1 = r_2 \gg 1$) avec un coefficient de transmission $\Gamma/\Delta = 1$ et des niveaux d'énergies identiques dans chaque point quantique $\epsilon_1/\Delta = \epsilon_2/\Delta = -2$; phase 0 (trait plein) pour $U/\Delta = 2.1$, transition π (tiret) pour $U/\Delta = 2.6$, jonction π (pointillé) pour $U/\Delta = 2.9$. A droite : nombre d'occupation moyen dans un point quantique en fonction de son énergie d'interaction coulombienne U et de son niveau d'énergie ϵ avec $\Gamma/\Delta = 1$; point quantique vide (noir), doublement occupé (blanc). La région centrale en gris correspond à un point quantique occupé une fois ; on a vérifié en calculant le rapport R (défini à l'équation 4.1) que la jonction est dans une phase π ; les bords de cette région correspondent à une transition 0-π ; hors de cette région, la jonction est dans la phase 0 (on ne distingue pas ici les phases $0'$ et π' de [3] qui correspondent à des régions proches d'une transition de phase).

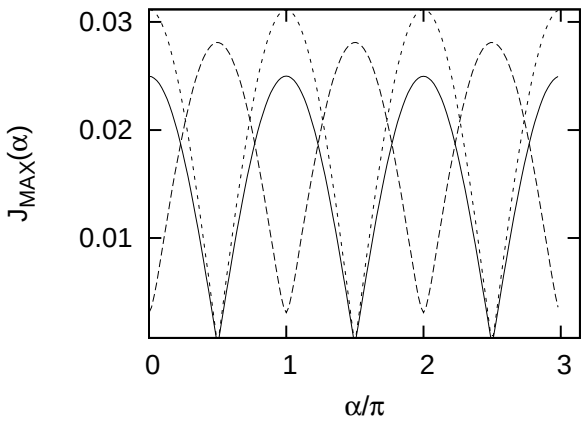

FIGURE 4.2: Courant critique (voir la définition 4.1) en unités de $2e\Delta/\hbar$ en fonction du flux α (en unités du quantum de flux $2\pi\phi_0$) intérieur au SQUID avec $r_{1,2} \to \infty$ (points quantiques indépendants). (trait plein) jonctions π-π ; (tirets) jonctions 0-π ; (pointillé) jonctions 0-0. Ces résultats sont qualitativement en accord avec Cleuziou *et al.* [1] (voir la figure 2.4).

En utilisant $\xi_k = \epsilon_k - E_F$ et une densité d'état métallique constante $\nu(\xi) \approx \nu(0)$, on a

$$|t|^2 g_{\omega_n}(r=0) = 0.$$

La figure (4.3) montre un doublement de période dans le courant critique déjà mentionnée par Recher *et al.* [18]. On peut l'interpréter de la manière suivante [1] : le courant contient trois processus (voir bas de la figure (4.3)) conduisant à des contributions de phases différentes. Si une paire de Cooper passe par la gauche (resp. la droite) alors chaque électron accumule une phase de $\alpha/2$ (resp. $-\alpha/2$) qui s'ajoute à la phase Josephson ϕ. Si la paire se scinde en deux (via le CAR) puis se recombine en une paire de Cooper, les deux électrons accumulent les phases $\alpha/2$ et $-\alpha/2$ donnant un processus qui ne dépend pas de α [2]. En admettant que le courant total I soit la somme des courants de ces trois processus [3], on écrit

$$I = I_{d1}\sin(\phi+\alpha) + I_{d2}\sin(\phi-\alpha) + I_{\mathrm{CAR}}\sin\phi. \tag{4.2}$$

Supposons que $I_{d1} = I_{d2} := I_d$, si $I_{\mathrm{CAR}} \to 0$ (r_j est très supérieur à la longueur de cohérence dans le supraconducteur), on a $J_{\max} = 2I_d|\cos\alpha|$; ce qui correspond à la figure (4.2). Maintenant, si le CAR est présent, $J_{\max} = |2I_d\cos\alpha + I_{\mathrm{CAR}}|$ et la période est doublée comme dans la figure (4.3).
Dans le cas hautement asymétrique où $r_1 = 0$ et r_2 sont très supérieurs à la longueur de cohérence, il n'y a pas de doublement de période qu'on interprète encore par l'impossibilité d'une paire se scindant en deux d'un côté de se recombiner en une paire de Cooper de l'autre côté.
Ces résultats offrent donc une nouvelle possibilité d'étudier le CAR dans une géométrie différente des fourches NS.

4.3 Points d'injections séparés

Pour des points d'injections séparés, le courant Josephson montre des oscillations d'amplitudes mais l'aspect général reste inchangé. Ces oscillations et le doublement de période peuvent se voir dans le courant critique mais dépendent de la précision expérimentale. Le modèle général montre que ces effets se manifestent autour de la longueur d'onde de Fermi ; dans la limite des contacts ponctuels, le CAR est bien visible.

1. Ce raisonnement est à attribuer à T. Jonckheere.
2. Plus précisément, on considère qu'entre les contacts, les électrons sont déphasés de ϕ (effet Josephson), puis qu'ils sont également déphasés de α entre les points $\mathbf{r}_{R_1}$ et $\mathbf{r}_{R_2}$; on a $\alpha = \alpha_{\mathbf{r}_{R_1}} - \alpha_{\mathbf{r}_{R_2}}$ (on simplifie la discussion en posant $0 = \alpha_{\mathbf{r}_{L_1}} - \alpha_{\mathbf{r}_{L_2}}$ et en prenant des phases symétriques $\alpha_{\mathbf{r}_{R_1}} = -\alpha_{\mathbf{r}_{R_2}} \equiv \alpha/2$). Ensuite, dans un état singulet, on déphase par exemple l'état de spin $\uparrow$ (resp. $\downarrow$) de $e^{i\alpha/2}$ (resp. $e^{-i\alpha/2}$) pour voir que la fonction d'onde ne dépend pas de α.
3. Il n'est en effet pas évident que l'énergie libre s'écrive bien sous la forme : $F = F_{d1} + F_{d2} + F_{\mathrm{CAR}}$ avec $I = \partial_\phi F$, $I_{d1}\sin(\phi+\alpha) = \partial_\phi F_{d1}$, $I_{d2}\sin(\phi-\alpha) = \partial_\phi F_{d2}$ et $I_{\mathrm{CAR}}\sin\phi = \partial_\phi F_{\mathrm{CAR}}$.

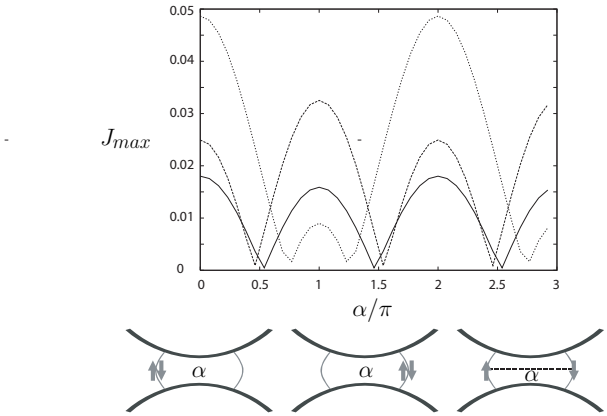

FIGURE 4.3: En haut : doublement de la période dans le courant critique $J_{\max}$ (voir la définition 4.1) en unités de $2e\Delta/\hbar$ en fonction du flux α (en unités du quantum de flux $2\pi\phi_0$) intérieur au SQUID dans le cas de contacts pontuels où $r_L = r_R \equiv 0$. En dessous : les trois processus dont on tient compte pour écrire l'équation 4.2 : le schéma de gauche représente un transport direct induisant un déphasage de α dans le courant correspondant au premier terme de l'égalité 4.2 ; le schéma du milieu représente un transport direct induisant un déphasage de $-\alpha$ dans le courant correspondant au second terme de l'égalité 4.2 ; le schéma de droite représente le passage d'une paire d'électrons via le CAR et n'induit pas de déphasage dans le courant (c'est le troisième terme de l'équation 4.2).

Quand un point quantique est bien établi dans une phase 0 ou π (i.e. quand des perturbations de ϵ et U n'induisent pas de transitions de phases), le *cotunneling* et le CAR ne sont pas suffisant pour induire une transition. Par contre, dans des régions où la phase est "fragile" (par exemple la bordure de la zone grise de la figure 4.1), ces effets provoquent des "oscillations de phases" visibles dans la figure 4.4 : dans le cas symétrique ($r_1 = r_2 := r$ et $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 := \varepsilon_0$), on présente un diagramme de phase (voir la figure 4.4) en fonction de (r, ε_0) avec $r/\lambda_F \in [0, 2]$ et U satisfaisant l'équation $0 = 2\varepsilon_0 + U$.
Dans la limite où $r = 0$, le modèle de contacts séparés utilisé ici (c'est également le modèle de l'hamiltonien Tunnel de Choi *et al.* [9]) donne un *cotunneling* divergeant. On pense cependant que la bonne limite est celle donnée par le modèle de contacts ponctuels : $g_{\omega_n}(r = 0) = 0$. Les processus CAR sont consistants quelque soit le modèle de contact. Pour traîter numériquement le problème du *cotunneling*, on définit artificiellement la fonction de *cotunneling* $g^*_{\omega_n}(r)$ valable pour toute distance r

$$g^*_{\omega_n}(r) = (1 - h(r))g_{\omega_n}(r) \tag{4.3}$$

où $h(r) = e^{-r^2/2(0.11\lambda_F)^2}$ et la valeur 0.11 est discutée dans l'annexe H.

4.4 Résumé

Dans cette partie, on a obtenu une signature explicite du CAR et du *cotunneling* dans une jonction $S/2QD/S$ où les contacts sont ponctuels. Cette signature d'un transport

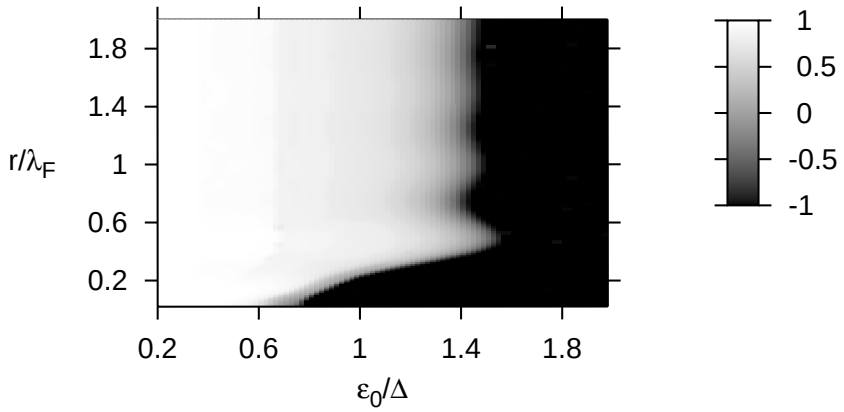

FIGURE 4.4: Diagramme de phase en coordonnées $(r/\lambda_F, \varepsilon_0/\Delta)$ avec la longueur de Fermi λ_F et le gap du supraconducteur Δ. La jonction est symétrique en termes de distances d'injections $(r_1 = r_2 := r)$ et de niveaux d'énergies des points quantiques $(\varepsilon_1 = \varepsilon_2 := \varepsilon_0)$. (blanc : phase 0, noir : phase π et gris pour une transition de phase). On peut observer des oscillations qui ne restent cependant bien visibles qu'à des distances de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi. En dessous de $r/\lambda_F \approx 0.1$, le cotunneling aurait placé la jonction dans une phase 0 quelque soit l'énergie dans les impuretés, mais nous avons défini une nouvelle fonction $g^*_{\omega_n}$ (Eq. 4.3) de cotunneling pour retrouver le comportement d'un modèle de contacts ponctuels.

corrélé se caractérise par un doublement de période dans le courant critique $J_{\mathrm{MAX}}(\alpha)$ dépendant du flux interne α. Lorsque les distances d'injections ne sont pas nulles, le CAR et le cotunneling décroissent exponentiellement avec une longueur caractérisque qui est la longueur de cohérence dans le supraconducteur. Si l'un des contacts est ponctuel et l'autre tel que sa distance d'injection est de l'ordre de la longueur de cohérence, alors nous sommes dans la géométrie expérimentale du CNT-SQUID de Cleuziou *et al.* [1]. On retrouve qualitativement leurs résultats sur le courant critique, en utilisant un modèle hamiltonien tenant compte de la possibilité d'une transition π (*i.e.* avec une interaction U dans les points quantiques suffisament faible pour ne pas induire d'effet Kondo permettant d'utiliser avec confiance une approche de champ moyen). Théoriquement, la divergence du cotunneling n'est pas traitée élégamment (on doit rajouter des termes à la main) et nos résultats pour des distances proches de la longueur d'onde de Fermi (voir les oscillations de phase à la figure 4.4) pourraient remettre en cause les hamiltoniens effectifs de départ. Les futurs résultats expérimentaux dans les prochains nano-SQUID pourraient faire avancer notre compréhension théorique des phénomènes de corrélations (CAR et cotunneling) en confirmant ou infirmant par exemple le doublement de période du courant critique.

Deuxième partie

Signature du MAR

Chapitre 5

Introduction au MAR

Dans cette partie, on étudie la transition du régime cohérent au régime incohérent par le courant et sa première harmonique. Le système considéré se compose d'une jonction principale $S/QD/S$ composée de deux contacts supraconducteurs BCS (notés S) et d'un point quantique (noté QD) en présence d'interactions coulombiennes. Lorsque les caractéristiques de cette jonction sont bien identifiées, on étudie les effets de l'ajout d'un contact métallique. On montre ici qu'on peut caractériser la présence de ce contact par un déphasage de la première harmonique du courant. Il est à noter que ce contact métallique est assimilé conceptuellement à la présence ou non de décohérence ; la décohérence est supposée se produire lorsque les électrons rencontrent un réservoir qui nous fait perdre les informations antérieures. Le régime cohérent est alors définit par un couplage nul avec le réservoir et le régime incohérent par un couplage maximal avec le réservoir. La constante de couplage est le coefficient $\Gamma_N \propto |t_N|^2$ relié au couplage tunnel t_N entre le point quantique et le réservoir normal. Le travail consiste à obtenir une formule pour le courant, *inextricable* à cause de la complexité inhérente de la théorie, puis à analyser numériquement les effets des différents paramètres du modèle ; les courbes numériques du chapitre 7 sont l'oeuvre de K. Bayandin.

5.1 Le transport cohérent et incohérent

Dans des travaux de Büttiker [19] (1986), le passage entre un régime de transport cohérent et incohérent est caractérisé par la résistance de la jonction (voir figure 5.1). Lorsque la longueur de cohérence est grande devant la séparation des deux barrières (régime cohérent), le système entier devrait obéir à la formule de Landauer pour un coefficient de transmission T

$$\mathcal{R} = \frac{2\pi\hbar}{e^2}\frac{1-T}{T}; \tag{5.1}$$

sinon, on doit additionner les trois résistances de la jonction (régime incohérent), avec $\mathcal{R}_i = \frac{2\pi\hbar}{e^2}\frac{1-T_i}{T_i}$ pour les résistances $i = 1, 2$ et $\mathcal{R}_s$ pour le diffuseur inélastique du milieu. La résistance totale est donnée par

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_1 + \mathcal{R}_2 + \mathcal{R}_s \tag{5.2}$$

En présence d'un diffuseur inélastique, on note S_f la probabilité pour un électron d'être

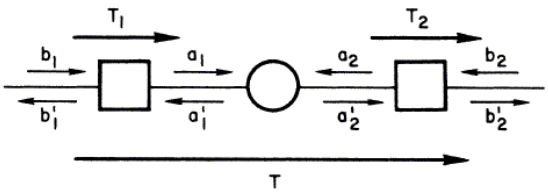

FIGURE 5.1: Le système de Büttiker [19] : deux diffuseurs élastiques (carrés) et au milieu (cercle), un diffuseur inélastique. En l'absence du diffuseur inélastique, la résistance est déterminée par la probabilité de transmission T (voir l'équation 5.1) ; en présence du diffuseur inélastique, la résistance est déterminée par les probabilités de transmission T_1 et T_2 (voir l'équation 5.2). Dans le formalisme de diffusion, les amplitudes des ondes entrantes sont données par les coefficients a_1, a_2, b_1, b_2 et celles des ondes sortantes par a'_1, a'_2, b'_1, b'_2.

transmis et S_b la probabilité d'être réfléchi. Même en présence d'un diffuseur inélastique, une fraction des porteurs est transmise de manière cohérente avec une probabilité T_c ; la résistance totale s'écrit alors

$$\mathcal{R} = \frac{2\pi\hbar}{e^2}\frac{1 - T_c - [S_f S_b/(S_b + S_f)]}{T_c + [S_f S_b/(S_b + S_f)]}.$$

Dans le cas cohérent, $S_f = S_b = 0$ et on a bien l'équation 5.1. Si $T_c = 0$ ($S_f, S_b \neq 0$), on retrouve aussi la formule du cas incohérent de l'équation 5.2 avec la résistance du diffuseur inélastique $\mathcal{R}_s = \frac{2\pi\hbar}{e^2}$. La transition est représentée à la figure 5.2.

5.1.1 L'explication de Thouless sur la transition cohérent-incohérent

Dans son article de 1977, Thouless [20] décrit le passage entre une résistance qui augmente linéairement avec la longueur du fil et une résistance qui augmente de façon exponentielle. La linéarité correspond au régime incohérent et la résistance totale est la somme des résistances des sous-systèmes (comme dans l'équation 5.2). L'image de la conduction utilisée est celui du modèle de liaisons fortes et l'électron passe de site en site localisé. L'argumentation repose sur l'image d'un gaz d'électrons dégénéré avec un couplage en bout de fil donnant une résistance au transport. Les longueurs qui interviennent sont la longueur entre sites localisés et la longueur de parcours moyen avant collision avec un phonon. Thouless se base sur la relation entre la résistance r d'une extrémité de fil et le temps de diffusion t de l'électron à une extrémité du fil, démontrée

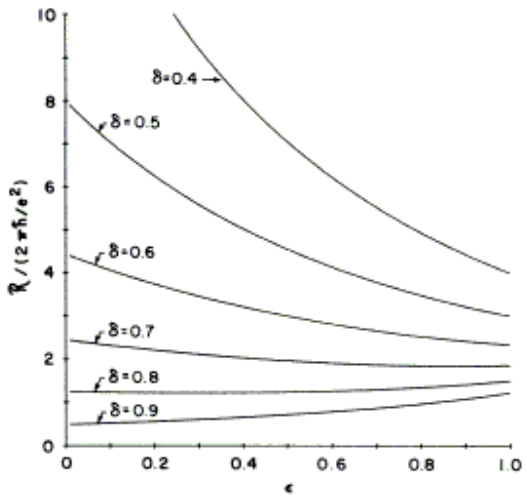

FIGURE 5.2: Résistance en fonction d'un paramètre ϵ [19] tel que la transmission est cohérente pour $\epsilon = 0$ et incohérente pour $\epsilon = 1$. On définit alors la probabilité pour un porteur d'être transmis de manière cohérente par $T_c = 1 - \epsilon$; les probabilités d'être transmis S_f et d'être réfléchi S_b sont définies par $S_f = S_b = \epsilon$ et δ est lié à la transmission par $T_1 = |t|^2 = \delta$.

de façon heuristique

$$\frac{\hbar}{t} = \frac{\hbar}{e^2}\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}N}.$$

La densité d'état $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}N}$ qui représente l'espacement entre niveaux d'énergies est comparée à $\hbar/t$ représentant le couplage entre deux morceaux de fil mis bout-à-bout. Si $\hbar/t > \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}N}$, en reprenant l'argument [1] de Thouless, "il n'est pas *invraisemblable* que $\hbar/t$ pour le système combiné soit égal au quart de sa valeur pour chaque sous-système". Une condition suffisante est que la résistance totale soit la somme des résistances individuelles engendrées par les extrémités des deux fils. D'autre part, quand $\hbar/t < \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}N}$, il est attendu que les niveaux du système entier ne soient que des perturbations des niveaux d'un sous-système, conduisant à une résistance augmentant exponentiellement avec la longueur du fil.

Dans ce type d'argumentation générique, on tient compte de tout : la diffusion phonon-électron, électron-électron, etc. Mais théoriquement, l'étude microscopique simultanée de ces interactions est impossible. Dans notre travail, on va se restreindre aux jonctions $S/QD/S$ dans la théorie hamiltonienne du transport Tunnel. De telles jonctions montrent des structures dans le courant dont l'image physique est donnée en termes de réflections d'Andreev.

1. Plus tard dans l'article, on peut trouver une constante β qui n'est *probablement* pas très éloignée de l'unité.

5.2 Réflections multiples en théorie hamiltonienne

La description du transport quantique se fait en général avec un couplage Tunnel au niveau des interfaces. Le calcul du courant est souvent perturbatif et on parle de manière générale du courant de quasiparticules quand interviennent seulement des fonctions de corrélations du type $\langle c^\dagger c\rangle$ dans l'expression du courant. Pourtant dans l'effet Josephson, la théorie perturbative donne naturellement un terme supplémentaire donné (toujours à l'ordre le plus bas) par des fonctions de corrélations du type $\langle c^\dagger c^\dagger\rangle$. Ces fonctions ne sont pas nulles dans le cadre de la supraconductivité BCS où $c^\dagger_{k\uparrow} = u_k\gamma^\dagger_{k\uparrow} + v^*_k\gamma_{k\downarrow}$ avec $\gamma^\dagger_{k\uparrow}$ créant un état $|k\uparrow\rangle$ à partir de l'état fondamental BCS. Pour des métaux normaux, ces fonctions de corrélations sont nulles. Au premier ordre de la théorie perturbative, quelques aspects se démarquent dans la caractéristique courant-tension d'une jonction $S_1/I/S_2$ (supraconducteur-isolant-supraconducteur) :

- Soit le gap Δ_i du supraconducteur i. Le courant de quasiparticule ne démarre que pour la condition $eV = (\Delta_1 + \Delta_2)/2$ permettant d'avoir assez d'énergie pour créer un trou d'un côté et une particule de l'autre.
- Pour $eV = |\Delta_1 - \Delta_2|/2$, on remarque un pic dans le courant lié aux résonances dans la densité d'état.

Ce phénomène peut s'expliquer dans le cadre de la théorie Tunnel ; en anticipant sur les calculs présentés dans les chapitres suivants, le courant dans une jonction $S/QD/S$ est donné par une trace dans l'espace Keldysh-Nambu de la fonction de Green non-perturbative G_D du point quantique convoluée avec la "self-energy" Σ

$$\langle I(t)\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left\{\tau_x\sigma_z\left[G_D * \Sigma(t) - \Sigma * G_D(t)\right]\right\}.$$

La *self-energy* couple la fonction de Green des supraconducteurs et les amplitudes Tunnel t ; elle contient la densité d'état de ces supraconducteurs et n'est pas calculé perturbativement ; ce qui nous intéresse particulièrement dans cette discussion est qu'elle est proportionnelle au module au carré de l'amplitude Tunnel $|t|^2$; ce qui permet d'utiliser un développement perturbatif pour calculer la fonction de Green du point quantique donnée par $G_D = (1 + g_D\Sigma + (g_D\Sigma)^2 + ...)g_D$ (en transformée de Fourier) provenant de l'équation de Dyson

$$G_D^{-1} = g_D^{-1} - \Sigma = g_D^{-1}(1 - g_D\Sigma)$$

où g_D est la fonction de Green du point quantique libre. Au premier ordre dans la perturbation, on obtient le pic à $eV = |\Delta_1 - \Delta_2|/2$. On s'attend alors à ce qu'aux ordres suivants d'autres pics apparaissent, résultant des différentes résonnances dans la densité d'état ; ces structures se voient donc d'autant mieux que la transparence de la jonction diminue (mais le courant diminue alors avec la transparence). On ne peut malheureusement pas aller plus en avant dans une description quantitative du phénomène puisque le courant revient à des intégrales multiples toujours calculées numériquement même à l'ordre le plus bas. On parle de réflections multiples d'Andreev (désormais, on utilisera volontiers l'acronyme anglais MAR) ; le terme de "réflection" provient de la

réflection des électrons-trous sur une jonction N/S (métal **N**ormal/**S**upraconducteur) où les fonctions d'ondes sont décrites par l'équation de Bogolioubov-de Gennes (voir par exemple dans [21]).
Les structures de MAR se produisent à des énergies telles que $eV < (\Delta_1 + \Delta_2)/2$; si on considère deux supraconducteurs identiques, cette condition s'écrit $eV < \Delta$ amenant naturellement à les nommer "structures sous le gap". Dans cette thèse, on va aller au delà du développement perturbatif et on inverse (numériquement) l'équation de Dyson pour obtenir la fonction de Green "habillée" du point quantique. Par la suite, on ajoute l'interaction coulombienne par une approximation de champs moyens. On verra ainsi les structures MAR plus précisément. Dans les chapitres suivants, on détaille les calculs justifiant les résultats énoncés ici.

5.3 Quelques travaux sur le MAR

Dans le contexte de la théorie de la diffusion et des supraconducteurs mésoscopiques (décrits par les fonctions d'ondes de l'équation de Bogolioubov-de Gennes), il faut mentionner les résultats de Samuelsson *et al.* [22] qui montrent en particulier que plus Γ augmente, plus il y a de réflections d'Andreev et les "structures sous le gap" se composent bien d'une multitude de pics [2]. Les structures MAR dans des jonctions diffusives $S/N/S$ (supraconducteurs quasiclassiques "sales" décrits par les équations de Usadel) ont également été étudiées par Cuevas *et al.* [23] ou dans un formalisme hamiltonien hors-équilibre en présence d'interaction coulombienne par Levy Yeyati *et al.* [24] (dans les cas limites avec et sans blocage de Coulomb). L'interaction coulombienne est ensuite étudiée avec une approximation de champs moyens par Avishai *et al.* [25] en utilisant un formalisme d'intégrales de chemins avec la théorie de Keldysh pour un traitement hors-équilibre (les mêmes techniques sont à l'oeuvre dans notre travail). Leur article contient en outre une discussion sur les supraconducteurs non-conventionnels ; pour ce qui nous concerne (supraconducteurs BCS (s-wave)), l'interaction coulombienne tend à détruire les "structures MAR sous le gap". Des expériences sont réalisées [26, 27] et mettent le MAR en évidence.
D'autre part, Zazunov *et al.* [28] étudient l'effet d'un couplage d'intensité λ avec un phonon. Les structures dans le courant sont riches et pour bien voir l'effet sur le courant, ils étudient la différence $\delta I = I(\lambda) - I(\lambda = 0)$ en utilisant une théorie perturbative. L'étude se fait à $T = 0$ avec un couplage faible : les effets sur le courant restent faibles mais néanmoins riches. Il est attendu qu'à une temperature non nulle et un couplage plus fort, les phonons pourraient être considérés comme une source de décohérence.

2. Dans le transport hors-équilibre, il est également difficile d'obtenir plus qu'une description de pics.

Chapitre 6

Transport hors-équilibre et MAR

Ce chapitre décrit les étapes du calcul permettant d'obtenir l'expression du courant. On rappelle d'abord les hamiltoniens déjà utilisés dans notre travail sur le courant Josephson. Puis on introduit quelques concepts sur le contour Keldysh qui permet de traiter le transport hors-équilibre. On utilise ensuite une transformation de Hubbard-Stratonovich pour traiter l'interaction coulombienne.

6.1 Modèle hamiltonien

Le système étudié est constitué d'un point quantique placé entre deux contacts supraconducteurs (jonction $S/QD/S$). Les constantes de couplages sont supposées symétriques. On ajoute en plus un contact métallique dont on étudiera l'influence sur le courant passant entre les supraconducteurs (voir la figure 6.1).
On utilise les indices L (resp. R) pour se référer au côté gauche (resp. droit) de la figure 6.1. Ainsi les tensions appliquées sont notées V_j pour $j = L, R$. La tension dans le métal

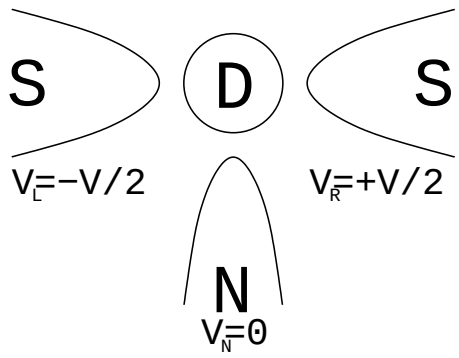

FIGURE 6.1: Vue schématique du système. Un point quantique (noté D) à un niveau d'énergie est placé entre deux supraconducteurs (notés S) sur lesquels on applique les tensions $\pm V/2$. Un contact additionnel (métal normal, noté N) devrait contrôler la décohérence.

normal est $V_N = 0$. L'introduction de ces tensions n'est pas complètement trivial et nécessite quelques commentaires pour se fixer les idées : on commence par introduire les potentiels chimiques des contacts, puis en développant la théorie, les potentiels chimiques vont naturellement induire des dépendances temporelles dans les amplitudes. Ceci est suffisant pour ce chapitre, mais pour référence, dans l'annexe I, on rappelle la transformation unitaire permettant de traiter les cas des tensions dépendantes du temps utilisées dans les problèmes de régimes photo-assistés ou concernant les "pas de Shapiro". Dans une jonction, il est attendu qu'en l'absence de différence de potentiel, il n'y ait pas de courant, exception faite du courant Josephson qui est un courant d'équilibre. Cette exception n'en est finalement pas une, si l'on considère la transformation unitaire générale qu'on applique pour introduire les tensions. En effet, un courant Tunnel est produit, si les amplitudes Tunnel sont déphasées. Que ce soient des potentiels chimiques ou un déphasage dans la fonction d'appariement de paire de Cooper ($\Delta(.)$), après une transformation unitaire générale (voir annexe I), les amplitudes Tunnel sont alors déphasés. L'hamiltonien général de la jonction est alors

$$H = H_D + \sum_{j=L,R,N} H_j + H_T(t) \ , \tag{6.1}$$

avec

$$H_D = \epsilon \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} d_\sigma^\dagger d_\sigma + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \ ,$$

où l'interaction coulombienne est prise égale à zéro ($U = 0$) dans la première partie de cette étude. Les hamiltoniens des supraconducteurs BCS et du métal normal sont souvent écrits en termes de spineurs de Nambu :

$$H_j = \sum_k \Psi_{jk}^\dagger \left(\xi_k \, \sigma_z + \Delta_j \, \sigma_x\right) \Psi_{jk} \ , \quad \Psi_{jk} = \begin{pmatrix} \psi_{jk,\uparrow} \\ \psi_{j(-k),\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \ , \quad \xi_k = k^2/(2m) - \mu \ , \tag{6.2}$$

avec les matrices de Pauli σ_z, σ_x agissant sur ces spineurs. Le gap est supposé identique pour les deux supraconducteurs $\Delta_j := \Delta$ pour $j = L, R$ alors que pour le contact métallique $j = N$, on pose $\Delta_N = 0$. En utilisant toujours les spineurs de Nambu, l'hamiltonien Tunnel s'écrit

$$H_T(t) = \sum_{jk} \Psi_{jk}^\dagger \, \mathcal{T}_j(t) \, d + \text{h.c.} \ , \quad d = \begin{pmatrix} d_\uparrow \\ d_\downarrow^\dagger \end{pmatrix} \ , \tag{6.3}$$

avec l'amplitude Tunnel $\mathcal{T}_j(t) = t_j \sigma_z \, e^{i\sigma_z \chi_j(t)/2}$ où $\chi_j(t) = \sigma_j \, V t$, $\sigma_j = \pm 1$ pour $j = L/R$.

6.2 Action générale et espace de Nambu-Keldysh

Dans le cas hors-équilibre faisant intervenir les potentiels chimiques, le contour temporel peut être modifié afin de ne pas abandonner complètement le formalisme adiabatique.

Pour cela (voir par exemple [29]), dans la construction de l'intégrale de chemin, on utilise des temps discrets $t_1, ..., t_N$ qui constituent la branche $+$ du contour et une deuxième série de points $t_{N+2}, ..., t_{2N+1}$ qui constituent la branche $-$. Le point t_{N+1} sert à relier ces deux contours. Lorsqu'on fait une limite continue, on écrit $t_1 \to -\infty$, $t_{N+1} \to +\infty$ et $t_{2N+1} \to -\infty$: c'est donc un contour temporelle fermé où l'état de départ est retrouvé. En partant de l'hamiltonien général 6.1 écrit en termes de spineurs de Nambu, sur le contour Keldysh K, l'action des supraconducteurs est

$$S_S = \int_K \mathrm{d}t \sum_{jk} \bar{\Psi}_{jk} i\partial_t \Psi_{jk} - \bar{\Psi}_{jk}(\xi_k \sigma_z + \Delta\sigma_x)\Psi_{jk}.$$

L'action de l'impureté s'écrit

$$S_D \quad = \quad \int_K \mathrm{d}t \; \bar{d}_\uparrow (i\partial_t - \varepsilon) d_\uparrow + \bar{d}_\downarrow (i\partial_t - \varepsilon) d_\downarrow - U \bar{d}_\uparrow d_\uparrow \bar{d}_\downarrow d_\downarrow.$$

Pour passer aux spineurs de Nambu, on peut intégrer par parties avec des conditions aux bords qui sont données par $\bar{d}_{+\downarrow} d_{+\downarrow}(+\infty) = \bar{d}_{-\downarrow} d_{-\downarrow}(+\infty)$; de plus, les champs initiaux sont identiques aux champs finaux. On utilise ensuite l'égalité $\int_K \mathrm{d}t \; (\partial_t \bar{d}_\downarrow) d_\downarrow = -\int_K \mathrm{d}t \; d_\downarrow (\partial_t \bar{d}_\downarrow)$ puisque par construction la dérivée est discrète et vaut $\bar{d}_k (d_k - d_{k-1})/\delta$ avec k l'indice de temps du contour et δ le pas de discrétisation du contour temporel. L'action de l'impureté devient alors

$$S_D = \int_K \mathrm{d}t \; \bar{d}_\uparrow (i\partial_t - \varepsilon) d_\uparrow + d_\downarrow (i\partial_t + \varepsilon) \bar{d}_\downarrow - U \bar{d}_\uparrow d_\uparrow \bar{d}_\downarrow d_\downarrow.$$

On utilise alors la notation spinorielle à la Nambu (également pour pouvoir écrire l'hamiltonien Tunnel de l'équation 6.3),

$$S_D = \int_K \mathrm{d}t \; \bar{d}(i\partial_t - \varepsilon\sigma_z) d + \frac{U}{2}(\bar{d}d)^2, \tag{6.4}$$

le terme d'interaction coulombienne en variables de Grassmann s'écrivant

$$\frac{U}{2}(\bar{d}d)^2 = \frac{U}{2}\left[\begin{pmatrix} \bar{d}_\uparrow & d_\downarrow \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_\uparrow \\ \bar{d}_\downarrow \end{pmatrix}\right]^2 = \frac{U}{2}\left(\bar{d}_\uparrow d_\uparrow - \bar{d}_\downarrow d_\downarrow\right)^2 = -U \bar{d}_\uparrow d_\uparrow \bar{d}_\downarrow d_\downarrow.$$

Les matrices de Pauli agissant dans l'espace de Keldysh sont notées τ_x, τ_y, τ_z (pour l'espace de Nambu, elles sont notées $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$). Dans l'espace de Keldysh, on peut travailler avec les indices $(+, -)$ qui correspondent au contour Keldysh initial et les fonctions de Green sont au nombre de quatre. On sait que ces fonctions de Green ne sont pas indépendantes et on peut effectuer une rotation afin de n'avoir que 3 fonction de Green (retardée, avancée et Keldysh). On distingue généralement deux rotations : celle concernant des champs bosoniques qui sont reliés par conjugaisons complexes ($\bar{\phi}^* = \phi$) et celle concernant les champs fermioniques grassmaniens qui sont indépendants.
La méthode est identique pour tous les termes dans l'action : on développe l'intégrale

sur le contour Keldysh (avec par exemple f, fonction des champs $\bar{\phi}$ et ϕ)

$$\int_K \mathrm{d}f(\bar{\phi},\phi)t = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t f(\bar{\phi}_+,\phi_+) - \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t f(\bar{\phi}_-,\phi_-)$$

puis on utilise les rotations Keldsyh et on écrit sous forme de spineurs (de Keldysh). Par exemple, pour la partie libre de l'action de l'impureté (sans interaction coulombienne), on a

$$S_D^0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\ \bar{d}_+(i\partial_t - \epsilon\sigma_z)d_+ - \bar{d}_-(i\partial_t - \epsilon\sigma_z)d_- \tag{6.5}$$

les transformations pour les fermions sont

$$\begin{aligned} \bar{d}_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{d}_1 + \bar{d}_2),\ d_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_1 + d_2) \\ \bar{d}_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{d}_2 - \bar{d}_1),\ d_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_1 - d_2). \end{aligned} \tag{6.6}$$

On met ces expressions dans l'action pour obtenir

$$S_D^0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\ \bar{d}_1(i\partial_t - \epsilon\sigma_z)d_1 + \bar{d}_2(i\partial_t - \epsilon\sigma_z)d_2. \tag{6.7}$$

Cependant, même si la fonction de Green semble diagonale, elle a une composante non-diagonale visible dans la notation discrète ; pour continuer à travailler en notation continue tout en évitant cette confusion, on calcule canoniquement les fonctions de Green et on les injecte ensuite dans l'action. Dans ce travail, avant la rotation 6.6, on parlera de fonction de Green dans l'espace $(+,-)$, elles sont au nombre de quatre. Après les rotations, on parlera des trois fonctions de Green avancée, retardée et "de Keldysh" dans ce qu'on appelle "espace (A,R,K)". En définissant $\bar{d} = (\ \bar{d}_1\ \ \bar{d}_2\ )$ pour écrire $S_D^0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\ \bar{d}g_D^{-1}d$, la fonction de Green g_D est alors une matrice 4×4 agissant dans l'espace de Nambu-Keldysh.

6.2.1 Une question de notation

Avant de continuer, on regarde en détails la commutation de certains opérateurs en développant un peu plus les notations. L'espace de Nambu-Keldysh est un espace tensoriel et si on écrit de manière explicite les opérateurs qu'on utilise ici, on a (avec l'identité I_K dans l'espace Keldysh)

$$\mathcal{T}_j := \mathcal{T}_j I_K = \mathcal{T}_j \otimes I_K \tag{6.8}$$

$$\tau_x\sigma_z := \sigma_z\tau_x = \sigma_z \otimes \tau_x. \tag{6.9}$$

et on a donc $\mathcal{T}_j\tau_x\sigma_z = (\mathcal{T}_j \otimes I_K)(\sigma_z \otimes \tau_x) = (\mathcal{T}_j\sigma_z) \otimes (I_K\tau_x)$, or $\mathcal{T}_j$ commute avec σ_z (puisque $\mathcal{T}_j$ est diagonale) ce qui permet d'écrire que

$$\mathcal{T}_j\tau_x\sigma_z = \tau_x\sigma_z\mathcal{T}_j.$$

On n'a donc pas à ce soucier de la commutation de ces termes dans $\Sigma(t,t')$ et dans les calculs à venir.
Un deuxième point à rappeler : on travaille avec des spineurs de Keldysh-Nambu et les opérateurs agissent aussi dans ces espaces. Un opérateur A aura donc 4 indices. Choisissons les indices $a, b, c, ...$ pour l'espace Keldysh et les indices $\nu, \mu, ...$ pour l'espace de Nambu ; on a donc par exemple

$$\langle \bar{d} A d \rangle = \langle \bar{d}^{a\mu} A_a{}^b{}_\mu{}^\nu d_{b\nu} \rangle = A_a{}^b{}_\mu{}^\nu \langle \bar{d}^{a\mu} d_{b\nu} \rangle$$

et pour faire apparaître les fonctions de Green, il faut anticommuter les variables de Grassmann $\langle \bar{d}^{a\mu} d_{b\nu} \rangle = -\langle d_{b\nu} \bar{d}^{a\mu} \rangle = -iG_b{}^a{}_\nu{}^\mu$, d'où

$$\langle \bar{d} A d \rangle = -iA_a{}^b{}_\mu{}^\nu G_b{}^a{}_\nu{}^\mu = -i\mathrm{Tr}\ AG.$$

Dans notre cas, on a juste besoin de l'égalité suivante

$$\langle \bar{d}(t) ABd(t') \rangle = \langle \bar{d}(t)^{a\mu} A_a{}^b{}_\mu{}^\nu B_b{}^c{}_\nu{}^\eta d(t')_{c\eta} \rangle = A_a{}^b{}_\mu{}^\nu B_b{}^c{}_\nu{}^\eta \underbrace{\langle \bar{d}(t)^{a\mu} d(t')_{c\eta} \rangle}_{-iG(t',t)_c{}^a{}_\eta{}^\mu} = -i\mathrm{Tr}\ ABG. \tag{6.10}$$

Ceci étant dit, on évite d'utiliser les notations tensorielles quand il n'y a plus d'ambiguité.

6.3 Courant

Comme pour le cas à l'équilibre (courant Josephson), l'opérateur de courant Tunnel en spineur de Nambu est donné par

$$I_j = i \left[\sum_k \Psi^\dagger_{jk} \sigma_z \Psi_{jk}, H_T \right] = i \sum_k \Psi^\dagger_{jk} \sigma_z \mathcal{T}_j d + h.c.$$

En introduisant le contour Keldysh, on doit ajouter les indices $(+,-)$ sur les opérateurs qui sont donc différentiés suivant leurs appartenances à la branche "+" qui correspond à $]-\infty, +\infty[$ ou à la branche "-" qui correspond à $]+\infty, -\infty[$. L'opérateur courant, défini de manière redondante sur les portions $+$ et $-$, est donné par

$$I_j(t) = \frac{1}{2} \left[i \sum_k \left(\Psi^\dagger_{jk}(t) \right)_+ \sigma_z \mathcal{T}_j(t) \left(d(t) \right)_+ + i \sum_k \left(\Psi^\dagger_{jk}(t) \right)_- \sigma_z \mathcal{T}_j(t) \left(d(t) \right)_- + h.c. \right].$$

On fait maintenant les rotations de Keldysh pour les fermions (Eq. 6.6) pour travailler dans l'espace (A, R, K), ce qui donne

$$I_j(t) = i \sum_k \Psi^\dagger_{jk} (\sigma_z \mathcal{T}_j) \tau_x d + h.c.$$

avec $(\sigma_z \mathcal{T}_j)\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \mathcal{T}_j \\ \sigma_z \mathcal{T}_j & 0 \end{pmatrix}$. Pour calculer le courant, on introduit un champ auxiliaire $\eta_j(t)$ en modifiant l'amplitude Tunnel par une phase $e^{i\tau_x\sigma_z\eta_j/2}$, ce qui va permettre de construire une fonctionnelle génératrice qu'on note sans ambiguité $Z[\eta]$ où l'on a simplement fait la substitution

$$\mathcal{T}_j \to \mathcal{T}_j e^{i\tau_x\sigma_z\eta_j/2}$$

dans la fonction de partition. Dans l'action qui n'est pas intégrée sur les contacts, la partie concernant le couplage Tunnel devient après cette substitution

$$S_T = -\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t \sum_{jk} \bar{\Psi}_{jk} \mathcal{T}_j e^{i\tau_x\sigma_z\eta_j/2} d + h.c.$$

et on montre [1] premièrement que

$$\langle I_j(t)\rangle = i\,\frac{1}{Z}\frac{\delta Z}{\delta\eta_j(t)}\bigg|_{\eta_j=0}. \tag{6.11}$$

On utilise maintenant l'action effective obtenue après intégration sur les contacts (voir la méthode dans l'annexe C) :

$$Z = Z_{0,S}\int \mathcal{D}(d) e^{i\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t'\ \bar{d}(t)\left[(G_{0,D}^{-1}(t))\delta(t-t')-\Sigma(t,t')\right]d(t')},$$

avec

$$\Sigma(t,t') = \sum_j \mathcal{T}_j^\dagger(t) e^{-i\tau_x\sigma_z\eta_j(t)/2} G_{0,S}(t-t') e^{i\tau_x\sigma_z\eta_j(t')/2}\mathcal{T}_j(t').$$

On considère ici un point quantique sans l'interaction coulombienne. Les calculs sont similaires mais on préfère faire provisoirement une économie de notation. Après intégration sur les contacts, en calculant avec l'égalité 6.11, on montre directement que

$$\langle I_j(t)\rangle = \frac{-i}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t'\ \left[\left\langle \bar{d}(t)\tau_x\sigma_z\Sigma_j(t,t')d(t')\right\rangle - \left\langle \bar{d}(t')\Sigma_j(t',t)\tau_x\sigma_z d(t)\right\rangle\right].$$

Avec l'égalité sur la trace (6.10), on a

$$\begin{aligned}
\left\langle \bar{d}(t)\tau_x\sigma_z\Sigma_j(t,t')d(t')\right\rangle &= -i\mathrm{Tr}\left\{\tau_x\sigma_z\Sigma_j(t,t')G_D(t',t)\right\} \\
\left\langle \bar{d}(t')\Sigma_j(t',t)\tau_x\sigma_z d(t)\right\rangle &= -i\mathrm{Tr}\left\{\Sigma_j(t',t)\tau_x\sigma_z G_D(t,t')\right\} = -i\mathrm{Tr}\left\{\tau_x\sigma_z G_D(t,t')\Sigma_j(t',t)\right\}
\end{aligned}$$

1.

$$\begin{aligned}
i\,\frac{1}{Z}\frac{\delta Z}{\delta\eta_j(t)}\bigg|_{\eta_j=0} &= i\frac{1}{Z}\int \mathcal{D}(\Psi,d,\gamma)e^{iS}\left[-i\sum_k \bar{\Psi}_{jk}\mathcal{T}_j\frac{i\tau_x\sigma_z}{2}d - i\sum_k \bar{d}\frac{(-i\tau_x\sigma_z)}{2}\mathcal{T}_j^\dagger\Psi_{jk}\right] \\
&= \frac{i}{2}\sum_k\left\langle \bar{\Psi}_{jk}\mathcal{T}_j\tau_x\sigma_z d - \bar{d}\tau_x\sigma_z\mathcal{T}_j^\dagger\Psi_{jk}\right\rangle \\
&= \langle I_j(t)\rangle.
\end{aligned}$$

où l'on utilise pour la dernière égalité, l'invariance par permutation circulaire de la trace. Le courant moyen devient finalement

$$\begin{aligned}\langle I_j(t)\rangle &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t' \ \mathrm{Tr}\left\{\tau_x\sigma_z\left[G_D(t,t')\Sigma_j(t',t) - \Sigma_j(t,t')G_D(t',t)\right]\right\} \\ &= \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left\{\tau_x\sigma_z\left[G_D * \Sigma_j(t) - \Sigma_j * G_D(t)\right]\right\}\end{aligned}$$

avec $*$ le produit de convolution (dans cette notation, il faut faire d'abord l'opération de multiplication matricielle, puis écrire que les produits sont des produits de convolution). En continuant encore les calculs, on arrive rapidement à l'égalité

$$\langle I_j(t)\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left\{\sigma_z\left[G_D^R * \Sigma_j^K(t) + G_D^K * \Sigma_j^A(t) - \Sigma_j^R * G_D^K(t) - \Sigma_j^K * G_D^A(t)\right]\right\}. \quad (6.12)$$

avec l'équation à résoudre numériquement

$$[G_D(t,t')]^{-1} = \left([G_{0,D}(t)]^{-1}\right)\delta(t-t') - \Sigma(t,t').$$

En représentation $(-,+)$, le courant est

$$\langle I_j(t)\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left\{\hat{\tau}_\mathrm{z}\sigma_\mathrm{z}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{dt}'\left(\mathrm{G(t,t')\Sigma_j(t',t) - \Sigma_j(t,t')G(t',t)}\right)\right\}.$$

6.4 Formule finale du courant pour le numérique

Quand on applique une tension sur les contacts, le courant n'est pas stationnaire et contient des harmoniques de la fréquence $\omega_J = 2eV/\hbar$. D'un point de vue calculatoire, on ne connaît en général que la transformée de Fourier des fonctions de Green G et de la *self-energy* et il n'est pas aisé de calculer la fonction elle-même. On écrit donc $G(t,t')$ sous forme d'une intégrale (transformée de Fourier inverse) de la forme $\int \mathrm{d}\omega f(\omega,t,t')g(\omega)$. Dans notre cas, il se trouve que la fonction f est périodique pour les arguments t et t' et qu'il est pratique numériquement d'écrire f en terme de transformée de Fourier discrète :

$$G(t,t') = \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty}\int_F \frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega_n t + i\omega_m t'}G_{nm}(\omega)\ , \quad (6.13)$$

$$\Sigma(t,t') = \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty}\int_F \frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega_n t + i\omega_m t'}\Sigma_{nm}(\omega)\ , \quad (6.14)$$

où $\omega_n = \omega + nV$ avec $F := [-V/2, V/2]$. Avec ces notations, la transformée de Fourier du courant s'écrit

$$I_j(\omega') = \sum_{n,l} 2\pi\delta(\omega' - (n-l)V)\frac{1}{2}\int_F \frac{d\omega}{2\pi}\mathrm{Tr}\left\{\sigma_\mathrm{z}\hat{\tau}_\mathrm{z}\ \sum_\mathrm{m}[\mathrm{G_{nm}}(\omega)\Sigma_\mathrm{j,ml}(\omega) - \Sigma_\mathrm{j,nm}(\omega)\mathrm{G_{ml}}(\omega)]\right\}, \quad (6.15)$$

où $G_{nm}(\omega)$ et $\Sigma_{nm}(\omega)$ sont des matrices 4×4. La *self-energy* peut se trouver dans l'article [28] :

$$\hat{\Sigma}_{j,nm}(\omega_n) = \Gamma_j \begin{bmatrix} \delta_{n,m} X_j(\omega_n - V_j) & \delta_{n-2V_j/V,m} Y_j(\omega_n - V_j) \\ \delta_{n+2V_j/V,m} Y_j(\omega_n + V_j) & \delta_{n,m} X_j(\omega_n + V_j) \end{bmatrix} , \tag{6.16}$$

où

$$X_j(\omega) = \left[-\frac{\Theta(\Delta_j - |\omega|)\omega}{\sqrt{\Delta_j^2 - \omega^2}} \tau_z + i \frac{\Theta(|\omega| - \Delta_j)|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - \Delta_j^2}} \begin{pmatrix} 2f_\omega - 1 & -2f_\omega \\ +2f_{-\omega} & 2f_\omega - 1 \end{pmatrix} \right] , \tag{6.17}$$

et $Y_j(\omega) = -\Delta_j X_j(\omega)/\omega$. La fonction de Green total (ou habillée) est obtenue numériquement en résolvant l'équation suivante

$$G_{nm}(\omega) = \left[G_{0,nm}^{-1}(\omega) - \Sigma_{T,nm}(\omega) \right]^{-1} , \tag{6.18}$$

où $G_{0,nm}^{-1}(\omega) = \delta_{nm}(\omega_n - \epsilon\sigma_z)\tau_z$ et $\Sigma_T = \sum_j \Sigma_j$.

6.4.1 Interaction coulombienne

On simplifie maintenant le problème de l'interaction coulombienne par une approche de champs moyens, ici, une transformation de Hubbard-Stratonovitch (HS). Le principe (voir l'annexe D), on le rappelle, étant de rendre quadratique l'action S_D de l'impureté, pour pouvoir par la suite intégrer sur les variables de Grassmann décrivant cette impureté. Cette procédure introduit toutefois des champs fictifs qui n'ont cependant pas la contrainte d'être bosonique ou fermionique (ils sont d'ailleurs parfois constants). En effet, il n'est pas demandé à ces champs HS d'être antipériodiques (cas fermioniques) ou périodiques (cas bosoniques) dans leurs conditions aux bords, par exemple dans un problème où la température intervient. Toutefois, ces champs HS commutent avec tous les autres champs.
On rappelle l'expression de l'action du point quantique en interaction :

$$S_D = \int_K dt \, \left\{ \bar{d}(i\partial_t - \epsilon\sigma_z)d + \frac{U}{2}(\bar{d}d)^2 \right\}, \quad \text{où} \quad d = \begin{pmatrix} d_\uparrow \\ \bar{d}_\downarrow \end{pmatrix}. \tag{6.19}$$

Maintenant, on généralise la transformation HS (D) au contour Keldysh :

$$\begin{aligned} e^{iS_{\text{int}}} &:= e^{i\int_K dt \frac{U}{2}(\bar{d}d)^2} \\ &= \int \mathcal{D}\phi_+ \mathcal{D}\phi_- \; e^{i\int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ -\frac{1}{2U}(\phi_+^2 - \phi_-^2) + \phi_+ \bar{d}_+ d_+ - \phi_- \bar{d}_- d_- \right\}}. \end{aligned} \tag{6.20}$$

où les indices $\pm$ des champs correspondent à un contour temporel allant de $\mp\infty$ à $\pm\infty$. En faisant la transformation $\phi_\pm \to -\phi_\pm$, l'égalité reste inchangée ; par la suite, cela implique que l'opposé d'une solution non-nulle à l'équation de consistence de l'approximation de

champs moyens est aussi une solution de cette équation. Cette remarque se matérialise notamment dans le travail numérique où il n'est pas rare de voir l'algorithme de recherche de solution trouver alternativement ces solutions.
Dans le formalisme de Keldysh, il est souvent utile de faire des rotations dans l'espace $(-,+)$ pour enlever des redondances dans les fonctions de Green. Dans le cas des bosons, la rotation est définie par le changement de variables suivant

$$\gamma_\pm := \frac{1}{2}(\phi_+ \mp \phi_-) \ , \tag{6.21}$$

donnant ainsi

$$e^{iS_{\text{int}}} = \int \mathcal{D}\phi_+ \mathcal{D}\phi_- e^{i\int_{-\infty}^{+\infty} dt\left\{-\frac{2}{U}\gamma_+\gamma_- + \gamma_+ \bar{d}d + \gamma_- \bar{d}\tau_z d\right\}}, \quad \text{avec} \quad d = \begin{pmatrix} d_+ \\ d_- \end{pmatrix}. \tag{6.22}$$

Cette méthode est décrite dans le travail de Y. Avishai et al. [25] dans le cas d'une jonction $S/QD/S$. En les suivant, il est possible d'utiliser une approximation classique en cherchant une solution avec $\delta S/\delta\gamma_\pm = 0$. On calcule ensuite sa valeur moyenne (au sens de la fonction de partition) qui est alors l'approximation de champs moyens. Ceci se résumant par la recherche de solutions données par $\delta Z/\delta\gamma_\pm = 0$, ou bien écrit autrement

$$\langle\gamma_\pm\rangle - \frac{U}{2}\left\langle \bar{d}\tau_z^{(1\pm1)/2} d\right\rangle = 0 \ . \tag{6.23}$$

L'action totale étant désormais rendue quadratique et la fonction de partition rendue gaussienne, on peut intégrer sur les variables relatives aux supraconducteurs (voir annexe C) donnant naturellement une équation (équation de Dyson) pour la fonction de Green totale dans l'espace (A, R, K)

$$[G(t,t')]^{-1} = \left([G_0(t)]^{-1} + \gamma_- + \gamma_+\tau_x\right)\delta(t-t') - \Sigma_T(t,t') \tag{6.24}$$

ou bien dans l'espace $(+,-)$

$$G^{-1} = G_0^{-1} + \gamma_-\tau_z + \gamma_+ - \Sigma_T, \tag{6.25}$$

On donne ici le résultat utilisé en pratique pour les champs HS :

$$\gamma_\pm = -i\frac{U}{2}\int_F \frac{d\omega}{2\pi}\sum_n \mathrm{Tr}\left\{\tau_z^{(1\pm1)/2}\mathrm{G}_{\mathrm{nn}}(\omega)\right\} \ , \tag{6.26}$$

où $F =]-V/2, +V/2[$ et G_{nm} la transformée de Fourier de $G(t,t')$. Les équations 6.26 et 6.25 sont résolues numériquement en cherchant un point fixe ; on aura par exemple une équation du type $f(\gamma_-) = \gamma_-$ à résoudre.
L'équation 6.24 montre que $[G_D(t,t')]^{-1}$ n'est pas triangulaire et donc, que son inverse n'est pas triangulaire. En toute généralité, dans le formalisme Keldysh, les fonctions de Green sont triangulaires dans l'espace (A, R, K) (voir par exemple [30]). Il est alors suffisant de poser $\gamma_+ = 0$ pour garder une consistance dans cette théorie. Par ailleurs, d'après

Avishai *et al.* [25], γ_+ ne produirait qu'une renormalisation des coefficients Tunnel.
Il est important de remarquer qu'il n'existe pas toujours de solution γ_- différente de zéro. Il existe une valeur minimum U_m telle que pour toute valeur de U plus petite que U_m, γ_- est égale à zéro ; autrement dit, l'approximation de champs moyens ne donne pas de solutions non-nulles pour des interactions coulombiennes trop petites. Concernant le courant Josephson de la première partie de cette thèse, ce phénomène est responsable de la transition de phase $0-\pi$ (discontinue), alors que des algorithmes numériques utilisés pour aller au-delà de l'approximation de champs moyens, donnent une transition continue.

Chapitre 7

Résultats numériques MAR

Ce chapitre présente les résultats numériques obtenus dans le cadre de l'étude de la jonction $S/QD/S+N$ (on rappelle que S désigne un supraconducteur, QD un point quantique et N un métal normal). Il se veut avant tout descriptif mais présente de manière systématique l'influence des différents paramètres du modèle. On remercie encore volontiers K. Bayandin pour son travail numérique.

7.1 Système sans interaction coulombienne

7.1.1 Vérifications sans le contact normal

Dans cette partie, on vérifie que les résultats numériques obtenus sont en accord avec d'autres travaux sur des jonctions $S/QD/S$. Dans le cas où Γ_S est grand devant le gap du supraconducteur, l'influence du point quantique devrait être négligeable dans le courant. Dans la figure 7.1, il n'y a pas de marques significatives de la présence de MAR. Ce type de système a été étudié dans un formalisme hamiltonien par Levy Yeyati *et al.* [24]. Pour $\Gamma_S < \Delta$ et pour $\epsilon = 0$, le "courant sous le gap" obtenu (voir la figure 7.1 du bas) est similaire aux courbes de références Tinkham [31] pour une jonction S/S composée de deux supraconducteurs de gaps respectifs Δ_1 et Δ_2 : un pic doit être obtenu à $|\Delta_1 - \Delta_2|$. Pour des supraconducteurs identiques, il n'y a rien. Ensuite, le courant démarre à $|\Delta_1 + \Delta_2| = 2\Delta$, c'est-à-dire à $eV = 2\Delta$. Dans le cas où $\epsilon_0 \neq 0$, il est possible d'interpréter les pics obtenus en termes de réflections d'électrons à l'interface QD/S. L'équation de Bogolioubov-de Gennes caractérise les fonctions d'ondes pertinentes et le courant est calculé en théorie de la diffusion [21]. Ce formalisme prédit la présence de pics pour $V = 2\Delta/n$ qui proviennent des réflections multiples. Ces pics sont présents dans le haut de la figure 7.1 alors que les courbes du bas ne montre que le pic principal pour $n = 1$. Ceci est bien attendu pour une faible transmission [24, 22].

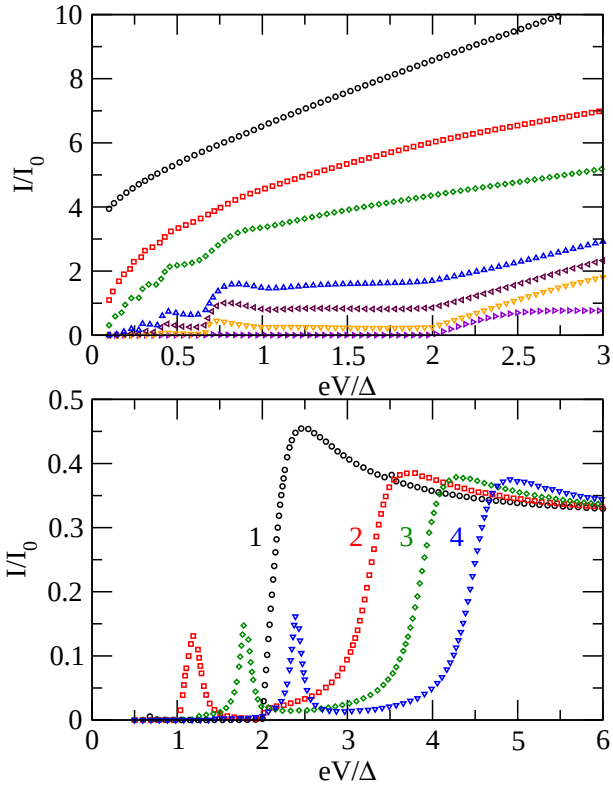

FIGURE 7.1: En haut : courant continu (en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$) en fonction de la tension V appliquée aux bornes supraconductrices avec une énergie du point quantique ϵ_0 nulle, pour différentes valeurs du coefficient de transmission $\Gamma_S/\Delta = \{0.05, 0.2, 0.35, 0.5, 1.0, 1.5, 5.0\}$ (du bas vers le haut). En bas : courant continu pour différentes valeurs du niveau d'énergie du point quantique en unités de gap Δ : $\epsilon_0/\Delta = 0.0$ (1), 0.6 (2), 0.9 (3), 1.2 (4).

7.1.2 Signature de la transition incohérent-cohérent dans les harmoniques

On connaît désormais les principales caractéristiques de la jonction principale $S/QD/S$. Puisqu'il est attendu que le contact normal caractérisé par le paramètre de transmission Γ_N devrait être une source de décohérence, on se propose ici d'étudier le courant DC mais aussi ses harmoniques afin de caractériser la transition entre régime cohérent $\Gamma_N = 0$ et décohérent $\Gamma_N = 1$.

Pour référence, on montre dans la figure 7.2 les premières harmoniques du courant

$$I(t) = I_{\rm dc} + I_{\cos}\cos(2eVt/\hbar) + I_{\sin}\sin(2eVt/\hbar) + \dots \tag{7.1}$$

pour $\epsilon_0 = 0$, $\Gamma_N = 0$ et un couplage intermédiaire $\Gamma_S/\Delta = 0.35$.

7.1.3 Sur les harmoniques

Les premières harmoniques ont été calculées pour une jonction $S/N/S$ par Bardas et Averin [32]. Ils ont montré que les contributions en cosinus et sinus conduisent à des

structures dans la région caractéristique du MAR. On retiendra ici que pour des transmissions faibles, à intermédiaires, la composante en cosinus tend vers zéro pour $V = 0$ alors que la composante en sinus reste finie. Pour comparer nos résultats, on étudie la figure 7.2 où le contact normal est absent (cercles bleus sur la figure). On retrouve alors les principales caractéristiques des premières harmoniques dans le courant avec des pics dans la zone du MAR, les pics associés au MAR localisés en $V = 2\Delta/n$, ainsi que le constat selon lequel la composante en sinus est finie pour une tension nulle alors que la composante en cosinus tend vers zéro. On peut relier ce comportement au courant Josephson : si la tension tend vers zéro, le terme $2eVt/\hbar \equiv \phi_0$ est supposé évoluer très lentement et on se place dans un régime stationnaire. La composante paire (en cosinus) tend vers zéro et il ne reste qu'un courant du type $I_{\sin} \sin(\phi_0)$. On voit (c.f. la figure 7.2) que $I_{\sin}$ a une l'amplitude positive, ce qui est attendu lorsqu'on a une jonction Josephson dépourvue d'interaction coulombienne (autrement dit, en l'absence d'interaction coulombienne, il n'y a pas de transition π qui pourrait donner une amplitude négative). Sur la même figure on montre, les effets du contact métallique. On pose $V_N = 0$, ce qui correspond à l'absence de courant dans le contact normal. Pour un couplage faible ($\Gamma_N/\Delta = 0.1$ (alors que $\Gamma_S/\Delta = 0.35$), le contact normal modifie notoirement les caractéristiques du courant à basse tension. Maintenant, pour une perturbation $\Gamma_N/\Delta = 0.1$, il semble que ce soit la composante en cosinus qui subsiste avec une composante en sinus qui s'est rapprochée de zéro. Ce constat va nous ammener à utiliser une autre représentation pour décrire les effets du contact normal.

7.1.4 La représentation amplitude-phase

Une autre manière de montrer ces résultats consiste à calculer l'amplitude et la phase de la première harmonique

$$I_{\cos} \cos \omega_J t + I_{\sin} \sin \omega_J t = I_{\text{a.c.}} \sin\left(\omega_J t + \varphi\right) . \tag{7.2}$$

Cette paramétrisation permet de caractériser l'effet du contact normal (et de la décohérence) pour des tensions faibles. On choisit ici garder la même valeur pour $2\Gamma_S + \Gamma_N$, avec ou sans le contact normal. Cette contrainte est liée à l'élargissement de la densité d'état du point quantique dû à des couplages avec les deux supraconducteurs et le métal normal. Cette prescription est utilisée par exemple par Buitelaar *et al.* [27]. A la figure 7.3, on choisit deux ensembles de paramètres a) $\Gamma_S = 0.385\Delta$, $\Gamma_N = 0$ et b) $\Gamma_S = 0.35\Delta$, $\Gamma_N = 0.07\Delta$. Deux cas sont à différentier : $eV < \Delta$ et $eV > \Delta$.

1. Pour le courant DC (figure 7.3 (haut)), pour $eV > \Delta$, le contact normal réduit l'amplitude du courant.
2. Pour $eV < \Delta$, à la précision numérique réalisé ici ($eV > 0.15\Delta$), le courant DC atteint une valeur finie pour des tensions faibles contrairement au courant de la

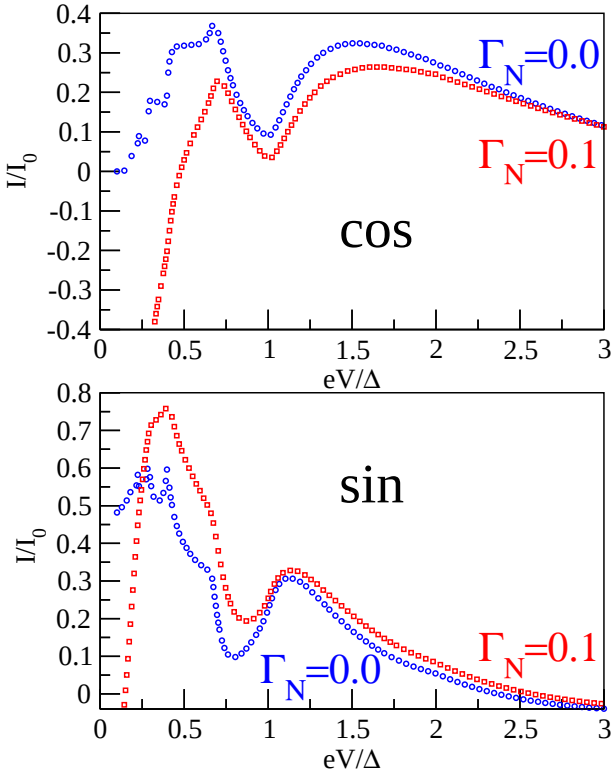

FIGURE 7.2: Dépendance en fonction de la tension des premières harmoniques du courant $I(t)$ (voir l'équation 7.1) à travers un point quantique : composante en sinus (en bas) et composante en cosinus (en haut) en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$. Le niveau d'énergie du point quantique est $\epsilon_0 = 0$ et le coefficient de transmission de la jonction QS/S est $\Gamma_S/\Delta = 0.35$. Le couplage avec le contact normal est donné en termes du coefficient de transmission de la jonction QD/N : $\Gamma_N/\Delta = 0.0$ (cercles bleus) et $\Gamma_N/\Delta = 0.1$ (carrés rouges).

jonction de référence $S/QD/S$ mais elle devrait toutefois tendre vers zéro pour une tension tendant vers zéro [1].

L'amplitude de la première harmonique (figure 7.3 (milieu)) donne essentiellement les mêmes caractéristiques que le courant DC : en présence du contact normal, une augmentation du courant dans la région du MAR et une diminution du courant au delà. A la figure 7.3 (bas), on montre une signature importante du contact normal : *pour des tensions faibles, l'harmonique est déphasée en présence du contact normal.*

Lorsque la tension V est suffisamment grande, le courant DC devient linéaire et correspond au courrant de quasi-particule. De plus, l'amplitude de la première harmonique semble tendre vers zéro (voir la figure 7.3). Ce comportement est indépendant du contact normal. Mais pour le courant sous le gap, les caractéristiques du MAR restent visibles. En augmentant maintenant le couplage avec le réservoir normal (voir la figure 7.4), le courant sous le gap devient linéaire, ce qui montre d'une part que la cohérence de phase

1. En effet la jonction étant totalement symétrique dans les paramètres, on s'attend à la propriété $I(-V;t) = -I(V;t)$ pour le courant total et en faisant une moyenne temporelle de cette égalité (ou une transformée de Fourier à une fréquence nulle) en prenant $V = 0$, on obtient bien que le courant DC s'annule pour $V = 0$.

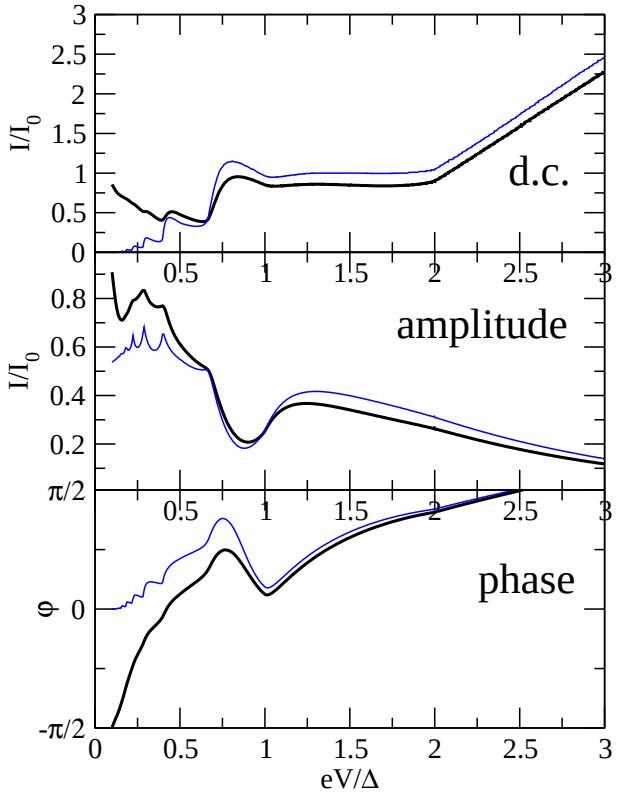

FIGURE 7.3: Courant DC (en haut) en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$. Amplitude (au milieu) en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$, phase (en bas) de la première harmonique du courant (voir la formule 7.2) pour deux ensembles différents de coefficients de transmissions Γ_S et Γ_N respectivement associés aux jonctions QD/S et QD/N : $\{\Gamma_S/\Delta = 0.385,\ \Gamma_N = 0\}$ (trait bleu) et $\{\Gamma_S/\Delta = 0.35,\ \Gamma_N/\Delta = 0.007\}$ (trait noir) avec la même valeur du niveau d'énergie du point quantique $\epsilon_0 = 0$.

a tendance à disparaître et d'autre part que la jonction devient une jonction composée de deux jonctions NS en série.

7.2 Description du déphasage en fonction de Γ_N et Γ_S

En fonction de Γ_N et Γ_S, les résultats sont essentiellement identiques : la première harmonique est déphasée en présence du contact normal ; ce qui se voit dans les figures représentant $(I_{\cos}, I_{\sin})$ ou $(I_{\text{a.c.}}, \varphi)$ avec

$$I_{\cos} \cos \omega_J t + I_{\sin} \sin \omega_J t = I_{\text{a.c.}} \sin (\omega_J t + \varphi).$$

On fixe les valeurs suivantes : $\epsilon_0 = 0$ et $\Gamma_S/\Delta = 0.35$. On varie maintenant le paramètre Γ_N pour une étude systématique de l'effet de déphasage. Le courant DC montre (Fig. 7.4) que le courant est bien réduit quand le couplage ($\Gamma_N/\Delta = 0.5$) avec les contacts est réduit ($\Gamma_S/\Delta \in [0.5, 5.0]$ de bas en haut).

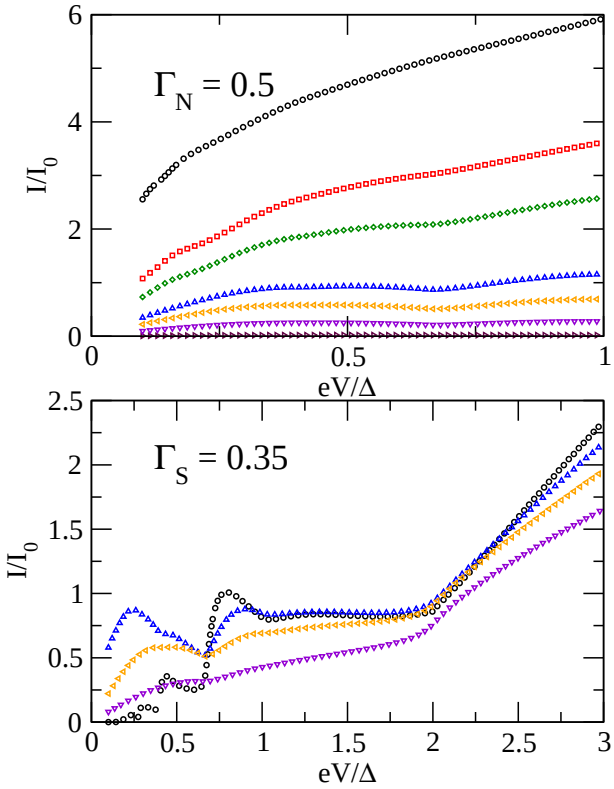

FIGURE 7.4: En haut : composante DC du courant (en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$) pour un niveau d'énergie dans le point quantique $\epsilon_0 = 0$, un coefficient de transmission de la jonction QD/N donné par $\Gamma_N/\Delta = 0.5$ et différentes valeurs du coefficient de transmission de la jonction QD/S : $\Gamma_S/\Delta = \{0.05, 0.2, 0.35, 0.5, 1.0, 1.5, 5.0\}$ (de bas en haut). En bas : composante DC du courant (en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$) pour $\epsilon_0 = 0$ et $\Gamma_S/\Delta = 0.35$ avec différentes valeurs du coefficient de transmission de la jonction QD/N : $\Gamma_N/\Delta = \{0.0, 0.2, 0.5, 1.0\}$ (noir, bleu, orange, violet).

7.3 Interaction coulombienne

Dans cette partie incluant l'interaction coulombienne, on étudie le courant passant par la jonction principale $S/QD/S$ en présence ou non du contact normal. L'introduction de l'interaction coulombienne dans un point quantique décale l'énergie ϵ_0 de $U/2$ (voir la section 3.3). Le choix de $V_N = 0$ qui correspondait à un courant nul passant dans le contact normal n'est désormais plus justifié. Nous faisons toutefois le choix de garder $V_N = 0$, à cause de simulations numériques trop lourdes.

7.3.1 Courant DC

Sur la figure 7.6, on montre le courant DC et sa première harmonique (amplitude et déphasage) pour $\Gamma_S = 0.35\Delta$, $\Gamma_N = 0.0$, $\epsilon = 0.0$ et différentes valeurs de l'interaction coulombienne $U/\Delta = \{0.0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0\}$. On retrouve alors les résultats de Avishai *et al.* [25] où l'on montre que le courant à $eV < \Delta$ est réduit par une interaction coulombienne importante. Toutefois les caractéristiques du MAR sont préservées. La

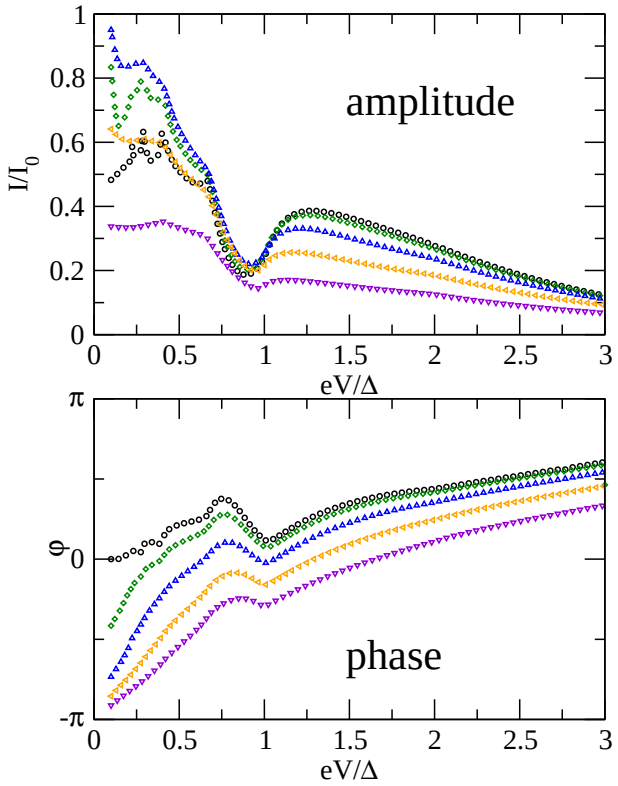

FIGURE 7.5: Amplitude (en haut) en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$ et phase (en bas) de la première harmonique du courant (voir l'équation 7.2) pour un niveau d'énergie du point quantique $\epsilon_0 = 0$ et un coefficient de transmission de la jonction QD/S donné par $\Gamma_S/\Delta = 0.35$ avec différentes valeurs du coefficient de transmission de la jonction QD/N : $\Gamma_N/\Delta = \{0.0, 0.05, 0.2, 0.5, 1.0\}$ (noir, vert, bleu, orange, violet).

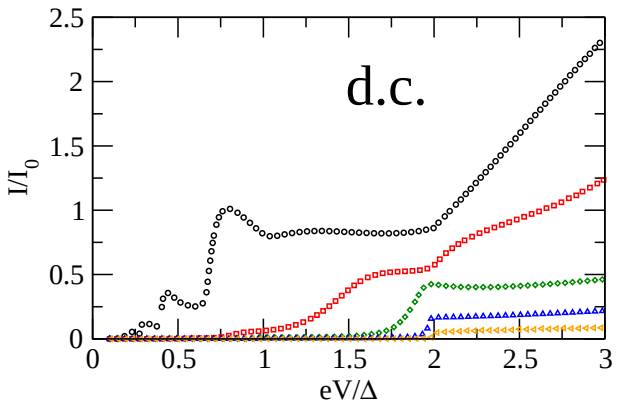

FIGURE 7.6: Courant DC (en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$) avec un niveau d'énergie du point quantique $\epsilon = 0$, un coefficient de transmission de la jonction QD/S donné par $\Gamma_S/\Delta = 0.35$ et un coefficient de transmission de la jonction QD/N donné par $\Gamma_N = 0$ avec différentes valeurs de l'interaction coulombienne $U/\Delta = \{0.0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0\}$ (noir, rouge, vert, bleu, orange).

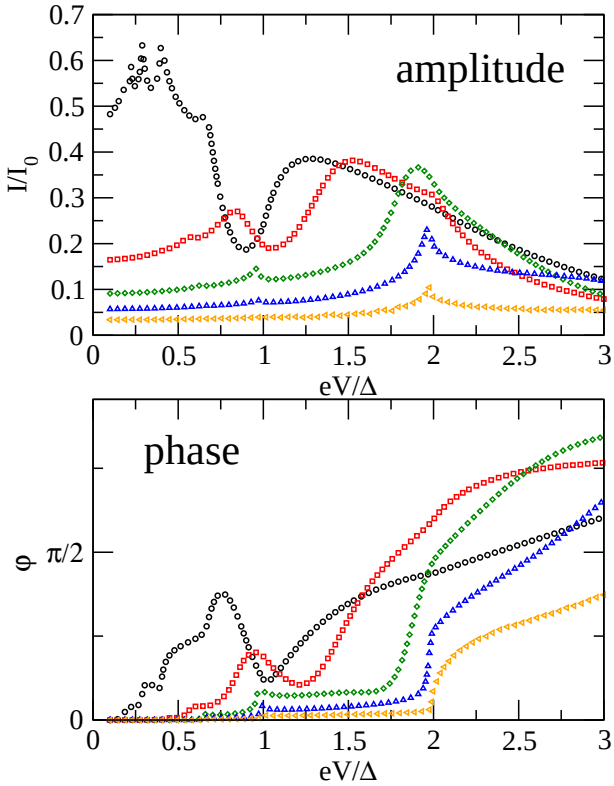

FIGURE 7.7: Amplitude (haut) en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$ et phase (bas) de la première harmonique du courant (voir l'équation 7.2) avec un niveau d'énergie dans le point quantique $\epsilon = 0$, un coefficient de transmission de la jonction QD/S donné par $\Gamma_S/\Delta = 0.35$ et un coefficient de transmission de la jonction QD/N donné par $\Gamma_N = 0$, avec différentes valeurs de l'interaction coulombienne $U/\Delta = \{0.0, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0\}$ (noir, rouge, vert, bleu, orange).

diminution de l'amplitude est assimilée à un déplacement des résonances dans la densité d'état. Absente de l'article de Avishai *et al.* [25], l'étude de l'amplitude et de la première harmonique en l'absence du contact normal est réalisée ici à titre de référence pour la suite.

7.3.2 Première harmonique sans le contact normal $\Gamma_N = 0$

A la figure 7.7, on montre les structures du MAR dans la première harmonique du courant dont l'amplitude diminue au fur et à mesure qu'on augmente l'interaction coulombienne. La valeur de l'interaction coulombienne $U = 0.3\Delta$ est supérieure à la valeur minimale $U_{min}(V)$ pour laquelle il existe une solution non nulle à l'équation de consistance de l'approximation de champs moyens. On rappelle que cette méthode fait intervenir un champ classique (au sens où il est un extremum de l'action) qui doit satisfaire une équation de mouvement. Cette méthode ne trouve alors qu'une solution classique ou bien une solution nulle. Par exemple, pour $U = 0.1\Delta$ et $U = 0.2\Delta$, la seule solution est $\gamma_- = 0$.

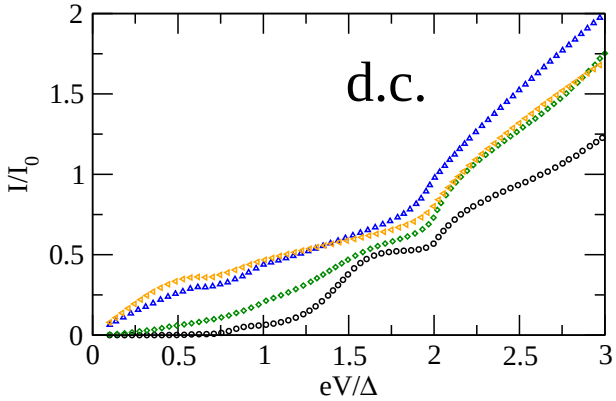

FIGURE 7.8: Courant DC (en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$) avec un niveau d'énergie dans le point quantique $\epsilon = 0$, un coefficient de transmission de la jonction QD/S donné par $\Gamma_S/\Delta = 0.35$ et une interaction coulombienne $U/\Delta = 0.3$ avec différentes valeurs du couplage avec le contact normal en termes du coefficient de transmission de la jonction QD/N : $\Gamma_N/\Delta = \{0.0, 0.2, 0.5, 1.0\}$ (noir, vert, bleu, orange).

7.3.3 Première harmonique avec $\Gamma_N \neq 0$

Pour la figure 7.8, on fixe l'interaction coulombienne à $U = 0.3\Delta$ et on fait varier le couplage $\Gamma_N/\Delta = \{0.0, 0.2, 0.5, 1.0\}$. L'amplitude et la phase de la première harmonique sont montrées à la figure 7.9. On note que la valeur de l'interaction coulombienne choisie, correspond à une valeur intermédiaire $U = 0.3\Delta$ (carrés rouges dans la figure 7.6) pour laquelle on peut voir distinctement le MAR dans le courant. Lorsqu'on augmente le couplage Γ_N, la phase est négative ($< -\pi/2$) comme dans le cas $U = 0$. Encore une fois, le déphasage de la première harmonique permet de caractériser la présence du métal normal.

7.4 Résumé

Nous avons étudié l'influence d'un contact normal sur le courant d'une jonction principale $S/QD/S$. Nous sommes partis des modèles hamiltoniens puis, en utilisant le formalisme hors-équilibre de Keldysh, on a pu obtenir numériquement le courant DC et sa première première harmonique. Nos résultats sur la jonction principale sont consistants avec des résultats obtenus en théorie de la diffusion.

On a ensuite mis l'accent sur le passage d'un régime de transport cohérent à un régime incohérent. Le régime cohérent étant essentiellement caractérisé par la présence de réflections multiples entre les contacts (MAR) induites par la supraconductivité ; détruire la cohérence quantique des paires de Cooper revient alors à détruire les caractéristiques du MAR.

L'étude initiée par Bardas et Averin [32] des premières harmoniques permet quant à elle de reconnaître la signature du contact normal : la première harmonique est déphasée à faible tension.

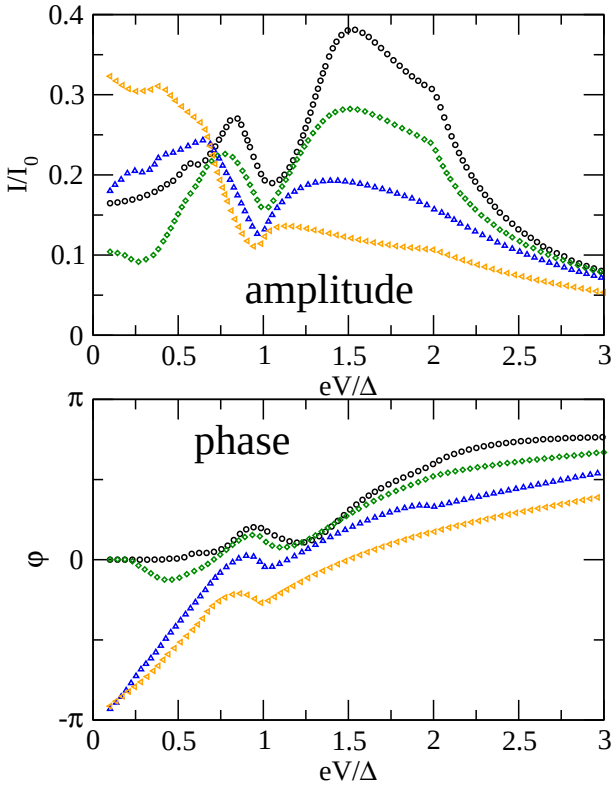

FIGURE 7.9: Amplitude (haut) en unités de $I_0 = e\Delta/2\pi\hbar$ et phase (bas) de la première harmonique du courant (voir l'équation 7.2) pour un niveau d'énergie du point quantique $\epsilon = 0$, un coefficient de transmission de la jonction QD/S donné par $\Gamma_S/\Delta = 0.35$ et une interaction coulombienne $U/\Delta = 0.3$ avec différentes valeurs du couplage avec le contact normal en termes du coefficient de transmission de la jonction QD/N : $\Gamma_N/\Delta = \{0.0, 0.2, 0.5, 1.0\}$ (noir, vert, bleu, orange).

Deux limites sont remarquables : lorsque la tension tend vers zéro, la phase $2eVt/\hbar \equiv \phi_0$ évolue lentement et on se place dans un régime quasi-stationnaire. Le courant est de la forme $I_{\sin}\sin(\phi_0)$ (le courant DC et la composante en cosinus tendent vers zéro) ; on retrouve alors la signature du courant Josephson. Nous sommes en régime cohérent. Ce comportement est radicalement modifié par la présence du contact normal ; dans la limite où le transport est incohérent ($\Gamma_N/\Delta > 1$), le courant devient linéaire, que ce soit le courant sous le gap (on a une décroissance linéaire à la place d'une décroissance exponentielle dans le régime cohérent) ou le courant de quasi-particules et la jonction est composée de deux jonctions NS incohérentes en série. Le contact métallique peut donc être vu comme un contact qui déphase la première harmonique, mais puisqu'il a tendance à détruire les effets de la supraconductivité dans le point quantique, le contact normal est aussi la source d'un effet de proximité inverse.

Troisième partie

Liquide de Luttinger : bruit

Chapitre 8

Nanotube de carbone et STM [1]

8.1 Avant-propos

Cette partie traite du bruit dans un nanotube couplé à la pointe d'un microscope à effet tunnel. Le travail présenté est une fusion des articles de Lebedev *et al.* [7] et de Crépieux *et al.* [33]. Le premier article traite des corrélations dans un système nanotube-STM (voir la figure 8.1) dans un nanotube de carbone avec des contacts parfaits en présence d'une tension constante. Le deuxième article utilise une tension alternative, des calculs et des idées qui seront repris dans le travail présenté ici. Ce chapitre décrit donc l'ajout d'une tension alternative dans un système identique à Lebedev *et al.* [7], mais en se restreignant au bruit calculable "à la main". Pour un travail numérique, on se reporte à l'article de Guigou *et al.* [34].

8.2 Le bruit

Pour étudier le transport d'électrons à travers une jonction quelconque, le courant est le signal physique qu'il convient d'obtenir en premier lieu. Les corrélations de courant ont toutefois pris une place importante en physique mésoscopique puisqu'elles peuvent révéler certaines caractéristiques absentes du courant. La corrélation r entre deux variables x et y est donnée généralement par

$$r = \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{\sigma_{xx}\sigma_{yy}}}$$

où $\sigma_{xy} = \langle\, [x - \langle x\rangle]\, [y - \langle y\rangle]\, \rangle = \langle xy\rangle - \langle x\rangle\langle y\rangle$. Si $r = 0$, les variables x et y ne sont pas corrélés. En électronique moléculaire, on n'interprète pas les corrélations en termes de variables corrélées afin de chercher une quelconque relation entre les variables étudiées.

1. Scanning Tunneling Microscope ou encore microscope à effet tunnel

On s'intéresse généralement uniquement à σ_{xy} où $x = I(t+\tau)$ et $y = I(t)$ sont maintenant des opérateurs. La prescription généralement utilisée pour former des opérateurs hermitiens est d'ajouter l'hermitien conjugué lorsqu'on est sûr que la quantité physique mesurée est bien $I(t+\tau)I(t)$. Une autre argumentation consiste à dire que les corrélations quantiques ont la même symétrie que les corrélations classiques $\sigma_{x(t)x(t')} \equiv \phi(t-t')$

$$S(\tau) = S(-\tau).$$

Cette symétrie est respectée si on pose le bruit symétrisé

$$S(t-t') = \frac{1}{2}\langle \hat{x}(t)\hat{x}(t') + \hat{x}(t)\hat{x}(t')\rangle;$$

c'est ce que Landau *et al.* [35] donnent dans leurs cours de physique théorique.
Expérimentalement, ce n'est pas en général la quantité mesurée qui est plutôt la transformée de Fourier des corrélations de courant. Il faut donc définir les corrélations expérimentales autrement et de manière évidente elles vont dépendre de chaque dispositif expérimental. Des thèses récentes de Gavish [6] (2004) et Creux [5] (2007) sont consacrées à la question initiée par Lesovik et Loosen [36] de savoir ce qu'est le bruit mesuré en fonction du circuit considéré. Il n'y a pas de relation générale indépendante du circuit mais le bruit mesuré est en général une fonction du bruit non symétrisé

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\ e^{i\omega t}\langle \hat{I}(0)\hat{I}(t)\rangle.$$

Si on veut rester le plus général possible et avoir des quantités indépendantes du dispositif expérimental, nous proposons ici uniquement le calcul du bruit non symétrisé ; par la suite, on appellera simplement *bruit*[2], la quantité définie par

$$S(x,x';t,t') = \langle I(x,t^-)I(x',t'^+)\rangle \tag{8.1}$$

où $\pm$ sont les indices temporels pour le contour Keldysh et $I(x',t'^{\pm})$ sont les opérateurs de courant dans la représentation de Heisenberg.

8.3 Le bruit, caractérisation de charges anormales

En électronique moléculaire, une part importante est désormais réservée à l'étude des nanotubes de carbone. Ils constituent désormais une réalisation expérimentale de conducteurs à une dimension. Dans cette thèse et du point de vue théorique, on a distingué deux manières de décrire les nanotubes :

2. On peut être habitué à voir dans la définition du bruit un terme supplémentaire $-\langle I(x,t^-)\rangle\langle I(x',t'^+)\rangle$, mais les calculs perturbatifs montrent que ce terme est de l'ordre de Γ^4 alors que $\langle I(x,t^-)I(x',t'^+)\rangle$ est de l'ordre de Γ^2.

– Pour étudier les corrélations de courant, on dispose du modèle de Egger et Gogolin [37, 38] qui donne un modèle effectif proche du liquide de Luttinger (un nanotube est un liquide de Luttinger, plus des corrections souvent négligeables).
– Dans une autre partie de la thèse consacrée au SQUID de nanotubes, un nanotube est vu comme un point quantique en présence d'interactions coulombiennes.

Nous utilisons ici le modèle de Egger et Gogolin [37, 38] qui décrit un nanotube en termes de liquide de Luttinger. La particularité qui nous intéresse se situe dans la charge des excitations électroniques qui n'est pas celle des électrons. Dans l'effet Hall quantique fractionnaire, la mesure du bruit a pu confirmer expérimentalement que les charges sont fractionnaires. De manière assez répandue, on a une relation entre le bruit S et la transformée de Fourier (sur la variable temporelle t) du courant $I(x,t)$ au point x

$$S(x,x,\omega=0) = 2e^* I(x,\omega=0)$$

où e^* est interprété comme la charge élémentaire transportée par le courant. Dans le cas d'un métal normal, e^* est la charge de l'électron e ; dans le cas de l'effet Hall quantique fractionnaire, on a $e^* = \nu e$ où $\nu \neq 1$. Dans un nanotube infini connecté à une pointe STM (voir la figure 8.1), Crépieux *et al.* [39] montrent que les corrélations de courant sont

$$\begin{aligned} S(x,x,\omega=0) &= \left(\frac{1+K_{c+}^2}{2}\right) e\, I(x,\omega=0) \\ S(x,-x,\omega=0) &= \left(\frac{1-K_{c+}^2}{2}\right) e\, I(x,\omega=0) \end{aligned} \tag{8.2}$$

où K_{c+} est un des paramètres du modèle de liquide de Luttinger contenant les interactions coulombiennes. Si $K_{c+} = 1$, le système est libre (gaz d'électrons) ; par contre,

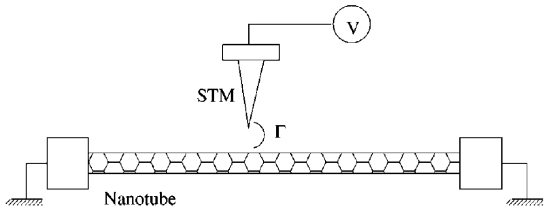

FIGURE 8.1: Représentation schématique du système dans [39] où ils considèrent l'injection d'électrons dans un nanotube par une pointe STM de potentiel V ; le couplage entre le nanotube et la pointe STM est caractérisé par un coefficient de transmission Γ. Nous utilisons cette même géométrie dans ce chapitre avec dans notre cas un potentiel dépendant du temps (voir 8.8).

la présence d'interactions coulombiennes renormalise ce paramètre tel que $K_{c+} < 1$. L'équation 8.2 ne donne cependant pas la charge effective attendue. Pham *et al.* [40] montrent que l'hamiltonien d'un liquide Luttinger formant une boucle peut se décomposer en deux partie H_+ et H_- décrivant respectivement la propagation d'excitations vers la gauche et vers la droite ($H = H_+ + H_-$ et $[H_+, H_-] = 0$). Il est alors possible

de construire un espace de Fock avec ces excitations. Si on injecte Q quasi-particules donnant un courant J normalisé entier alors $Q+$ vont aller vers la droite et Q_- vers la gauche tel que

$$\begin{aligned} Q &= (Q_+ + Q_-), \qquad Q \in \mathbb{N} \\ KJ &= (Q_+ - Q_-), \quad J \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

Dans le cas de Crépieux *et al.* [39], lors de l'injection d'électrons par la pointe STM (voir la figure 8.1), $Q_\pm = \frac{1 \pm K_{c+}}{2}$ charges se propagent en sens opposé. Ils montrent alors que les corrélations de courant sont

$$\begin{aligned} S(x,x) &\sim \frac{Q_+^2 + Q_-^2}{2} = \frac{1+K_{c+}^2}{4} \\ S(x,-x) &\sim -\frac{Q_+ Q_-}{2} = -\frac{1-K_{c+}^2}{4}. \end{aligned} \tag{8.3}$$

La mesure du bruit permet alors d'avoir le paramètre K_{c+} ; mais seule, elle ne suffit pas à déterminer la charge effective des excitations. Il est toutefois suffisant[3] de mesurer le couple bruit-corrélations croisées dans ce cas (nanotube infini). La présence de contacts donne $S(x,-x) = 0$ à l'ordre Γ^2. Pour une tension constante, une méthode a été proposée par Lebedev *et al.* [7] pour s'affranchir de cette difficulté en utilisant le bruit à fréquence finie. Cependant, pour rester dans l'optique d'une caractérisation du système par le bruit à fréquence nulle, nous allons montrer les effets d'une tension alternative sur les corrélations de courant.

8.4 Quelques mots sur la bosonisation

Le système qui nous intéresse est composé d'un nanotube de carbone et d'une pointe STM. L'article de Egger et Gogolin [37] décrit le nanotube en termes de liquide de Luttinger, tout ceci étant possible par l'utilisation de la bosonisation. Dans cette section, on se restreint à introduire les idées de la bosonisation qui permet de traiter de manière non perturbative les interactions dans des systèmes unidimensionnels. On peut souligner que la bosonisation a largement envahit la physique mathématique et aborde des thèmes qui dépasse le cadre de ce travail dont le but avoué est d'obtenir une formule du bruit calculable par la suite numériquement. La bosonisation sert ainsi en matière condensée "de tous les jours" à transformer un problème d'électrons en interactions à un problème de bosons libres. La résolution de ce problème en une dimension a commencé avec un article de Tomonaga [42] (1950) et suivi par Luttinger [43] (1963), Mattis et Lieb [44] (1965). Par

3. D'après 8.3, on a

$$\frac{1+K^2}{1-K^2} = \frac{Q_+^2 + Q_-^2}{Q_+ Q_-}.$$

Si on pose $X = Q_+/Q_-$, tant que $0 < K < 1$, l'équation $\frac{1+K^2}{1-K^2} = X + 1/X$ ne donne de solutions réelles que pour $0,58 < K < 1$; or on[38] estime à $K \approx 0,18$ pour l'expérience dans [41].

la suite, des bases plus rigoureuses de la construction de la bosonisation ont été posées par Haldane [45] (1981) et un article de von Delft et Schoeller [46] résume une méthode constructive de la bosonisation. Les ouvrages de matière condensée traitent désormais des systèmes unidimentionnels et de la bosonisation (par exemple Altland et Simons [47]). Il existe aussi une approche fonctionnelle (utilisant les variables de Grassmann à la place d'opérateurs) qui utilise une transformation de Hubbard-Stratonovich (par exemple Lerner et Yurkevich [48]).
Concernant la bosonisation fonctionnelle, on décrit maintenant les idées permettant d'obtenir une action qui ne dépend alors que d'une variable complexe avec conditions aux bords périodiques[4]. L'hamiltonien général en une dimension pour des électrons en interactions est donné par

$$\begin{aligned} H &= \int \mathrm{d}x\, c^\dagger(x) \left[-\frac{\partial_x^2}{2m} - E_F + v(x) \right] c(x) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\, c^\dagger(x) c^\dagger(x') V_0(x-x') c(x') c(x). \end{aligned} \tag{8.4}$$

En supposant que les énergies pertinentes pour le transport à basse température sont les énergies au voisinage des deux points $-k_F$ et k_F. Après le passage à la fonction de partition fonctionnelle (voir l'annexe A), on peut alors décomposer les champs *grassmaniens* en deux parties représentant des électrons allant vers la droite et vers la gauche

$$c(x) \approx c_R(x) e^{ik_F x} + c_L(x) e^{-ik_F x}. \tag{8.5}$$

Cette approximation introduit une coupure ultraviolette au-delà de laquelle la linéarisation n'est plus une bonne approximation. Une autre approximation consiste à supposer que les $c_{L/R}$ varient lentement sur une échelle de l'ordre de k_F^{-1} de sorte qu'on puisse négliger les dérivées d'ordre deux lorsqu'on injecte (8.5) dans (8.4). L'action du modèle de Tomonaga-Luttinger pour un contour temporel fermé (contour Keldysh) est alors

$$S = S_0 + S_{\text{int}}$$

avec une partie libre donnée par

$$S_0 = \int \mathrm{d}x\mathrm{d}t\, \bar{\Psi}(x,t) \begin{pmatrix} i\partial_R & v(x,t) \\ \bar{v}(x,t) & i\partial_L \end{pmatrix} \Psi(x,t)$$

en suivant les notations suivantes

$$\Psi = \begin{pmatrix} c_R \\ c_L \end{pmatrix}, \quad \bar{\Psi} = \begin{pmatrix} \bar{c}_R & \bar{c}_L \end{pmatrix}, \quad \partial_{R/L} \equiv \partial_t \pm v_F \partial_x.$$

4. On rappelle que dans la formulation de la fonction de partition en utilisant les états cohérents, les opérateurs bosoniques sont représenté par des fonctions complexes avec des conditions aux bords périodiques et les opérateurs fermioniques par des variables de Grassmann avec conditions aux bords anti-périodiques.

Le deuxième terme de l'action donne l'interaction en fonction de $n = \bar{\Psi}\Psi$

$$S_{\text{int}} = -\frac{1}{2}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\mathrm{d}t\, n(x,t)V_0(x-x')n(x',t).$$

Ce genre d'interaction quartique est toujours difficile à traiter et il est assez naturel par la suite d'utiliser une transformation de Hubbard-Stratonovich. Après une partie technique largement détaillée dans Lerner et Yurkevich [48], l'action finale dépend maintenant d'un champ complexe Φ avec la notation $z = (x,t)$

$$S[\Phi] = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}z\mathrm{d}z'\Phi(z)G^{-1}(z-z')\Phi(z') + \alpha\int \mathrm{d}z\left[v(z)e^{-i\Phi(z)} + c.c.\right]$$

Le premier terme correspond à l'action du liquide Luttinger en l'absence d'un potentiel externe $v(z)$. Dans notre cas, la fonction Green $G(z-z')$ correspond à la fonction de Green d'un nanotube de carbone et la constante α n'interviendra que dans la partie de cette thèse consacrée à la renormalisation d'une impureté étendue. Une impureté locale est par exemple définie par

$$v(x) = \lambda v_F \delta(x)$$

où λ est l'intensité sans dimension du couplage avec l'impureté. Les résultats sont donnés dans [48] et on peut citer par exemple la thèse de Torrès [49] consacrée au transport et au bruit dans les fils mésoscopiques. Le parti pris consiste alors à obtenir un hamiltonien en termes de champs bosoniques en utilisant les relations démontrées dans le cadre de la bosonisation constructives [46] puis à donner de manière plus ou moins justifiée la fonction de partition en termes d'intégrales fonctionnelles. Par exemple dans Altland et Simons [47], on postule tout simplement l'existence de cette fonction de partition laissant de côté sa construction à partir des états cohérents. En général, c'est ce qui est fait dans les travaux se basant sur la bosonisation constructive en termes d'opérateurs et qui passent ensuite au formalisme fonctionnel. La bosonisation fonctionnelle qu'on trouve par exemple dans [48, 50, 51] comble ce vide. Dans cette thèse, en suivant les calculs de [38, 39, 37, 33, 7], la bosonisation est utilisée en termes d'opérateurs.

8.5 Le modèle

On considère une pointe STM suffisamment proche d'un nanotube de carbone dont les extrémités sont connectées à des contacts métalliques [5] (voir la figure 8.1). Une tension appliquée entre le STM et le nanotube permet d'injecter des électrons dans la région centrale du nanotube. L'axe du nanotube correspond à l'axe de la coordonnée spatiale

5. Dans le modèle, il n'y a toutefois pas d'hamiltoniens pour ces contacts métalliques. L'astuce consiste alors à utiliser certaines conditions aux bords lorsqu'on calcule les fonctions de Green. Ceci est possible parce qu'un conducteur métallique unidimensionnel est aussi un liquide de Luttinger avec un certain paramètre égale à l'unité, ici $K_{c+} = 1$. Le même type d'astuce peut être employé pour des contacts supraconducteur-métal, puisqu'un métal est aussi un supraconducteur avec un certain paramètre Δ (le gap) égale à zéro . Introduire des conditions aux bords "métalliques", c'est se définir une fonction $K_{c+}(x)$ (ou $\Delta(x)$ dans le cas des supraconducteurs).

x avec pour origine le milieu du nanotube. Le système est décrit par l'hamiltonien total

$$H = H_{\mathrm{N}} + H_{\mathrm{STM}} + H_{\mathrm{T}}.$$

Le nanotube est considéré comme un liquide de Luttinger nonchiral [38] (pas de sens privilégié dans les modes de propagations possibles)

$$H_{\mathrm{N}} = \frac{1}{2}\sum_{j\delta}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}t\ v_{j\delta}(x)\left[K_{j\delta}(x)(\partial_x\phi_{j\delta}(x,t)^2 + K_{j\delta}^{-1}(x)(\partial_x\theta_{j\delta}(x,t))^2\right] \tag{8.6}$$

où $\phi_{j\delta}$ et $\theta_{j\delta}$ obéissent à la relation de commutation

$$\left[\phi_{j\delta}(x,t), \theta_{j'\delta'}(x',t)\right] = -(i/2)\delta_{j,j'}\delta_{\delta,\delta'}\mathrm{sgn}(x-x');$$

on a de plus $j \in \{c, s\}$ et $\delta \in \{+, -\}$. Les fonctions $K_{j\delta}(x)$ proviennent de la bosonisation d'un modèle de nanotube comprenant les interactions coulombiennes ($K_{j\delta} = 1$ dans un système libre). L'hamiltonien 8.6 du nanotube est cependant incomplet et en toute généralité on doit considérer trois autres termes qui proviennent des processus de diffusion (un terme principal et une correction proportionnelle à un coefficient f) et des processus de rétrodiffusion proportionnels à autre coefficient b. Pour des interactions coulombiennes non écrantées, le terme de rétrodiffusion et la correction dans le terme de diffusion sont du même ordre (i.e. $f \approx b$) et le terme principal de diffusion domine largement sa première correction. Ce dernier renormalise uniquement le paramètre K_{c+} tel qu'on ait maintenant $K_{c+} \simeq 0.18 < 1$ [38]. Par simplicité, on néglige alors les termes en f et b, nous limitant ainsi à $K_{c-} = K_{s-} = K_{s+} = 1$. La dépendance spatiale de $K_{j\delta}(x)$ permet de tenir compte de contacts métalliques sans explicitement les rajouter dans l'hamiltonien total du système. Il n'y a ainsi pas de nouveaux paramètres de couplages dans le modèle. Puisque $K_{j\delta} = 1$ décrit un système unidimensionnel sans interactions (contact métallique) et que $K_{c+} < 1$ décrit le nanotube, il suffit de définir la fonction

$$K_{c+}(x) = \begin{cases} K < 1 & \text{si } |x| < L/2 \\ 1 & \text{si } |x| > L/2 \end{cases}$$

pour décrire des contacts métalliques. On définit alors des conditions aux bords pour les fonctions de Green qu'on trouvera dans [7].

La pointe STM est supposée métallique (électrons sans interactions) et vue comme un liquide de Luttinger semi-infini où tous les paramètres d'interactions coulombiennes sont égaux à l'unité (voir [39]).

L'hamiltonien Tunnel décrivant le couplage STM-nanotube à la position $x = 0$ est donné par

$$H_{\mathrm{T}}(t) = \sum_{r,\alpha,\sigma,\varepsilon}\Gamma^{\varepsilon}(t)[\Psi^{\dagger}_{r\alpha\sigma}(0,t)c_{\sigma}(t)]^{(\varepsilon)} \tag{8.7}$$

où r correspond à l'indice de branche dans le spectre linéarisé du nanotube, α décrit le mode de propagation et σ est le spin des électrons. L'exposant (ε) laisse les opérateurs inchangés si $(\varepsilon) = +$ et les transforme en leurs conjugués hermitiens si $\varepsilon = -$. L'opérateur $\Gamma(t)$ correspond à l'amplitude tunnel et contient les tensions appliquées à la pointe STM sous la forme d'un déphasage. Si on applique une tension

$$V + V_1 \cos(\omega t) \tag{8.8}$$

on a alors

$$\Gamma(t) = \Gamma \sum_{n\in\mathbb{Z}} J_n \left(\frac{\omega_1}{\omega}\right) e^{in\omega t} e^{i\omega_0 t}. \tag{8.9}$$

où $\omega_0 = eV/\hbar$ et $\omega_1 = eV_1/\hbar$ (une manière d'introduire les tensions est décrite dans l'annexe I).
Les opérateurs fermioniques des électrons dans le nanotube et dans la pointe STM sont respectivement donnés par

$$\Psi_{r\alpha\sigma}(x,t) = \frac{F_{r\alpha\sigma}}{\sqrt{2\pi a}} e^{ik_F rx + iq_F \alpha x + i\varphi_{r\alpha\sigma}(x,t)} \tag{8.10}$$

$$c_\sigma(t) = \frac{f_\sigma}{\sqrt{2\pi a}} e^{i\tilde{\varphi}_\sigma(t)} \tag{8.11}$$

où a est la coupure ultraviolette du modèle de liquide de Luttinger, $F_{r\alpha\sigma}$ et f_σ sont les facteurs de Klein garantissant les bonnes relations de commutations dans la procédure de bosonisation, k_F est le vecteur d'onde de Fermi et $2q_F$ est le moment séparant deux modes α à l'énergie de Fermi. Comme on se donne les fonctions de Green en termes de champs $\theta_{j\delta}$ et $\phi_{j\delta}$, par la suite, on utilisera la relation (voir [38])

$$\varphi_{r\alpha\sigma}(x,t) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{j,\delta} h_{\alpha\sigma j\delta} \left[\phi_{j\delta}(x,t) + r\theta_{j\delta}(x,t)\right] \tag{8.12}$$

avec $h_{\alpha\sigma c+} = 1$, $h_{\alpha\sigma c-} = \alpha$, $h_{\alpha\sigma s+} = \sigma$ et $h_{\alpha\sigma s-} = \alpha\sigma$.

8.6 Bruit en présence de contacts métalliques

8.6.1 Calcul perturbatif du bruit

Cette partie décrit les calculs du bruit dont l'interprétation est donnée à la section suivante. L'hamiltonien tunnel (Eq. 8.7) est ici considéré comme une perturbation de l'hamiltonien du nanotube. On utilise le formalisme Keldysh (contour temporel fermé)

pour traiter la situation hors-équilibre. Le bruit (Eq. 8.1) devient

$$S(x,x';t,t') = \langle T_{\mathrm{K}}\{I_\rho(x,t^-)I_\rho(x',t'^+) \underbrace{e^{-i\int_K \mathrm{d}t_1 H_{\mathrm{T}}(t_1)}}_{e^{-i\sum_{\eta_1}\eta_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_1 H_{\mathrm{T}}(t_1^{\eta_1})}} \}\rangle.$$

avec le courant de charge en représentation interaction [38]

$$I_\rho(x,t) = 2ev_F\frac{1}{\sqrt{\pi}}\partial_x\phi_{c+}(x,t). \tag{8.13}$$

A l'ordre Γ^2 qui est l'ordre le bas permettant de voir les effets de la pointe STM, on a

$$S(x,x',t,t') = -\frac{1}{2}\sum_{\eta_1,\eta_2}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_2\ \langle T_{\mathrm{K}}\{I_\rho(x,t^-)I_\rho(x',t'^+)H_{\mathrm{T}}(t_1^{\eta_1})H_{\mathrm{T}}(t_2^{\eta_2})\}\rangle.$$

En utilisant (8.7) et (8.13), on a d'abord

$$\begin{aligned} S(x,x';t,t') &= \frac{-2e^2v_F^2}{\pi}\sum_{\eta_1,\eta_2}\sum_{\varepsilon,\varepsilon'}\sum_{\alpha,r,\sigma}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_2\ \Gamma^{\varepsilon}(t_1)\Gamma^{\varepsilon'}(t_2)\langle T_{\mathrm{K}}\{\partial_x\phi_{c+}(x,t^-) \\ &\times\partial_{x'}\phi_{c+}(x',t'^+)\left[\psi^\dagger_{\alpha r\sigma}(0,t_1^{\eta_1})c_\sigma(t_1^{\eta_1})\right]^{\varepsilon}\left[\psi^\dagger_{\alpha r\sigma}(0,t_2^{\eta_2})c_\sigma(t_2^{\eta_2})\right]^{\varepsilon'}\}\rangle. \end{aligned}$$

Les fonctions de Green du nanotube libre sont connues [7] et sont exprimées en fonction des champs ϕ et θ. Mais nous ne connaissons pas a priori les fonctions de corrélation du type $\langle T_{\mathrm{K}}\{\partial_x\phi\ \partial_{x'}\phi\}\rangle$. Les relations suivantes permettent d'exprimer ces dérivées en termes d'exponentielles de champs (ce qui va nous permettre de tout exprimer en termes de fonctions connues du type $\langle T_{\mathrm{K}}\{\phi\phi\}\rangle$)

$$\begin{aligned} \partial_x\phi_{c+}(x,t^-) &= \lim_{\gamma\to 0}\frac{1}{i\gamma}\partial_x\exp(i\gamma\phi_{c+}(x,t^-)), \\ \partial_{x'}\phi_{c+}(x',t'^+) &= \lim_{\gamma\to 0}\frac{1}{-i\gamma}\partial_{x'}\exp(-i\gamma\phi_{c+}(x',t'^+)), \\ \lim_{\gamma\to 0}\frac{1}{\gamma^2}\partial_x e^{i\gamma\phi_{c+}(x,t^-)}\partial_{x'}e^{-i\gamma\phi_{c+}(x',t'^+)} &= \partial_x\phi_{c+}(x,t^-)\partial_{x'}\phi_{c+}(x',t'^+). \end{aligned}$$

Dans l'expression du bruit, ceci nous donne

$$\begin{aligned} S(x,x';t,t') &= -\frac{2e^2v_F^2}{\pi}\sum_{\eta_1,\eta_2}\sum_{\varepsilon,\varepsilon'}\sum_{\alpha,r,\sigma}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_2\ \Gamma^{\varepsilon}(t_1)\Gamma^{\varepsilon'}(t_2) \\ &\times\langle T_{\mathrm{K}}\{\lim_{\gamma\to 0}\frac{1}{\gamma^2}\partial_x e^{i\gamma\phi_{c+}(x,t^-)}\partial_{x'}e^{-i\gamma\phi_{c+}(x',t'^+)} \\ &\times\psi^{\varepsilon}_{\alpha r\sigma}(0,t_1^{\eta_1})\psi^{\varepsilon'}_{\alpha r\sigma}(0,t_2^{\eta_2})c^{\varepsilon'}_{\sigma}(t_1^{\eta_1})c^{\varepsilon}_{\sigma}(t_2^{\eta_2})\}\rangle. \end{aligned}$$

En utilisant le théorème de Wick et en remarquant que le bruit est différent de 0 pour $\varepsilon' = -\varepsilon$, on a

$$\begin{aligned} S(x,x';t,t') &= -\frac{2e^2 v_F^2}{\pi(2\pi a)} \sum_{\eta_1,\eta_2} \sum_{\varepsilon} \sum_{\alpha,r,\sigma} \eta_1\eta_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t_2\, \Gamma^{\varepsilon}(t_1)\Gamma^{-\varepsilon}(t_2) \\ &\quad \times S_{\text{nano}}^{-,\eta_1,\eta_2} \langle T_{\mathrm{K}}\{c_\sigma^{-\varepsilon}(t_1^{\eta_1}) c_\sigma^{\varepsilon}(t_2^{\eta_2})\}\rangle \end{aligned} \tag{8.14}$$

où $S_{\text{nano}}^{-,\eta_1,\eta_2}$ est une fonction uniquement des champs du nanotube. Il regroupe donc les champs du nanotube en $x = 0$ où les électrons sont injectés et les champs pour $x \in [-L/2, L/2]$ provenant des opérateurs de courant. Son expression est

$$\begin{aligned} S_{\text{nano}}^{\eta,\eta_1,\eta_2} &= -\frac{\pi}{4}\partial_x \Big(G^{\phi\phi}_{c+(\eta\eta_1)}(x,t;0,t_1) + rG^{\phi\theta}_{c+(\eta\eta_1)}(x,t;0,t_1) \\ &\quad - G^{\phi\phi}_{c+(\eta\eta_2)}(x,t;0,t_2) - rG^{\phi\theta}_{c+(\eta\eta_2)}(x,t;0,t_2)\Big) \\ &\quad \times \partial_{x'} \Big(G^{\phi\phi}_{c+(-\eta\eta_1)}(x',t';0,t_1) + rG^{\phi\theta}_{c+(-\eta\eta_1)}(x',t';0,t_1) \\ &\quad - G^{\phi\phi}_{c+(-\eta\eta_2)}(x',t';0,t_2) - rG^{\phi\theta}_{c+(-\eta\eta_2)}(x',t';0,t_2)\Big) \\ &\quad \times e^{\frac{\pi}{4}\sum_{j\delta}\left(G^{\phi\phi}_{j\delta(\eta_1\eta_2)}(0,t_1;0,t_2) + rG^{\phi\theta}_{j\delta(\eta_1\eta_2)}(0,t_1;0,t_2) + rG^{\theta\phi}_{j\delta(\eta_1\eta_2)}(0,t_1;0,t_2) + G^{\theta\theta}_{j\delta(\eta_1\eta_2)}(0,t_1;0,t_2)\right)} . \end{aligned} \tag{8.15}$$

Son calcul est similaire au calcul de $\langle T_{\mathrm{K}}\{c_\sigma^{-\varepsilon}(t_1^{\eta_1}) c_\sigma^{\varepsilon}(t_2^{\eta_2})\}\rangle$ que nous allons détailler et nécessite la relation (sous-entendu $\langle T_{\mathrm{K}}\{\,.\,\}\rangle \equiv \langle\,.\,\rangle$)

$$\langle e^{i\varepsilon_1 A_1} e^{i\varepsilon_2 A_2}\rangle = e^{-1/2\langle\varepsilon_1^2 A_1^2\rangle - 1/2\langle\varepsilon_2^2 A_2^2\rangle - \varepsilon_1\varepsilon_2\langle A_1 A_2\rangle}, \tag{8.16}$$

où A_i est une combinaison linéaire de champs. On en déduit alors avec (8.11) puis (8.16) que

$$\begin{aligned} \langle T_{\mathrm{K}}\{c_\sigma^{-\varepsilon}(t^{\eta}) c_\sigma^{\varepsilon}(t^{\eta_1})\}\rangle &= \frac{1}{2\pi a}\langle e^{-\varepsilon i\tilde{\varphi}_\sigma(t^{\eta})} e^{\varepsilon i\tilde{\varphi}_\sigma(t_1^{\eta_1})}\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi a} e^{-(-\varepsilon)\varepsilon\langle\tilde{\varphi}_\sigma(t^{\eta})\tilde{\varphi}_\sigma(t_1^{\eta_1})\rangle - 1/2(-\varepsilon)(-\varepsilon)\langle\tilde{\varphi}_\sigma^2(t^{\eta})\rangle - 1/2(\varepsilon)(\varepsilon)\langle\tilde{\varphi}_\sigma^2(t_1^{\eta_1})\rangle} \\ &= \frac{1}{2\pi a} e^{g_{\sigma(\eta,\eta_1)}(t,t_1)} \end{aligned}$$

en définissant

$$g^{\sigma}_{\eta_1\eta_2}(t_1 - t_2) \equiv \langle T_{\mathrm{K}}\{\tilde{\varphi}_\sigma(t_1^{\eta_1})\tilde{\varphi}_\sigma(t_2^{\eta_2})\}\rangle - \langle(\tilde{\varphi}_\sigma(0))^2\rangle,$$

qu'on écrit explicitement [39]

$$g^{\sigma}_{\eta_1\eta_2}(t_1 - t_2) = -\frac{1}{2\pi}\ln\left[1 + i\frac{(\eta_1+\eta_2)v_F|t_1 - t_2|}{2a} - i\frac{(\eta_1-\eta_2)v_F(t_1 - t_2)}{2a}\right]. \tag{8.17}$$

On a donc maintenant

$$\begin{aligned} S(x,x';t,t') &= -\frac{2e^2v_F^2}{\pi(2\pi a)^2}\sum_{\eta_1\eta_2}\sum_{\varepsilon}\sum_{\alpha,r,\sigma}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_2\;\Gamma^{\varepsilon}(t_1)\Gamma^{-\varepsilon}(t_2) \\ &\times\; e^{2\pi g^{\sigma}_{\eta_1\eta_2}(t_1-t_1)}S^{-,\eta_1,\eta_2}_{\text{nano}}. \end{aligned}$$

Comme $S^{-,\eta_1,\eta_2}_{\text{nano}}$ et $e^{2\pi g^{\sigma}_{\eta_1\eta_2}(t_1-t_1)}$ ne dépendent pas de ε (d'après (8.15) et (8.17)), on peut faire la somme sur cette indice, ce qui n'affecte que les amplitudes $\Gamma^{\varepsilon}(t_1)$ et $\Gamma^{-\varepsilon}(t_2)$. Avec leurs expressions (8.9), on a

$$\begin{aligned} \sum_{\varepsilon}\Gamma^{\varepsilon}(t_1)\Gamma^{-\varepsilon}(t_2) &= \left(\Gamma^{\varepsilon}\sum_{n\in\mathbf{Z}}J_n\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)e^{i\varepsilon(n\omega+\omega_0)t_1}\right)\left(\Gamma^{-\varepsilon}\sum_{m\in\mathbf{Z}}J_m\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)e^{-i\varepsilon(m\omega+\omega_0)t_2}\right) \\ &= 2\Gamma^2\sum_{n,m}J_n\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)J_m\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)\cos(n\omega t_1+\omega_0t_1-m\omega t_2-\omega_0t_2). \end{aligned}$$

Avec cela, réécrivons le bruit

$$\begin{aligned} S(x,x';t,t') &= -\frac{4e^2v_F^2}{\pi(2\pi a)^2}\Gamma^2\sum_{\eta_1,\eta_2}\sum_{\alpha,r,\sigma}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_2\sum_{n,m}J_n\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)J_m\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right) \\ &\times\cos(n\omega t_1+\omega_0t_1-m\omega t_2-\omega_0t_2)e^{2\pi g^{\sigma}_{\eta_1\eta_2}(t_1-t_2)}S^{-,\eta_1\eta_2}_{\text{nano}}. \end{aligned}$$

Le bruit est désormais écrit en termes de fonctions de Green dépendant des variables temporelles t et t'. Maintenant, on s'intéresse plus particulièrement à sa transformée de Fourier à fréquences nulles qui ressemble davantage à une quantité mesurée [5, 6]

$$\hat{S}(x,\Omega=0;x',\Omega'=0)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\;e^{i\Omega t}\Big|_{\Omega=0}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t'\;e^{i\Omega' t'}\Big|_{\Omega'=0}S(x,t;x',t').$$

On entendra désormais par *bruit* cette quantité. En utilisant l'invariance par translation dans le temps des fonctions de Green ($G(t,t')\equiv\tilde{G}(t-t')$ où $\tilde{G}$ sera aussi notée G, on va effectuer une série de changements de variables qui simplifiera les notations. D'abord, avec

$$\begin{aligned} \tau &= t_1-t_2 \\ \tau' &= \frac{t_1+t_2}{2}, \end{aligned}$$

le cosinus dans le bruit devient

$$\cos(n\omega t_1+\omega_0t_1-m\omega t_2-\omega_0t_2) = \cos\left[(2\omega_0+(n+m)\omega)\frac{\tau}{2}+(n-m)\omega\tau'\right] \quad (8.18)$$

Ensuite, utilisons la notation suivante

$$B^{r\sigma}_{-,\eta_1}(x,t-t_1) = \partial_x\left(G^{\phi\phi}_{c+(-,\eta_1)}(x,t-t_1)+rG^{\phi\theta}_{c+(-,\eta_1)}(x,t-t_1)\right),$$

pour écrire $S_{\text{nano}}^{-,\eta_1\eta_2}$ sous la forme

$$\begin{aligned} S_{\text{nano}}^{-,\eta_1\eta_2} &= \frac{-\pi}{4}[B_{-,\eta_1}^{r\sigma}(x,t-t_1) - B_{-,\eta_2}^{r\sigma}(x,t-t_2)] \times [B_{+,\eta_1}^{r\sigma}(x',t'-t_1) - B_{+,\eta_2}^{r\sigma}(x',t'-t_2)] \\ &\times e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j\delta} G_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\phi\phi}(0,t_1;0,t_2)+r_1 G_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\phi\theta}(0,t_1;0,t_2)+r_1 G_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\theta\phi}(0,t_1;0,t_2)+G_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\theta\theta}(0,t_1;0,t_2)} . \end{aligned} \tag{8.19}$$

On développe $S_{\text{nano}}^{-,\eta_1\eta_2}$ ce qui fait apparaître quatre termes. On fait alors des changements de variables pour chaque terme[6] puis on factorise de nouveau les termes B dans S_{nano} pour obtenir le bruit sous la forme

$$\begin{aligned} S_0(x,x') &= \frac{2e^2 v_F^2 \Gamma^2}{(2\pi a)^2} \sum_{n,m}\sum_{\eta_1,\eta_2}\sum_{r,\sigma} J_n\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right) J_m\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right) \eta_1\eta_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_1 \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_2 \cos\left[(2\omega_0 + (n+m)\omega)\frac{\tau}{2}\right] \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau' \cos\left[(n-m)\omega\tau'\right] \\ &\times e^{2\pi g_{\eta_1\eta_2}^{\sigma}(\tau)} e^{\frac{\pi}{4}\sum_{j\delta} G_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\phi\phi}(0,\tau)+rG_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\phi\theta}(0,\tau)+rG_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\theta\phi}(0,\tau)+G_{j\delta(\eta_1\eta_2)}^{\theta\theta}(0,\tau)} \\ &\times \left[B_{-,\eta_1}^{r\sigma}(x,\tau_1) - B_{-,\eta_2}^{r\sigma}(x,\tau_1)\right]\left[B_{+,\eta_1}^{r\sigma}(x',\tau_2) - B_{+,\eta_2}^{r\sigma}(x',\tau_2)\right] \end{aligned} \tag{8.20}$$

en ayant également fait la somme triviale sur α, développé (8.18) avec $\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b$ puis remarqué que la partie $\sin a \sin b$ est d'intégrale nulle. On remarque aussi directement que si $\eta_1 = \eta_2$ alors le bruit est nul. Il nous reste donc les termes pour lesquels $\eta_1 = -\eta_2$. En faisant alors la somme sur η_1, on obtient

$$\begin{aligned} S_0(x,x') &= \frac{2e^2 v_F^2 \Gamma^2}{(2\pi a)^2} \sum_{n,r,\sigma} J_n^2\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau \left(A_{+,-}^{r\sigma}(\tau) + A_{-,+}^{r\sigma}(\tau)\right) \\ &\times \left[B_{-,+}^{r\sigma}(x,\tau_1) - B_{-,-}^{r\sigma}(x,\tau_1)\right]\left[B_{+,+}^{r\sigma}(x',\tau_2) - B_{+,-}^{r\sigma}(x',\tau_2)\right]. \end{aligned} \tag{8.21}$$

avec

$$\begin{aligned} A_{\eta_1,-\eta_1}^{r\sigma}(\tau) &= \cos\left[(\omega_0 + n\omega)\tau\right] e^{2\pi g_{\eta_1,-\eta_1}^{\sigma}(\tau)} \\ &\times e^{\frac{\pi}{4}\sum_{j\delta} G_{j\delta(\eta_1,-\eta_1)}^{\phi\phi}(0,\tau)+rG_{j\delta(\eta_1,-\eta_1)}^{\phi\theta}(0,\tau)+rG_{j\delta(\eta_1,-\eta_1)}^{\theta\phi}(0,\tau)+G_{j\delta(\eta_1,-\eta_1)}^{\theta\theta}(0,\tau)} . \end{aligned}$$

6.
- Pour le premier terme $B_{-,\eta_1}^{r\sigma}(x,t-t_1)B_{+,\eta_1}^{r\sigma}(x',t'-t_1)$, on pose $\tau_1 = t - t_1$ et $\tau_2 = t' - t_1$.
- pour le second terme $B_{-,\eta_1}^{r\sigma}(x,t-t_1)B_{+,\eta_2}^{r\sigma}(x',t'-t_2)$, on pose $\tau_1 = t - t_1$ et $\tau_2 = t' - t_2$.
- pour le troisième terme $B_{-,\eta_2}^{r\sigma}(x,t-t_2)B_{+,\eta_1}^{r\sigma}(x',t'-t_1)$, on pose $\tau_1 = t - t_2$ et $\tau_2 = t' - t_1$.
- pour le quatrième terme, $B_{-,\eta_2}^{r\sigma}(x,t-t_2)B_{+,\eta_2}^{r\sigma}(x',t'-t_2)$, on pose $\tau_1 = t - t_2$ et $\tau_2 = t' - t_2$.

Tous ces changements de variables ont un jacobien égal à un.

Avec les fonctions de Green de [7], un calcul direct des termes B donne

$$\begin{aligned}
\sum_r \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_1 B^{r\sigma}_{-,+}(x,\tau_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_2 B^{r\sigma}_{+,+}(x',\tau_2) &= h(0)\left(Q^0_{xx'}(0) + Q^-_{xx'}(0)\right) \\
-\sum_r \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_1 B^{r\sigma}_{-,+}(x,\tau_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_2 B^{r\sigma}_{+,-}(x',\tau_2) &= -h(0)\left(2Q^0_{xx'}(0) + Q^-_{xx'}(0) + Q^+_{xx'}(0)\right) \\
-\sum_r \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_1 B^{r\sigma}_{-,-}(x,\tau_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_2 B^{r\sigma}_{+,+}(x',\tau_2) &= -Q^0_{xx'}(0) \\
\sum_r \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_1 B^{r\sigma}_{-,-}(x,\tau_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau_2 B^{r\sigma}_{+,-}(x',\tau_2) &= h(0)\left(Q^0_{xx'}(0) + Q^+_{xx'}(0)\right)
\end{aligned} \tag{8.22}$$

avec la fonction $h(\omega)$ égale à 1 pour $\omega \geq 0$ et 0 sinon et

$$Q^0_{xx'}(\omega) = \frac{K_{c+}^2|\phi_+(\omega)|^2 + |\phi_-(\omega)|^2 \mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{(K_{c+}+1)^2 v_F^2}, \tag{8.23}$$

avec $\phi_\pm(\omega) = (1 \pm b e^{i\omega L/v_{c+}})^{-1}$, $v_{c+} = v_F/K_{c+}$, $b = \frac{K_{c+}-1}{K_{c+}+1}$. En faisant maintenant la somme des quatre termes dans (8.22), (8.21) devient

$$S_0(x,x') = \frac{e^2 v_F^2 \Gamma^2}{(\pi a)^2} \sum_n J_n^2\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)\left[\tilde{A}_{+,-}(\Omega=0) + \tilde{A}_{-,+}(\Omega=0)\right] Q^0_{xx'}(0) \tag{8.24}$$

où $\tilde{A}_{+,-}(\Omega = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\, e^{i\Omega t} A_{+,-}(t)\Big|_{\Omega=0}$. On remarque directement avec (8.23) que $Q^0_{x,-x}(0) = 0$, autrement dit (on rappelle que le calcul est perturbatif à l'ordre Γ^2)

$$S_0(x,-x) = 0.$$

Pour le bruit, on a

$$\begin{aligned}
Q^0_{x,x}(0) &= \frac{1}{2v_F^2} \\
\left[\tilde{A}_{+,-}(\Omega=0) + \tilde{A}_{-,+}(\Omega=0)\right] &= 2\pi\left(\frac{a}{v_F}\right)^{\nu+1} \frac{|\omega_0 + n\omega|^\nu}{\Gamma(\nu+1)},
\end{aligned}$$

avec $\nu = \frac{1}{8}\sum_{j,\delta}(K_{j\delta} + K_{j\delta}^{-1})$ et la fonction *gamma* $\Gamma(.)$ (qu'on ne confondra pas avec le coefficient de transmission Γ). Le bruit est alors

$$S_0 \equiv S_0(x,x) = \frac{(e\Gamma)^2}{\pi a^2} \sum_n J_n^2\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)\left(\frac{a}{v_F}\right)^{\nu+1} \frac{|\omega_0 + n\omega|^\nu}{\Gamma(\nu+1)}. \tag{8.25}$$

Cette expression correspond au cas de [34] où l'extension spatiale des paquets d'ondes des électrons est plus petite que la longueur du nanotube. On rappelle que v_F est la vitesse de Fermi dans métal, a est la coupure de la théorie (intervenant dans la bosonisation), Γ

est le coefficient de transmission entre la pointe STM et le nanotube, $\Gamma(.)$ est la fonction *gamma*, $J_n(.)$ sont les fonctions de Bessel J_n de première espèce, $\nu = \frac{1}{8}\sum_{j,\delta}(K_{j\delta} + K_{j\delta}^{-1})$ où les $K_{j\delta}$ sont les paramètres de Luttinger du nanotube, $\omega_0 = eV/\hbar$ et $\omega_1 = eV_1/\hbar$ avec une tension appliquée $V + V_1 \cos \omega t$.

8.7 Conclusion

Dans ces calculs en régime photo-assisté en présence de contacts, on peut avoir accès à trois quantités : le courant, les corrélations croisées $(S(x, x' \neq x))$ et le bruit. On interprète généralement le rapport

$$F = S(x, x, \Omega = 0)/I(x)$$

comme étant proportionnel à la charge effective des excitations électroniques. Ce rapport provient d'un calcul en général perturbatif à un ordre donné en Γ et ne donne pas en général un résultat simple. Le courant et le bruit doivent alors se calculer numériquement et on peut étudier les effets des différents paramètres du modèle. Une étude de la dépendance en V de F se trouve dans [34] et montre en particulier qu'il n'est pas une fonction constante de la tension.

8.7.1 Les marches de $\partial_V S$

Pour notre système, le bruit est donné par

$$S(x, x) \propto \sum_{n\in\mathbb{Z}} J_n^2(\omega_1/\omega)|eV/\hbar + n\omega|^\nu, \tag{8.26}$$

où le coefficient de proportionnalité est $\frac{(e\Gamma)^2}{\pi a^2}\left(\frac{a}{v_F}\right)^{\nu+1}\frac{1}{\Gamma(\nu+1)}$ (voir l'équation 8.25). On remarque trivialement que si la tension alternative $\omega_1 = 0$, toutes les fonctions de Bessel sont nulles sauf pour $n \neq 0$ et la relation entre le bruit et la tension est linéaire pour un métal normal ($\nu = 1$)

$$\text{Bruit} \propto |eV/\hbar|.$$

Si on dérive le bruit par rapport à la tension continue V, on a

$$\frac{\partial S_0}{\partial V} \propto \sum_{n\in\mathbb{Z}} J_n^2(\omega_1/\omega)\text{sgn}(eV/\hbar + n\omega)|eV/\hbar + n\omega|^{\nu-1}.$$

La dérivée du bruit caractérise mieux graphiquement les effets des interactions électroniques dans le nanotube et l'effet d'une tension alternative ; d'abord, considérons un

système sans interactions $\nu = 1$ où l'on retrouve le résultat de Lesovik et Levitov [52]

$$\left.\frac{\partial S_0}{\partial V}\right|_{\nu=1} \propto \sum_{n\in\mathbb{Z}} J_n^2(2\pi\Phi_a/\Phi_0)\mathrm{sgn}(eV/\hbar + n\omega) \tag{8.27}$$

où la tension alternative dans la boucle est crée par le flux intérieur à la boucle

$$\Phi(t) = \Phi_a \sin(\omega t) \tag{8.28}$$

avec le quantum de flux $\Phi_0 = hc/e$.

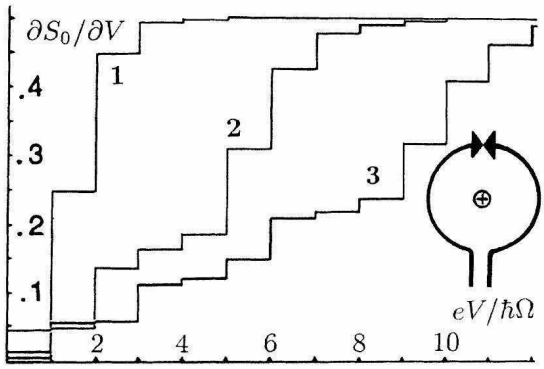

FIGURE 8.2: Dérivée du bruit par rapport à la composante continue de la tension $\partial S_0/\partial V$ de Lesovik et Levitov [52] en fonction de la tension normalisée $eV/\hbar\Omega$ où Ω est définie par l'équation 8.28, pour trois flux : (1) $5\Phi_0/4\pi$, (2) $7\Phi_0/2\pi$ et (3) $23\Phi_0/4\pi$.

Cette fonction est une fonction en forme d'escalier présentant des discontinuités pour des valeurs de $eV/(\hbar\omega)$ entières (voir la figure 8.2). Le système de Lesovik et Levitov [52] correspond à une boucle métallique aux bornes de laquelle on applique une tension continue ; il n'est alors pas complètement étonnant de retrouver leurs résulats pour $\nu = 1$. En effet, si on suppose que les résultats ne dépendent pas de la forme du nanotube, on peut déformer le nanotube pour former une boucle et la tension alternative est l'équivalent du déphasage $\Phi(t)$. La hauteur des marches est caractérisée par $J_n^2(2\pi\Phi_a/\Phi_0)$ qui dépend de l'amplitude de la tension alternative. La position des discontinuités est caractérisée par le rapport $eV/(\hbar\omega)$ qui dépend de la fréquence d'oscillation de cette tension. Les interactions au sein du nanotube se manifestent par un coefficient $\nu \neq 1$. Dans la fonction $\partial_V S_0$, le nouveau terme $|eV/\hbar + n\omega|^{\nu-1}$ arrondi les paliers de l'escalier du cas métallique simple (voir la figure 8.3). Dans [34], on peut trouver une formule non approchée du bruit et le graphe de $\partial_V S_0$ correspondant. Le bruit donné par l'équation (8.25) permet toutefois d'obtenir les principales caractéristiques de $\partial_V S_0$ (voir figure 8.3) obtenues dans [34].

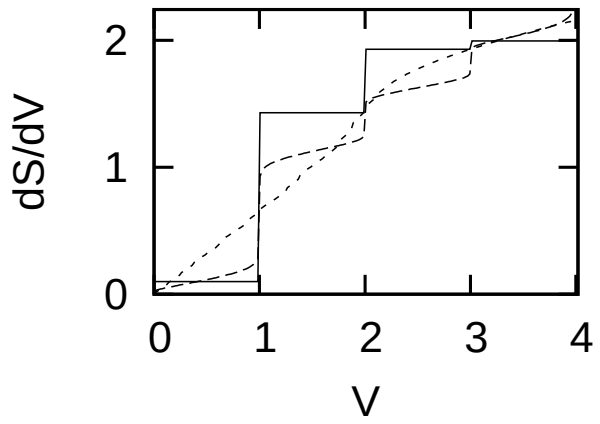

FIGURE 8.3: Dérivée du bruit par rapport à la tension V normalisée (en unités de $\hbar\omega/e$) donnée par l'équation (8.25). (trait plein) cas métallique $\nu = 1$. (tirets) $\nu = 1,1$. (pointillé) $\nu = 1,4$. Les autres paramètres sont tels qu'on puisse reproduire de manière approchée le graphe de $\partial_V S_0$ dans [34] obtenu sans approximations sur l'extension spatiale des paquets d'ondes décrivant les électrons.

Chapitre 9

Conclusion générale

Nous avons présenté dans cette thèse trois parties dans lesquelles nous avons abordé plusieurs thèmes comme le courant Josephson, le courant hors équilibre, le bruit, la supraconductivité, les intégrales de chemins, la bosonisation, les champs moyens, etc, dans le but d'étudier les phénomènes de transport cohérent en présence d'interactions coulombiennes (le CAR dans le SQUID et la détection de charges anormales dans le nanotube). Par la suite, nous avons abordé la thématique du MAR et en particulier la transition du courant cohérent-incohérent.

La première partie concernant le courant Josephson a mis en valeur la possibilté d'étudier le CAR dans une nouvelle géométrie différente des fourches NS habituelles. D'autre part, des problèmes plus ésotériques se posent à nous et demanderaient une étude de la théorie en elle-même à travers ses cas pathologiques (on rappelle que la théorie est ici un outil et non l'objet de l'étude à proprement parler et que l'on ne travaille pas par exemple sur des *toy models*). Si l'hamiltonien réduit du supraconducteur est un modèle mésoscopique, qu'en est-il de l'hamiltonien Tunnel qui utilise les déphasages en $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$? Nos résultats montrent que des oscillations de courant se produisent avec une longueur caractéristique de l'ordre de la longueur de Fermi, alors qu'il est raisonnable de penser que seule la longueur de cohérence a un sens pour la supraconductivité. Si l'hamiltonien Tunnel est correct, il apparaît également, en plus de la longueur de cohérence, une borne inférieure (de l'ordre de $0.1\lambda_F$) en dessous de laquelle le courant tendra vers zéro, après avoir oscillé fortement.

On peut complexifier le problème en allant au-delà de l'approximation de champs moyens, en étudiant l'effet Kondo dans le SQUID. Il faudra alors éclaircir les relations entre supraconductivité, l'effet Kondo, la transition $0-\pi$ et le CAR/*cotunneling* ; les méthodes devraient également être plus numériques. On pourrait par ailleurs être tenté par d'autres modèles de supraconducteurs (quasi-classiques, non conventionnels, etc). En outre, il existe des études incluant un couplage Tunnel entre les deux points quantiques ou modélisant des points quantiques en série [53, 54] que nous n'avons pas considérés dans l'optique d'étudier une géométrie de SQUID.

Dans la deuxième partie consacrée au MAR, on peut se rendre compte que le formalisme hamiltonien peut donner des courbes assez complexes mais les cas limites fournissent des points de vérification : on retrouve ainsi une signature du courant Josephson dans un régime stationnaire avec un courant de la forme $I_{\sin} \sin \phi_0$ pour une petite tension (normalisé par rapport au gap) ou une loi d'Ohm à grande tension.
Il semble important d'insister sur le fait que les calculs en théorie des champs pourront en général donner une formule pour le courant ; toutefois si l'on cherche à se forger des "images mentales" des phénomènes, on doit souvent se tourner vers d'autres théories. Par exemple, a fortiori, on se rend compte qu'en restant dans la théorie non perturbative où l'on obtient des diagrammes de phases et autres, concernant le courant Josephson dans le SQUID, nous aurions eu certainement plus de difficultés à identifer le CAR et le cotunneling qui apparaissent également en théorie de la diffusion ; de même que le terme de réflections d'Andreev sur une interface NS, n'a essentiellement de sens que lorqu'on travaille avec des fonctions d'ondes. Dans cette partie, nous avons dans un premier temps retrouvé des résultats précédemment établis pour une jonction $S/QD/S$. Nous avons pu ensuite identifer les effets du contact normal dans les structures de MAR, en particulier dans le déphasage de la première harmonique du courant. La présence du contact normal en tant que réservoir peut détruire la supraconductivité, de même que les supraconducteurs peuvent induire la supraconductivité dans le contact normal par l'effet de proximité. Nous avons alors montré en détails la transition entre le MAR cohérent et le régime où cette cohérence est perdue.
Dans la troisième partie, nous avons abordé la thématique du bruit en calculant les corrélations de courant dans un nanotube de carbone. Le but initial était de caractériser les charges anormales se propageant dans le nanotube. Toutefois, cette caractérisation ne peut pas se faire à fréquence nulle. Le système reste toutefois suffisamment riche pour garder les signatures de la tension alternative (du régime photo-assisté) et de l'effet des interactions coulombiennes dans le nanotube en supposant que la longueur du nanotube est suffisamment grande pour ne pas engendrer d'effets notoires dans le bruit. La généralisation directe de ce travail (avec des discussions sur les effets de la longueur du nanotube) fait l'objet du travail de Guigou *et al.* [34].

Annexe A

Fonction de partition et états cohérents

Cette annexe est largement basée sur les livres de Negele et Orland [55] et de Zinn-Justin [56]. On y décrit une construction de la fonction de partition en termes d'intégrales de chemins.

Si on se donne la fonction de partition Z d'un ensemble statistique, on peut calculer les valeurs moyennes d'observables ; par exemple pour l'observable O, dans l'ensemble canonique, on a $\langle O \rangle = Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H}O\}$ où H est l'hamiltonien du système entier, $\beta = 1/k_B T$ et $Z = \mathrm{Tr}e^{-\beta H}$ qui est la constante de normalisation telle que la valeur moyenne de l'identité soit égale à un. Si on cherche à calculer les valeurs moyennes de cette façon, on va se confronter à la difficulté d'évaluer la trace de l'opérateur $e^{-\beta H}O$. Dans certain cas, une astuce d'écriture permet de ramener ce calcul à celui d'une dérivée d'une fonction qui peut être plus simple à évaluer. Par exemple, si on veut calculer la valeur moyenne de l'énergie $E = \langle H \rangle$, on a $E = -Z^{-1}\partial_\beta \mathrm{Tr}\{e^{-\beta H}\}$ et comme on a définit le coefficient de normalisation $Z = \mathrm{Tr}e^{-\beta H}$, on a bien une dérivée à calculer $E = -\partial_\beta \ln Z$. Le problème revient maintenant à calculer la fonction de partition. En choisissant bien les états sur lesquels on veut calculer cette trace (en prenant des états dits *cohérents*), on montre qu'on a l'égalité

$$Z = \mathrm{Tr}e^{-\beta H} = \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-S}$$

où le calcul de Z est équivalent à celui d'une intégrale fonctionnelle sur des champs (ϕ^* et ϕ) de l'exponentielle d'une action S. Sans en dire plus pour définir le sens de ces quantités, on voit qu'on a alors un moyen de calculer différemment la trace de $e^{-\beta H}$. Quand on développe le formalisme qui permet de calculer cette intégrale fonctionnelle, on constate que quelques systèmes physiques ont une action S qui permet d'intégrer directement sur les champs ϕ^* et ϕ. La jonction $S/QD/S$ fait parti de cette classe de système. Pour ne pas sortir outre mesure du cadre du travail de cette thèse, on se limite aux systèmes fermioniques où l'hamiltonien H est une fonction des opérateurs création

$c_\alpha^\dagger$ et d'annihilation c_α qui obéissent aux relations d'anticommutations fermioniques. Ces opérateurs permettent de construire l'espace de Fock $\mathcal{F}$ qui contient tous les états à N particules que le système peut atteindre. Certains états de cet espace de Fock peuvent avoir la propriété d'être "inchangés" alors qu'on détruit une particule, ce sont des états cohérents définis par la propriété $c_\alpha |\xi\rangle = \xi_\alpha |\xi\rangle$ où ξ_α est donc la valeur propre de c_α. Le vecteur $|\xi\rangle$ s'écrit explicitement

$$|\xi\rangle = e^{-\sum_\alpha \xi_\alpha c_\alpha^\dagger} |0\rangle \tag{A.1}$$

$$= \prod_\alpha (1 - \xi_\alpha c_\alpha^\dagger) |0\rangle . \tag{A.2}$$

Définissons tout de suite l'adjoint de cet état cohérent

$$\langle\xi| = \langle 0| e^{-\sum_\alpha c_\alpha \xi_\alpha^*}.$$

Si on considère les éléments ξ_α comme des nombres complexes, on constate que la propriété de commutation de ces nombres est en contradiction avec les relations d'anticommutations des opérateurs fermioniques. Par exemple, on a $c_\alpha c_\beta = -c_\beta c_\alpha$ et si on leur applique à droite un état cohérent $|\xi\rangle$, on a

$$\xi_\alpha \xi_\beta |\xi\rangle = -\xi_\beta \xi_\alpha |\xi\rangle = 0. \tag{A.3}$$

On peut alors définir librement les relations de commutations entre les ξ et les opérateurs. La convention utilisée (qui permet d'obtenir des résultats analogues au cas des bosons que l'on ne traite pas ici) consiste à choisir $\xi c^\# + c^\# \xi = 0$ et $(\xi c^\#)^\dagger = (c^\#)^\dagger \xi^*$. On a alors $-\xi_\beta \xi_\alpha |\xi\rangle = \xi_\alpha \xi_\beta |\xi\rangle$ ou bien $(\xi_\beta \xi_\alpha + \xi_\alpha \xi_\beta) |\xi\rangle = 0$. On obtient alors une condition sur les variables ξ

$$\xi_\beta \xi_\alpha + \xi_\alpha \xi_\beta = 0$$

pour tout α et β. Cette relation d'anticommutation définit des variables de Grassmann qui génèrent par la suite une algèbre[1], dite de Grassmann. Ainsi l'espace de Fock que nous avons considéré au départ est trop petit pour contenir les variables de Grassmann et les états cohérents. Les générateurs de cette algèbre de Grassmann $\mathcal{G}$ sont obtenus en associant un générateur ξ_α à chaque opérateur a_α et un générateur ξ_α^* à chaque opérateur $a_\alpha^\dagger$, bien entendu, étant donné que ξ_α^* et ξ_β appartiennent à la même algèbre de Grassmann, on a $\xi_\beta \xi_\alpha^* + \xi_\alpha^* \xi_\beta = 0$. On admet que tout vecteur $|\psi\rangle$ de cette espace de Fock généralisé peut s'écrire sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha \xi_\alpha |\phi_\alpha\rangle$$

où ξ_α est une variable de Grassmann et $|\phi_\alpha\rangle$ un vecteur de l'espace de Fock.

1. Ce genre de terme n'est cité dans cette thèse qu'en tant que *mot-clé* !

A.1 Dérivation

Dans les algèbres de Grassmann, on peut définir des opérations de dérivation. A cause du caractère non commutatif de l'algèbre, on peut définir une dérivation à gauche ou à droite. Si on choisit la dérivation à gauche, on a par exemple pour deux variables de Grassmann ξ et $\bar{\xi}$, $\partial_\xi \xi = 1$, $\partial_\xi \xi \bar{\xi} = \bar{\xi}$ et puisque les variables de Grassmann anticommutent, on a $\partial_\xi \bar{\xi} \xi = -\bar{\xi}$. Plus généralement, après d'éventuelles commutations, tout élément A de l'algèbre de Grassmann peut s'écrire

$$A = A_1 + \xi_i A_2$$

puisque les ξ_i sont les générateurs de l'algèbre. On définit alors la dérivée par rapport à ξ_i par

$$\partial_{\xi_i} A = A_2.$$

A.2 Intégration

L'intégration d'un élément A de l'algèbre de Grassmann est définie comme une opération identique à la dérivation

$$\int \mathrm{d}\xi_i A = \partial_{\xi_i} A.$$

En définissant l'intégration de cette manière, on obtient les relations de commutation entre les $\mathrm{d}\xi_i$ et ξ_i. Si on calcule $\int \mathrm{d}\xi \bar{\xi} \xi$, on fait d'abord anticommuter $\bar{\xi}$ et ξ, puis on intègre par rapport à ξ, ce qui donne

$$\int \mathrm{d}\xi \bar{\xi} \xi = -\bar{\xi}.$$

Maintenant, pour une intégrale bien définie, on s'attend à ce qu'un facteur dont la dérivée par rapport à la variable d'intégration s'annule peut être factorisé devant le signe d'intégration ; en d'autres termes, on voudrait pouvoir permuter les termes $\mathrm{d}\xi$ et $\bar{\xi}$ à un signe près. Pour être compatible avec le résultat ci-dessus, on doit avoir $\mathrm{d}\xi \bar{\xi} + \bar{\xi} \mathrm{d}\xi = 0$, et plus généralement

$$\mathrm{d}\xi_i \xi_j + \xi_j \mathrm{d}\xi_i = 0.$$

En raisonnant de la même manière, si on calcule $\int \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\bar{\xi} \xi \bar{\xi}$, on doit anticommuter $\bar{\xi}$ et ξ, puis intégrer directement

$$\int \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\bar{\xi} \xi \bar{\xi} = -1$$

ou bien changer l'ordre d'intégration, en ayant préalablement définit la relation de commutation entre $\mathrm{d}\xi$ et $\mathrm{d}\bar{\xi}$: $\mathrm{d}\bar{\xi} \mathrm{d}\xi + \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\bar{\xi} = 0$ et plus généralement

$$\mathrm{d}\xi_i \mathrm{d}\xi_j + \mathrm{d}\xi_j \mathrm{d}\xi_i = 0.$$

Pour déterminer le jacobien d'une transformation, on considère un premier cas où l'on n'a que deux générateurs ξ_1 et ξ_2 pour l'algèbre de Grassmann. Maintenant on sait que $1 = \int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \xi_2 \xi_1$. On définit le Jacobien par $\mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 = \mathrm{d}\xi'_1 \mathrm{d}\xi'_2 J(\xi')$; si on effectue un changement de variable linéaire

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} \xi'_1 \\ \xi'_2 \end{pmatrix}$$

où $M^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. On peut donc maintenant écrire :

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \xi_2 \xi_1 \\ &= \int \mathrm{d}\xi'_1 \mathrm{d}\xi'_2 J(\xi')(c\xi'_1 + d\xi'_2)(a\xi'_1 + b\xi'_2) \\ &= (ad - bc) J(\xi') \int \mathrm{d}\xi'_1 \mathrm{d}\xi'_2 \xi'_2 \xi'_1 \\ &= \det M^{-1} \; J(\xi'). \end{aligned}$$

Maintenant si on considère n générateurs ξ_n et un changement de variable linéaire $\xi_i = \sum_j M^{-1}_{ij} \xi'_j$, on montre que $J(\xi')^{-1} = \det M^{-1}$. Dans les systèmes physiques considérés dans cette thèse, on calcule des intégrales gaussiennes sur des variables de Grassmann et l'identité précédente sur le jacobien permet de calculer ce type d'intégrale

$$Z(M) = \int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\bar{\xi}_1 \mathrm{d}\xi_2 \mathrm{d}\bar{\xi}_2 ... \mathrm{d}\xi_n \mathrm{d}\bar{\xi}_n \exp\left(\sum_{i,j=1}^{n} \bar{\xi}_i M_{ij} \xi_j \right).$$

Pour ne pas s'encombrer avec l'ordre d'intégration, on peut d'abord réordonner les $\mathrm{d}\xi$ à gauche et les $\mathrm{d}\bar{\xi}$ à droite

$$Z(M) = (-1)^p \int \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 ... \mathrm{d}\xi_n \mathrm{d}\bar{\xi}_1 \mathrm{d}\bar{\xi}_2 ... \mathrm{d}\bar{\xi}_n \exp\left(\sum_{i,j=1}^{n} \bar{\xi}_i M_{ij} \xi_j \right) \tag{A.4}$$

où le $(-1)^p$ provient des anticommutations des $\mathrm{d}\xi$ entre eux. Pour le calcul, on n'a pas besoin d'expliciter le nombre p, puisqu'à la fin, on remet dans l'ordre initial. Maintenant, on fait un changement de variable linéaire $\sum_j M_{ij} \xi_j = \xi'_i$ ou $\sum_j M^{-1}_{ij} \xi'_j = \xi_i$ ce qui nous donne $J(\xi')^{-1} = \det(M^{-1}) = (\det M)^{-1}$ et donc comme jacobien

$$J(\xi') = \det M.$$

On a ainsi

$$Z(M) = \det M \, (-1)^p \int \mathrm{d}\xi'_1 \mathrm{d}\xi'_2 ... \mathrm{d}\xi'_n \mathrm{d}\bar{\xi}_1 \mathrm{d}\bar{\xi}_2 ... \mathrm{d}\bar{\xi}_n \exp\left(\sum_{i=1}^{n} \bar{\xi}_i \xi'_i \right) \tag{A.5}$$

et en remettant les $\mathrm{d}\xi'$ à leurs places initiales

$$Z(M) = \det M \int \mathrm{d}\xi_1' \mathrm{d}\bar{\xi}_1 \mathrm{d}\xi_2' \mathrm{d}\bar{\xi}_2 ... \mathrm{d}\xi_n' \mathrm{d}\bar{\xi}_n \exp\left(\sum_{i=1}^{n} \bar{\xi}_i \xi_i'\right).$$

Bien que les variables ξ anticommutent entre elles, un produit de deux variables de Grassmann commute avec tout élément de l'algèbre ; ainsi l'exponentielle gaussienne s'écrit comme un produit d'exponentielles, sans problèmes de commutations ; ce qui conduit à

$$\exp\left(\sum_{i=1}^{n} \bar{\xi}_i \xi_i'\right) = \prod_{i=1}^{n} (1 + \bar{\xi}_i \xi_i').$$

On obtient alors l'égalité suivante pour une intégrale gaussienne

$$Z(M) = \det M \int \prod_{i=1}^{n} \mathrm{d}\xi_i' \mathrm{d}\bar{\xi}_i (1 + \bar{\xi}_i \xi_i') = \det M. \tag{A.6}$$

A.3 L'identité

Définissons l'opérateur

$$A = \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha} |\xi\rangle \langle\xi| .$$

D'après la définition des états cohérents et les propriétés d'intégration, on montre que $A = \mathrm{Id}$ est l'identité.

En effet, choisissons la base de l'espace de Fock composée des vecteurs de la forme $|\alpha_1 ... \alpha_n\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger ... c_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle$. Puisque par définition l'état cohérent $|\xi\rangle$ est vecteur propre des c_α, on a alors

$$\langle\alpha_1 ... \alpha_n|\xi\rangle = \xi_{\alpha_n} ... \xi_{\alpha_1}. \tag{A.7}$$

Maintenant prenons l'élément de matrice de A entre deux vecteurs de base $|\alpha_1 ... \alpha_n\rangle$ et $|\beta_1 ... \beta_n\rangle$

$$\langle\alpha_1 ... \alpha_n|A|\beta_1 ... \beta_n\rangle = \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha} \langle\alpha_1 ... \alpha_n|\xi\rangle \langle\xi|\beta_1 ... \beta_n\rangle \tag{A.8}$$

$$= \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha \prod_{\alpha} (1 - \bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha) \xi_{\alpha_n} ... \xi_{\alpha_1} \bar{\xi}_{\beta_1} ... \bar{\xi}_{\beta_n} \tag{A.9}$$

On regarde alors les cas possibles en considérant uniquement un état γ

$$\int \mathrm{d}\bar{\xi}_\gamma \mathrm{d}\xi_\gamma (1 - \bar{\xi}_\gamma \xi_\gamma) \left\{ \begin{array}{c} \xi_\gamma \bar{\xi}_\gamma \\ \bar{\xi}_\gamma \\ \xi_\gamma \\ 1 \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right\}. \tag{A.10}$$

On voit que l'élément de matrice $\langle\alpha_1 ... \alpha_n|A|\beta_1 ... \beta_n\rangle$ est différent de zéro si l'état γ est occupé en même temps dans $|\alpha_1 ... \alpha_n\rangle$ et $|\beta_1 ... \beta_n\rangle$ ou si l'état γ est inoccupé dans les deux états ce qui implique que l'ensemble $\{\alpha_1, ..., \alpha_n\}$ est une permutation de $\{\beta_1, ..., \beta_n\}$. On écrit alors $\xi_{\alpha_n} ... \xi_{\alpha_1} \bar{\xi}_{\beta_1} ... \bar{\xi}_{\beta_n} =$

$(-1)^P \xi_{\alpha_n}...\xi_{\alpha_1}\bar{\xi}_{\alpha_1}...\bar{\xi}_{\alpha_n}$. Dans ces conditions, on conclut par

$$\begin{aligned} \langle\alpha_1...\alpha_n|A|\beta_1...\beta_n\rangle &= (-1)^P && \text{(A.11)} \\ &= \langle\alpha_1...\alpha_n|\beta_1...\beta_n\rangle && \text{(A.12)} \end{aligned}$$

et pour tous les autres cas α et β, on a bien $\langle\alpha_1...\alpha_n|A|\beta_1...\beta_n\rangle = 0 = \langle\alpha_1...\alpha_n|\beta_1...\beta_n\rangle$, ce qui montre que $A = \mathrm{Id}$.

A.4 La trace

On obtient une formule intéressante pour la trace, en utilisant cette relation.
Soit la base complète $\{|n\rangle\}$. On a d'une part

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}A &= \sum_n \langle n|A|n\rangle \\ &= \int \prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha} \sum_n \langle n|\xi\rangle \langle\xi|A|n\rangle . \end{aligned} \tag{A.13}$$

Maintenant, prenons un état $|\psi_i\rangle$ de l'espace de Fock et écrivons-le sous la forme $|\psi_i\rangle = \sum_\alpha C^i_{\alpha_1,...,\alpha_n} c^\dagger_{\alpha_1}...c^\dagger_{\alpha_n}|0\rangle$, on a alors

$$\langle\psi_i|\xi\rangle \langle\xi|\psi_j\rangle = \langle-\xi|\psi_j\rangle \langle\psi_i|\xi\rangle \tag{A.14}$$

ce qui permet de changer l'ordre des termes dans (A.13)

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}A &= \int \prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha} \langle-\xi|A \sum_n |n\rangle \langle n|\xi\rangle \\ &= \int \prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha} \langle-\xi|A|\xi\rangle. \end{aligned}$$

Maintenant, il suffit de savoir comment agissent les états cohérents sur un opérateur $A(c^\dagger_\alpha, c_\alpha)$ écrit dans l'ordre normal pour des raisons de simplicité

$$\begin{aligned} \left\langle\xi|A(c^\dagger_\alpha, c_\alpha)|\xi'\right\rangle &= \langle\xi| \sum_\alpha f_{\alpha_1,...,\alpha_n} c^\dagger_{\alpha_1}...c^\dagger_{\alpha_n} c_{\alpha_n}...c_{\alpha_1} |\xi'\rangle \\ &= A(\bar{\xi}_\alpha, \xi'_\alpha) \langle\xi|\xi'\rangle . \end{aligned}$$

Pour évaluer $\langle\xi|\xi'\rangle$, il suffit d'utiliser les expressions explicites des états cohérents $|\xi\rangle = e^{-\sum_\alpha \xi_\alpha c^\dagger_\alpha}|0\rangle = \prod_\alpha (1 - \xi_\alpha c^\dagger_\alpha)|0\rangle$, ce qui donne

$$\begin{aligned} \langle\xi|\xi'\rangle &= \langle 0| \prod_\alpha (1 + \bar{\xi}_\alpha c_\alpha)(1 - \xi_\alpha c^\dagger_\alpha) |0\rangle \\ &= \prod_\alpha (1 + \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha) \\ &= e^{\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi'_\alpha}. \end{aligned}$$

On a donc l'expression d'un élément de matrice de A entre deux états cohérents

$$\langle\xi|\, A(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)\, |\xi'\rangle = A(\bar{\xi}_\alpha, \xi'_\alpha) e^{\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha \xi'_\alpha}.$$

La fonction de partition d'un ensemble canonique $Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta H}$ s'écrit alors en termes de variable de Grassmann ξ

$$Z = \int \prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha} \langle -\xi|\, e^{-\beta H}\, |\xi\rangle\,.$$

A.5 Fonction de partition en intégrales de chemins

Pour obtenir une intégrale de chemins, on va évaluer l'opérateur $\mathcal{U}(\bar{\xi}_{\alpha,f}, t_f; \xi_{\alpha,i}, t_i) := \langle\xi_f|\, e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_f - t_i)}\, |\xi_i\rangle$ en introduisant un nombre infini de résolution de l'identité ; ce qui donne tous les chemins possibles de l'évolution entre l'état $|\xi_i\rangle$ et $|\xi_f\rangle$. Puis, pour obtenir la fonction de partition, on utilise un temps imaginaire $t = -i\tau$ où τ est de "même nature" que β. On divise l'intervalle $[t_f, t_i]$ en M fragments de taille $\epsilon = \frac{t_f - t_i}{M}$ et on utilise deux indices pour identifier une variable de Grassmann ; à chaque temps t_k, on utilise une résolution de l'identité avec des variables de Grassmann d'indice k, puis on garde l'indice α qui correspond à la nature physique des (quasi)particules associées aux opérateurs $c_\alpha^\dagger$ et c_α.
Dans l'expression de Z, on doit évaluer l'expression $\langle -\xi|\, e^{-\beta H}\, |\xi\rangle$, une convention qui permet de simplifier le calcul consiste à mettre H dans l'ordre normal, ce qui permet d'avoir $e^{\epsilon H(c^\dagger, c)} = 1 + \epsilon H + O(\epsilon^2) = 1 + \epsilon : H : + O(\epsilon^2) =: 1 + \epsilon H : + O(\epsilon^2) =: e^{\epsilon H} : + O(\epsilon^2)$. On peut ainsi écrire directement $\langle\xi| : e^{\epsilon H(c^\dagger, c)} : |\xi'\rangle = e^{\epsilon H(\bar{\xi}, \xi)} e^{\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha \xi'_\alpha}$. On peut maintenant écrire

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\bar{\xi}_{\alpha,f}, t_f; \xi_{\alpha,i}, t_i) &= \lim_{M\to\infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_{\alpha,k} \mathrm{d}\xi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_\alpha \bar{\xi}_{\alpha,k} \xi_{\alpha_k}} \\
&\times \prod_{k=1}^{M} \langle\xi_k| : e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} H(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)} : + O(\epsilon^2)\, |\xi_{k-1}\rangle \qquad \text{(A.15)} \\
&= \lim_{M\to\infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_{\alpha,k} \mathrm{d}\xi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_\alpha \bar{\xi}_{\alpha,k} \xi_{\alpha_k}} \\
&\times e^{\sum_{k=1}^{M-1} (\sum_\alpha \bar{\xi}_{\alpha,k} \xi_{\alpha,k-1} - \frac{i\epsilon}{\hbar} H(\bar{\xi}_{\alpha,k}, \xi_{\alpha,k-1}))}. \qquad \text{(A.16)}
\end{aligned}$$

Il est commode de représenter l'ensemble $\{\xi_{\alpha,1}, \xi_{\alpha,2}, \ldots, \xi_{\alpha,M}\}$ comme étant les valeurs d'une fonction continue $\xi_\alpha(t)$. On définit alors les notations continues suivantes :

$$\begin{aligned}
\bar{\xi}_{\alpha,k} \frac{(\xi_{\alpha,k} - \xi_{\alpha,k-1})}{\varepsilon} &:= \bar{\xi}_\alpha(t) \frac{\partial}{\partial t} \xi_\alpha(t), \\
H(\bar{\xi}_{\alpha,k}; \xi_{\alpha,k-1}) &:= H(\bar{\xi}_\alpha(t), \xi_\alpha(t)).
\end{aligned}$$

On peut ainsi regrouper les termes et écrire le terme dans l'exponentielle dans ces notations "continues"

$$\begin{aligned}
&\textstyle\sum_\alpha \bar{\xi}_{\alpha,M}\xi_{\alpha,M-1} - i\frac{\epsilon}{\hbar}H(\bar{\xi}_{\alpha,M},\xi_{\alpha,M-1}) + i\epsilon\sum_{k=1}^{M-1}\left[i\sum_\alpha \bar{\xi}_{\alpha,k}\left(\frac{\xi_{\alpha,k}-\xi_{\alpha,k-1}}{\epsilon}\right) - \frac{1}{\hbar}H(\bar{\xi}_{\alpha,k};\xi_{\alpha,k-1})\right]\\
&= \textstyle\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha(t_f)\xi_\alpha(t_f) + \frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\left[\sum_\alpha \imath\hbar\bar{\xi}_\alpha(t)\partial_t\xi_\alpha(t) - H(\bar{\xi}_\alpha(t),\xi_\alpha(t)\right]\\
&= \textstyle\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha(t_f)\xi_\alpha(t_f) + \frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\ L(\bar{\xi}_{\alpha(t),\xi_\alpha(t)}).
\end{aligned} \tag{A.17}$$

En prenant la limite $M \to \infty$, on écrit $\mathcal{U}(\bar{\xi}_{\alpha,f},t_f;\xi_{\alpha,i},t_i)$ avec la notation d'intégrales de chemins

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\bar{\xi}_{\alpha,f},t_f;\xi_{\alpha,i},t_i) \quad = \quad & \int\limits_{\xi_\alpha(t_i)=\xi_{\alpha,i}}^{\bar{\xi}_\alpha(t_f)=\bar{\xi}_{\alpha,f}} \mathcal{D}[\bar{\xi}_\alpha(t)\xi_\alpha(t)]\, e^{\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha(t_f)\xi_\alpha(t_f)}\\
& \times e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t[\sum_\alpha \imath\hbar\bar{\xi}_\alpha(t)\partial_t\xi_\alpha(t) - H(\bar{\xi}_\alpha(t),\xi_\alpha(t))]}
\end{aligned}$$

où l'on intègre à chaque temps t, des variables de Grassmann faisant parties des trajectoires qui partent du point $\xi_{\alpha,i}$ et se terminent par $\xi_{\alpha,f}$, explicitement on a

$$\int\limits_{\xi_\alpha(t_i)}^{\bar{\xi}_\alpha(t_f)} \mathcal{D}[\bar{\xi}_\alpha(t)\xi_\alpha(t)] = \lim_{M\to\infty}\int\prod_{k=1}^{M-1}\prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_{\alpha,k}\xi_{\alpha,k}.$$

Pour le calcul de la trace, on doit évaluer $\langle -\xi|\, e^{-\beta H}\,|\xi\rangle$, c'est-à-dire $\mathcal{U}(\bar{\xi}_{\alpha,f},t_f;\xi_{\alpha,i},t_i)$ avec $\xi_{\alpha,f} = -\xi_{\alpha,i}$ pour un temps imaginaire $t = -i\tau$. On obtient des conditions aux bords antipériodiques pour la fonction de partition de fermions.
On peut maintenant exprimer la fonction de partition en termes d'intégrales de chemins. On part de

$$Z \quad = \quad \mathrm{Tr}e^{-\beta H},$$

on utilise ensuite l'expression de la trace en tant qu'intégrales sur des variables de Grassmann

$$Z = \int\prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha}\,\langle -\xi|\, e^{-\beta H}\,|\xi\rangle$$

puis on utilise l'opérateur d'évolution pour un temps imaginaire

$$\begin{aligned}
Z \quad = \quad & \int\prod_\alpha \mathrm{d}\bar{\xi}_\alpha \mathrm{d}\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha}\int\limits_{\xi'_\alpha(0)=\xi_\alpha}^{\xi'_\alpha(\beta)=-\xi_\alpha} \mathcal{D}[\bar{\xi}'_\alpha(\tau)\xi'_\alpha(\tau)]e^{\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha\xi_\alpha}\\
& \times e^{-\int\limits_0^\beta \mathrm{d}\tau[\sum_\alpha \bar{\xi}'_\alpha(\tau)\partial_\tau\xi'_\alpha(\tau) + H(\bar{\xi}'_\alpha(\tau),\xi'_\alpha(\tau))]},
\end{aligned}$$

on simplifie les deux exponentielles de signe opposé et on se retrouve avec une intégration sur des trajectoires *grassmanniennes* qui partent de ξ_α et se terminent au point $-\xi_\alpha$, puis on doit intégrer sur tous les ξ_α. On résume cela en disant qu'on intègre sur les trajectoires ξ_α avec des conditions aux bords antipériodiques ; on a alors l'expression finale de la fonction de partition pour des systèmes fermioniques

$$Z = \int_{\xi_\alpha(\beta)=-\xi_\alpha(0)} \mathcal{D}[\bar{\xi}_\alpha(\tau)\xi_\alpha(\tau)] e^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left\{\sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha(\tau)\partial_\tau \xi_\alpha(\tau) + H(\bar{\xi}_\alpha,\xi_\alpha)\right\}}.$$

Pour finir, on peut mentionner que pour le cas des bosons, les valeurs propres des états cohérents sont des nombres complexes. Dans la fonction de partition, l'intégration se fait sur des fonctions complexes avec des conditions aux bords périodiques. Les conditions aux bords interviennent en pratique lors du passage à la transformée de Fourier des $\xi(t)$ par l'intermédiaire des fréquences de Matsubara (voir l'annexe B). Dans cette thèse, en suivant Rozhkov et Arovas [3] qui ont calculé la fonction de partition de la jonction $S/QD/S$, on peut obtenir la fonction de partition de la jonction $S/2QD/S$ sous la forme d'un déterminant d'un certain opérateur. La base choisie pour calculer le déterminant est la base servant à la transformée de Fourier.

Annexe B

Conventions sur les fréquences de Matsubara

La représentation de la fonction de partition par les états cohérents implique que les champs écrits dans l'action sont des fonctions complexes et périodiques ($\phi(0) = \phi(\beta)$) pour les bosons et sont des fonctions grassmaniennes et anti-périodiques ($c(0) = -c(\beta)$) pour les fermions. Pour les bosons, on adopte généralement la convention suivante

$$\begin{aligned}
\phi(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\omega_n \tau} \phi_n \\
\phi^*(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} \phi_n^*
\end{aligned}$$

où l'on a bien ϕ et ϕ^* qui sont des champs conjugués complexes et $\omega_n = 2\pi\beta^{-1}n$. Pour des variables de Grassmann, on n'a pas de relations identiques car $\bar{c}$ et c sont indépendants et donc pas nécessairement des conjugués complexes. Mais pour des raisons de symétrie dans les notations par rapport aux bosons, on définit souvent leurs transformées de Fourier par la même convention

$$\begin{aligned}
c(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\omega_n \tau} c_n \\
\bar{c}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} \bar{c}_n.
\end{aligned}$$

avec la fréquence de Matsubara $\omega_n = 2\pi\beta^{-1}(n + 1/2)$. Lorsqu'on travaille avec les spineurs de Nambu, on utilise d'autres conventions et il est convenable d'utiliser les conventions suivantes pour $\sigma = \uparrow$

$$\begin{aligned}
c_{k\uparrow}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\omega_n \tau} c_{k\uparrow n} \\
\bar{c}_{k\uparrow}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} \bar{c}_{k\uparrow n}
\end{aligned}$$

et pour $\sigma = \downarrow$

$$\begin{aligned} c_{-k\downarrow}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} c_{-k\downarrow n} \\ \bar{c}_{-k\downarrow}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\omega_n \tau} \bar{c}_{-k\downarrow n}. \end{aligned}$$

On résume par

$$\begin{aligned} \Psi_k(\tau) &:= \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}(\tau) \\ \bar{c}_{-k\downarrow}(\tau) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-i\omega_n \tau} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow n} \\ \bar{c}_{-k\downarrow n} \end{pmatrix} \\ \bar{\Psi}_k(\tau) &:= \begin{pmatrix} \bar{c}_{k\uparrow}(\tau) & c_{-k\downarrow}(\tau) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\omega_n \tau} \begin{pmatrix} \bar{c}_{k\uparrow n} & c_{-k\downarrow n} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Annexe C

Intégration des contacts

Dans cette annexe, on intègre la fonction de partition sur les variables des supraconducteurs ("intégration des contacts"). On fait apparaître l'équation à inverser pour la fonction de Green du supraconducteur et on définit l'auto-énergie ("self-energy") Σ. L'action s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} S &= \int \mathrm{d}\tau \left\{ \sum_{j,k} \bar{\Psi}_{jk}(\tau) M_k(\tau) \Psi_{jk}(\tau) + \sum_a \bar{d}_a(\tau) N_a(\tau) d_a(\tau) + \sum_{j,k,a} \bar{\Psi}_{jk}(\tau) T_{jka} d_a(\tau) \right. \\ &\qquad \left. + \sum_{j,k,a} \bar{d}_a(\tau) T^\dagger_{jka} \Psi_{jk}(\tau) - \sum_a \frac{U_a}{2} (\bar{d}_a(\tau) d_a(\tau))^2 \right\} \end{aligned}$$

où on reconnaîtra $M_k(\tau) = (\partial_\tau + \xi_k \sigma_z + \Delta \sigma_x)$, $N_a(\tau) = (\partial_\tau + \varepsilon_a \sigma_z)$, $T_{jka} = e^{ikr_{aj}} \mathcal{T}_j$. Avec une telle action, on voit que la fonction de partition est une intégrale gaussienne. Pour pouvoir utiliser le résultat sur les intégrales gaussiennes en variables de Grassmann (voir l'égalité A.6), on translate d'abord les champs

$$\begin{aligned} \Psi(\tau) &\rightarrow \Psi(\tau) + \Psi^c(\tau) \\ \bar{\Psi}(\tau) &\rightarrow \bar{\Psi}(\tau) + \bar{\Psi}^c(\tau). \end{aligned} \tag{C.1}$$

On choisit Ψ^c afin qu'elle vérifie l'équation du mouvement classique $\frac{\delta S}{\delta \bar{\Psi}_{jk}(\tau)} = 0$ [1]. On pose donc l'expression suivante égale à zéro :

$$\frac{\delta S}{\delta \bar{\Psi}_{jk}(\tau)} = M_k(\tau) \Psi^c_{jk}(\tau) + \sum_a T_{jka} d_a(\tau) = 0.$$

On peut résoudre cette équation fonctionnelle en utilisant une fonction de Green définie par $M_k(\tau) G_k(\tau, \tau') = \delta(\tau' - \tau)$. Une solution s'écrit alors

$$\Psi^c_{jk}(\tau) = -\sum_a \int \mathrm{d}\tau' G_k(\tau, \tau') T_{jka} d_a(\tau').$$

1. Dans le cas d'une intégrale $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \; e^{-x^2 + ax}$, la condition $\frac{\delta S}{\delta \bar{\Psi}_{jk}(\tau)} = 0$ équivaut ici à trouver le maximum de la gaussienne afin de connaître la translation à effectuer pour se ramener à une intégrale du type $\int \mathrm{d}y \, e^{-y^2}$; ce qui revient à écrire $-x^2 + ax$ sous forme d'un "carré parfait".

On vérifie bien que c'est une solution de l'équation du mouvement $\frac{\delta S}{\delta \bar{\Psi}_{jk}(\tau)} = 0$. Pour $\bar{\Psi}^c_{jk}$, on la définit telle qu'elle soit solution de cette équation :

$$\bar{\Psi}_{jk}(\tau) M_k(\tau) + \sum_a \bar{d}_a(\tau) T^\dagger_{jka} = 0.$$

On résoud cette équation par une fonction de Green G^*_k telle que $G^*_k(\tau,\tau') M_k(\tau) = \delta(\tau' - \tau)$ et une solution s'écrit

$$\bar{\Psi}^c_{jk}(\tau) = -\sum_a \int \mathrm{d}\tau' \bar{d}_a(\tau') T^\dagger_{jka} G^*_k(\tau,\tau').$$

Il peut maintenant écrire les termes contenus dans l'action après la translation (C.1). Le premier terme devient

$$\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}\tau \bar{\Psi}_{jk}(\tau) M_k(\tau) \Psi_{jk}(\tau) - \sum_a \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \bar{\Psi}_{jk}(\tau) \underbrace{M_k(\tau) G_k(\tau,\tau')}_{=\delta(\tau'-\tau)} T_{jka} d_a(\tau') \\
&- \sum_a \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \bar{d}_a(\tau') T^\dagger_{jka} \underbrace{G^*_k(\tau,\tau') M_k(\tau)}_{=\delta(\tau'-\tau)} \Psi_{jk}(\tau) \\
&+ \sum_{a,b} \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \int \mathrm{d}\tau'' \bar{d}_a(\tau') T^\dagger_{jka} G^*_k(\tau,\tau') \underbrace{M_k(\tau) G_k(\tau,\tau'')}_{=\delta(\tau''-\tau)} T_{jkb} d_b(\tau'').
\end{aligned}$$

Le dernier terme se simplifie après intégration sur τ'' et devient

$$\sum_{a,b} \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \bar{d}_a(\tau') T^\dagger_{jka} G^*_k(\tau,\tau') T_{jkb} d_b(\tau).$$

Les troisième et quatrième termes de l'action deviennent respectivement

$$\begin{aligned}
&\sum_a \int \mathrm{d}\tau \bar{\Psi}_{jk}(\tau) T_{jka} d_a(\tau) - \sum_{a,b} \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \bar{d}_a(\tau') T^\dagger_{jka} G^*_k(\tau,\tau') T_{jkb} d_b(\tau) \\
&\sum_a \int \mathrm{d}\tau \bar{d}_a(\tau) T^\dagger_{jka} \Psi_{jk}(\tau) - \sum_{a,b} \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \bar{d}_a(\tau') T^\dagger_{jka} G_k(\tau,\tau') T_{jkb} d_b(\tau)
\end{aligned}$$

On additionne tous les termes pour obtenir :

$$\begin{aligned}
S \;=\; &\Bigg\{ \sum_{jk} \int \mathrm{d}\tau \bar{\Psi}_{jk}(\tau) M_k(\tau) \Psi_{jk}(\tau) + \sum_a \int \mathrm{d}\tau\, \overline{d}_a(\tau) \left(\partial_\tau + \varepsilon_a \sigma_z\right) d_a(\tau) \\
&- \sum_{a,b} \int \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}\tau' \bar{d}_a(\tau) T^\dagger_{jka} G_k(\tau,\tau') T_{jkb} d_b(\tau') - \sum_a \int \mathrm{d}\tau \frac{U_a}{2} (\bar{d}_a(\tau) d_a(\tau))^2 \Bigg\}.
\end{aligned}$$

L'intégration sur les variables des supraconducteurs[2] donne une constante Z_S indépendante de ϕ qu'il n'est alors pas nécessaire de calculer explicitement (ce qui nous intéresse

2. Pour utiliser explicitement la formule A.6 qui n'est pas écrite en intégrales de chemins, on passe aux transformées de Fourier discrètes utilisant les fréquences de Matsubara (voir l'annexe B).

est la dérivée de $\ln Z$ par rapport à ϕ)

$$Z = Z_S \int \prod_a \mathcal{D}\bar{d}_a \mathcal{D}d_a \ \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}}$$

avec l'action effective

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{eff}} &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \ \sum_a \overline{d}_a(\tau) \left(\partial_\tau + \varepsilon_a \sigma_z\right) d_a(\tau) - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \ \int_0^\beta \mathrm{d}\tau' \ \sum_{a,b} \overline{d}_a(\tau) \Sigma_{ab}(\tau - \tau') d_b(\tau') \\ &- \sum_a \frac{U_a}{2} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \ (\bar{d}_a(\tau) d_a(\tau))^2 \end{aligned}$$

où l'on définit

$$\Sigma_{ab}(\tau) = \sum_{j,k} \mathcal{T}_j^\dagger \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{aj}} G_k(\tau) \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{bj}} \mathcal{T}_j$$

tel que G_k soit solution de

$$(\partial_\tau + \xi_k \sigma_z + \Delta \sigma_x) G_k(\tau, \tau') = \delta(\tau' - \tau). \tag{C.2}$$

A partir de là, pour calculer l'énergie libre, on peut toujours faire un développement perturbatif pour un U "petit", mais l'approche choisie consiste à utiliser une transformation de Hubbard-Stratonovich pour traiter l'interaction coulombienne.

Annexe D

Transformation de Hubbard-Stratonovich

Dans cette annexe, on rappelle les idées permettant de transformer une interaction quartique en une interaction quadratique. L'action générale d'un supraconducteur BCS est donné par (voir l'équation (3.2))

$$S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \sum_{k,\sigma} \bar{c}_{k\sigma}(\partial_\tau + \xi_k)c_{k\sigma} - g\bar{A}A.$$

On souhaite généraliser la relation $e^{A^2/2} \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\Delta\, e^{-\Delta^2/2-\Delta A}$ à la quantité $e^{\int \mathrm{d}\tau\, \bar{A}(\tau)A(\tau)}$. Il faudrait introduire alors deux fonctions complexes $\bar{\Delta}$ et Δ pour découpler $\bar{A}$ et A. Si on discrétise le temps τ par $\tau_k = (k-1)\frac{\beta}{N}$, on peut définir $\Delta_k := \frac{\beta}{N}\Delta(\tau_k)$. Paramétrons $\bar{\Delta}_k$ et Δ_k par

$$\Delta_k = (x_k + iy_k)/2 \quad \Delta' = (x_k - iy_k)/2$$

où x_k et y_k sont des variables complexes. Soit l'intégrale gaussienne avec $\mathrm{Im}(x_k) = \mathrm{Im}(y_k) = 0$

$$I = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}x_k \mathrm{d}y_k\, e^{-(x_k^2+y_k^2)} = 1.$$

On peut plonger le plan $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{C}^2$ de sorte que I devienne l'intégrale de $e^{-a(x_k^2+y_k^2)}$ sur le volume $\mathrm{d}x_k \wedge \mathrm{d}y_k = -i\mathrm{d}\Delta' \wedge \mathrm{d}\Delta$ avec la condition $\Delta' = \bar{\Delta}$ (i.e. $\mathrm{Im}(x_k) = \mathrm{Im}(y_k) = 0$). Autrement dit

$$I = \int \frac{\mathrm{d}\bar{\Delta}_k \mathrm{d}\Delta_k}{2i\pi} e^{-\bar{\Delta}_k\Delta_k} = 1.$$

On a donc

$$\lim_{N\to\infty} \int \prod_{k=1}^{N} \frac{\mathrm{d}\bar{\Delta}_k \mathrm{d}\Delta_k}{2i\pi} e^{-\frac{\beta}{N}\sum_{k=1}^{N}\bar{\Delta}(\tau_k)\Delta(\tau_k)} := \int \mathcal{D}(\bar{\Delta},\Delta), e^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \bar{\Delta}(\tau)\Delta(\tau)} = 1.$$

En général, on ne se préoccupe pas des coefficients dans $\mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta)$ qu'on normalise ici de telle sorte que pour $\bar{\Delta} \to \frac{i}{\sqrt{g}}\bar{\Delta}$ et $\Delta \to \frac{i}{\sqrt{g}}\Delta$, on ait

$$\int \mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta), e^{\frac{1}{g}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \bar{\Delta}(\tau)\Delta(\tau)} = 1.$$

En utilisant cette identité et en faisant les translations $\bar{\Delta} \to \bar{\Delta} + g\bar{A}$ et $\Delta \to \Delta + gA$, on obtient

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}(\bar{c}, c)\, e^{-S} \\ &= \int \mathcal{D}(\bar{\Delta}, \Delta, \bar{c}, c) \exp\left(-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[\sum_{k,\sigma} \bar{c}_{k\sigma}(\partial_\tau + \xi_k) c_{k\sigma} + \Delta A + \bar{A}\Delta + \frac{1}{g}\bar{\Delta}\Delta \right] \right). \end{aligned}$$

L'action contenant l'interaction quartique est alors rendue quadratique.

Annexe E

La matrice M

E.1 Deux impuretés en présence d'un flux intérieur

Cette annexe contient les calculs intermédiaires menant à l'expression de la matrice $\mathcal{M}$ (donc, à l'énergie libre $F = \frac{X_1}{2U_1} + \frac{X_2}{2U_2} - \beta^{-1} \sum_{\omega_n} \ln \det \mathcal{M}_{\omega_n}$).
Soient l la longueur des nanotubes, ξ_0 la longueur de cohérence dans les supraconducteurs, r la distance entre les nanotubes telle que $l < \xi_0$. On introduit un flux magnétique $Bl\xi_0$ de l'ordre de quelques quantum de flux $\phi_0 = hc/e$ dans la boucle du SQUID. Le champ magnétique B doit être inférieur au champ critique H_c du supraconducteur considéré. A chaque saut tunnel entre un supraconducteur et une impureté, l'amplitude Tunnel acquiert un déphasage. On traduit cela par l'ajout dans l'hamiltonien Tunnel de quatre phases α_1, α_2, β_1, β_2 supposées indépendantes du flux Josephson ϕ

$$\begin{aligned} H_T &= \sum_{k,\sigma} t_L e^{i\alpha_1} d^\dagger_{1\sigma} c_{L,k\sigma} + t_R e^{i\alpha_2} c^\dagger_{R,k\sigma} d_{1\sigma} + h.c. \\ &\quad + t_L e^{i\beta_1} d^\dagger_{2\sigma} c_{L,k\sigma} + t_R e^{i\beta_2} c^\dagger_{R,k\sigma} d_{2\sigma} + h.c. \end{aligned}$$

où $c^\dagger_{jk\sigma}$ est l'opérateur de création dans un contact $j = L, R$ de vecteur d'onde k et de spin σ ; on définit également l'opérateur création $d^\dagger_{a\sigma}$ dans les impuretés $a = 1, 2$ et on pose un déphasage de ϕ entre les contacts avec $t_L = te^{-i\phi/4}$ et $t_R = te^{i\phi/4}$ où l'on prend dès à présent des transmissions symétriques $t_L = t_R$. L'hamiltonien peut s'écrire sous une première forme condensée

$$H_T = \sum_{j,k,\sigma,a} t_j e^{-ikr_a} e^{i\varphi_{aj}} d^\dagger_{a\sigma} c_{jk\sigma} + t_j^* e^{ikr_a} e^{-i\varphi_{aj}} c^\dagger_{jk\sigma} d_{a\sigma}$$

où l'on identifie les quatre déphasages mis en jeu

$$\begin{aligned}
\varphi_{1L} &= \alpha_1 \\
\varphi_{1R} &= -\alpha_2 \\
\varphi_{2L} &= \beta_1 \\
\varphi_{2R} &= -\beta_2.
\end{aligned}$$

On utilise maintenant les spineurs de Nambu pour écrire l'hamiltonien Tunnel sous la forme d'un couplage linéaire entre les spineurs des contacts et ceux des impuretés (nous permettant par la suite d'intégrer sur les variables Ψ des supraconducteurs)

$$\begin{aligned}
H_T &= \sum_{j,k,a} e^{-ikr_a} e^{i\varphi_{aj}} t_j (d^\dagger_{a\uparrow} c_{jk\uparrow} + d^\dagger_{a\downarrow} c_{jk\downarrow}) + e^{ikr_a} e^{-i\varphi_{aj}} t^*_j (+c^\dagger_{jk\uparrow} d_{a\uparrow} c^\dagger_{jk\downarrow}) d_{a\downarrow}) \\
&= \sum_{j,k,a} \underbrace{e^{-ikr_a} e^{i\varphi_{aj}} t_j}_{\equiv T_{jka}} d^\dagger_{a\uparrow} c_{jk\uparrow} + T_{j,-k,a} d^\dagger_{a\downarrow} c_{j,-k,\downarrow} + T^*_{jka} c^\dagger_{jk\uparrow} d_{a\uparrow} + T^*_{j,-k,a} c^\dagger_{j,-k,\downarrow} d_{a\downarrow} \\
&= \sum_{j,k,a} \begin{pmatrix} c^\dagger_{kj\uparrow} & c_{j,-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T^*_{jka} & 0 \\ 0 & -T_{j,-k,a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{a\uparrow} & d^\dagger_{a\downarrow} \end{pmatrix} \\
&\quad + \begin{pmatrix} d^\dagger_{a\uparrow} & d_{a\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{jka} & 0 \\ 0 & -T^*_{j,-k,a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{kj\uparrow} \\ c^\dagger_{j,-k\downarrow} \end{pmatrix};
\end{aligned}$$

on a ainsi l'hamiltonien Tunnel sous la forme voulue

$$H_T = \sum_{j,k,a} \Psi^\dagger_{jk} e^{ikr_a} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_{aj}} t^*_j & 0 \\ 0 & -e^{i\phi_{aj}} t_j \end{pmatrix} d_a + d^\dagger_a e^{-ikr_a} \begin{pmatrix} e^{i\varphi_{aj}} t_j & 0 \\ 0 & -e^{-i\phi_{aj}} t^*_j \end{pmatrix}$$

où l'on a

$$\begin{aligned}
e^{-i\varphi_{aL}} t^*_L &= e^{-i\varphi_{aL}} t e^{i\phi/4} \\
e^{i\varphi_{aL}} t_L &= e^{i\varphi_{aL}} t e^{-i\phi/4} \\
e^{-i\varphi_{aR}} t^*_R &= e^{-i\varphi_{aR}} t e^{-i\phi/4} \\
e^{i\varphi_{aR}} t_R &= e^{i\varphi_{aR}} t e^{i\phi/4}.
\end{aligned}$$

Pour les notations, on choisit arbitrairement de définir les phases suivantes $\delta_{aL} := \phi/4 - \varphi_{aL}$ et $\delta_{aR} := \phi/4 + \varphi_{aR}$ pour mettre l'hamiltonien sous une forme qui ressemble au cas "sans flux"

$$H_T = \sum_{j,k,a} \left[e^{ikr_a} \Psi^\dagger_{jk} \mathcal{T}_{ja} d_a + e^{-ikr_a} d^\dagger_a \mathcal{T}_{ja} \Psi_{jk} \right]$$

avec $\mathcal{T}_{aL} = t \begin{pmatrix} e^{i\delta_{aL}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\delta_{aL}} \end{pmatrix}$ et $\mathcal{T}_{aR} = t \begin{pmatrix} e^{-i\delta_{aR}} & 0 \\ 0 & -e^{i\delta_{aR}} \end{pmatrix}$. Pour retrouver le cas sans flux, il suffit de remplacer δ_{aj} par $\phi/4$. De manière explicite, les expressions de δ_{aj}

sont

$$\begin{aligned}
\delta_{1L} &= \phi/4 - \varphi_{1L} = \phi/4 - \alpha_1 \\
\delta_{2L} &= \phi/4 - \varphi_{2L} = \phi/4 - \beta_1 \\
\delta_{1R} &= \phi/4 + \varphi_{1R} = \phi/4 - \alpha_2 \\
\delta_{2R} &= \phi/4 - \varphi_{2R} = \phi/4 - \beta_2.
\end{aligned} \tag{E.1}$$

Avec cette nouvelle dépendance en $a = 1, 2$, on doit calculer les éléments de matrice de $\Sigma^{ab}_{\omega_n} = \sum_{jk} \mathcal{T}^{\dagger}_{ja} e^{-ikr_a} G_{\omega_n} e^{ikr_b} \mathcal{T}_{jb}$ avec

$$G^{ab}_{\omega_n} = \sum_k \frac{e^{ik(r_b - r_a)}}{\xi_k^2 + \omega_n^2 + \Delta^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi_k & \Delta \\ \Delta & i\omega_n - \xi_k \end{pmatrix}$$

et

$$G^{11}_{\omega_n} = G^{22}_{\omega_n} = \frac{\pi\nu(0)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} (i\omega_n + \Delta\sigma_x),$$

$$G^{12}_{\omega_n} = G^{21}_{\omega_n} = \begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r) & \Delta f_{\omega_n}(r) \\ \Delta f_{\omega_n}(r) & i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r) \end{pmatrix}.$$

On calcule le terme $\Sigma^{aa}_{\omega_n} = \mathcal{T}^{\dagger}_{aL} G^{aa}_{\omega_n} \mathcal{T}_{aL} + \mathcal{T}^{\dagger}_{aR} G^{aa}_{\omega_n} \mathcal{T}_{aR}$: on a d'abord

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}^{\dagger}_{aL} G^{aa}_{\omega_n} \mathcal{T}_{1a} &= t^* \begin{pmatrix} e^{-i\delta_{aL}} & 0 \\ 0 & -e^{i\delta_{aL}} \end{pmatrix} \frac{\pi\nu(0)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \begin{pmatrix} i\omega_n & \Delta \\ \Delta & i\omega_n \end{pmatrix} t \begin{pmatrix} e^{i\delta_{aL}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\delta_{aL}} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\pi\nu(0)|t|^2}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \begin{pmatrix} i\omega_n & -\Delta e^{-i2\delta_{aL}} \\ -\Delta e^{i2\delta_{aL}} & i\omega_n \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}^{\dagger}_{aR} G^{aa}_{\omega_n} \mathcal{T}_{aR} &= t^* \begin{pmatrix} e^{i\delta_{aR}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\delta_{aR}} \end{pmatrix} \frac{\pi\nu(0)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \begin{pmatrix} i\omega_n & \Delta \\ \Delta & i\omega_n \end{pmatrix} t \begin{pmatrix} e^{-i\delta_{aR}} & 0 \\ 0 & -e^{i\delta_{aR}} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\pi\nu(0)|t|^2}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \begin{pmatrix} i\omega_n & -\Delta e^{i2\delta_{aR}} \\ -\Delta e^{-i2\delta_{aR}} & i\omega_n \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

On additionne les deux termes :

$$\Sigma^{aa}_{\omega_n} = \underbrace{\frac{\pi\nu(0)(|t|^2 + |t|^2)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}}_{:=\alpha_n} \begin{pmatrix} i\omega_n & -\Delta\left(\frac{e^{i2\delta_{aR}} + e^{-i2\delta_{aL}}}{2}\right) \\ -\Delta\left(\frac{e^{-i2\delta_{aR}} + e^{i2\delta_{aL}}}{2}\right) & i\omega_n \end{pmatrix}.$$

On peut retrouver le cas sans flux toujours en remplaçant δ_{ja} par $\phi/4$ pour obtenir $\Sigma^{aa}_{\omega_n} = \alpha_n \left(i\omega_n - \Delta \cos\frac{\phi}{2}\sigma_x\right)$. Le deuxième terme à calculer est $\Sigma^{ab}_{\omega_n} = \mathcal{T}^{\dagger}_{aL} G^{ab}_{\omega_n} \mathcal{T}_{bL} + \mathcal{T}^{\dagger}_{aR} G^{ab}_{\omega_n} \mathcal{T}_{bR}$.

D'abord on calcule

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_{aL}^{\dagger} G_{\omega_n}^{ab} \mathcal{T}_{bL} &= t^* \begin{pmatrix} e^{-i\delta_{aL}} & 0 \\ 0 & -e^{i\delta_{aL}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r) & \Delta f_{\omega_n}(r) \\ \Delta f_{\omega_n}(r) & i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r) \end{pmatrix} \dots \\
&\qquad \dots\, t \begin{pmatrix} e^{i\delta_{bL}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\delta_{bL}} \end{pmatrix} \\
&= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r)) e^{i(\delta_{bL} - \delta_{aL})} & -\Delta f_{\omega_n}(r) e^{-i(\delta_{bL} + \delta_{aL})} \\ -\Delta f_{\omega_n}(r) e^{i(\delta_{bL} + \delta_{aL})} & (i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r)) e^{-i(\delta_{bL} - \delta_{aL})} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_{aR}^{\dagger} G_{\omega_n}^{ab} \mathcal{T}_{bR} &= t^* \begin{pmatrix} e^{i\delta_{aR}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\delta_{aR}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r) & \Delta f_{\omega_n}(r) \\ \Delta f_{\omega_n}(r) & i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r) \end{pmatrix} \dots \\
&\qquad \dots\, t \begin{pmatrix} e^{-i\delta_{bR}} & 0 \\ 0 & -e^{i\delta_{bR}} \end{pmatrix} \\
&= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r)) e^{i(\delta_{aR} - \delta_{bR})} & -\Delta f_{\omega_n}(r) e^{i(\delta_{bR} + \delta_{aR})} \\ -\Delta f_{\omega_n}(r) e^{-i(\delta_{bR} + \delta_{aR})} & (i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r)) e^{-i(\delta_{aR} - \delta_{bR})} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Avec (E.1), on obtient directement

$$\begin{aligned}
\delta_{1R} - \delta_{2R} &= \beta_2 - \alpha_2 \\
\delta_{2L} - \delta_{1L} &= \alpha_1 - \beta_1 \\
\delta_{2L} + \delta_{1L} &= \phi/2 - (\alpha_1 + \beta_1) \\
\delta_{2R} + \delta_{1R} &= \phi/2 - (\alpha_2 + \beta_2).
\end{aligned} \tag{E.2}$$

On a alors le terme $\Sigma_{\omega_n}^{12}$ qui est égale à

$$|t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r))(e^{-i(\alpha_2 - \beta_2)} + e^{i(\alpha_1 - \beta_1)}) & -\Delta f_{\omega_n}(r)(e^{i(\phi/2 - (\alpha_2 + \beta_2))} + e^{-i(\phi/2 - (\alpha_1 + \beta_1))}) \\ -\Delta f_{\omega_n}(r)(e^{-i(\phi/2 - (\alpha_2 + \beta_2))} + e^{i(\phi/2 - (\alpha_1 + \beta_1))}) & (i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r))(e^{i(\alpha_2 - \beta_2)} + e^{-i(\alpha_1 - \beta_1)}) \end{pmatrix}$$

et l'autre terme $\Sigma_{\omega_n}^{21}$ qui est égale à

$$|t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r))(e^{i(\alpha_2 - \beta_2)} + e^{-i(\alpha_1 - \beta_1)}) & -\Delta f_{\omega_n}(r)(e^{i(\phi/2 - (\alpha_2 + \beta_2))} + e^{-i(\phi/2 - (\alpha_1 + \beta_1))}) \\ -\Delta f_{\omega_n}(r)(e^{-i(\phi/2 - (\alpha_2 + \beta_2))} + e^{i(\phi/2 - (\alpha_1 + \beta_1))}) & (i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r))(e^{-i(\alpha_2 - \beta_2)} + e^{i(\alpha_1 - \beta_1)}) \end{pmatrix}.$$

La série $\sum_{\omega_n} \ln \det \mathcal{M}_{\omega_n}$ n'est pas étudiée et on ne sait rien sur sa convergence. Il est alors hasardeux de changer l'ordre des termes dans la somme. Cependant, pour cause de calculs numériques, on tronque la somme au niveau des fréquences (on fait la somme sur les fréquences ω_n telles que $|\omega_n|$ soient inférieures à une coupure donnée) et pas au niveau de l'indice entier n [1]). On vérifie alors que l'énergie libre est réelle ce qui est également pratique pour les simulations numériques $F = \frac{X_1}{2U_1} + \frac{X_2}{2U_2} - \beta^{-1} \sum_{\omega_n} \ln \det \mathcal{M}_{\omega_n}$. Il suffit de se rappeler que $-\omega_{-(n+1)} = \omega_n = 2\pi\beta^{-1}(n + 1/2)$, puis on constate que $f_{\omega_{-(n+1)}}(r) = f_{-\omega_n}(r) = f_{\omega_n}(r)$ et $g_{\omega_{-(n+1)}}(r) = g_{-\omega_n}(r) = g_{\omega_n}(r)$ et qu'elles sont des

1. Ce qu'on dit ici, c'est qu'une condition suffisante pour avoir une énergie réelle est de couper au niveau des fréquences de Matsubara.

fonctions réelles. La matrice $\mathcal{M}_{\omega_n}$ se met alors sous la forme

$$\mathcal{M}_{\omega_n} = \begin{pmatrix} a & b & (af+g)c & d \\ \bar{b} & a & \bar{d} & (af-g)\bar{c} \\ (af+g)\bar{c} & d & a & b \\ \bar{d} & (af-g)c & \bar{b} & a \end{pmatrix}$$

et d'autre part nous avons

$$\mathcal{M}_{\omega_{-(n+1)}} = \begin{pmatrix} \bar{a} & b & (\bar{a}f+g)c & d \\ \bar{b} & \bar{a} & \bar{d} & (\bar{a}f-g)\bar{c} \\ (\bar{a}f+g)\bar{c} & d & \bar{a} & b \\ \bar{d} & (\bar{a}f-g)c & \bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}.$$

Puisque f et g sont réels, on constate alors que $\mathcal{M}_{\omega_{-(n+1)}} = (\mathcal{M}^*_{\omega_n})^t = \mathcal{M}^\dagger_{\omega_n}$ où $*$ est l'opérateur qui conjugue (conjugaison complexe) les coefficients et t l'opérateur de transposition. Pour finir, on arrange l'ordre des termes de la série tronquée en séparant la somme sur les fréquences positives et négatives

$$\begin{aligned} F &= \frac{X_1}{2U_1} + \frac{X_2}{2U_2} - \beta^{-1} \sum_{\omega_n} \ln \det \mathcal{M}_{\omega_n} \\ &= \frac{X_1}{2U_1} + \frac{X_2}{2U_2} - \beta^{-1} \sum_{0 \le n < N} \ln \left(\det \mathcal{M}_{\omega_n} \det \mathcal{M}^*_{\omega_n} \right). \end{aligned} \tag{E.3}$$

Cette série tronquée définit maintenant l'énergie libre et les fréquences de Matsubara sont majorées (ce qui permet ensuite d'écrire $|\omega_n| \ll E_F$ ou $|\omega_n| \ll \omega_D$ quand on a besoin de travailler avec l'énergie de Fermi E_F ou la fréquence de Debye ω_D).
On considère maintenant le cas où

$$\alpha_1 = \alpha_2 = -\beta_1 = -\beta_2 := \alpha/4 \tag{E.4}$$

où $\alpha = 2\pi \frac{Blr}{\phi_0}$ est le déphasage dans le SQUID dû au champ magnétique B passant à travers la surface rectangulaire de côtés l (longueur des nanotubes) et r (la distance entre ces derniers). On a donc

$$\Sigma^{11}_{\omega_n} = \alpha_n \begin{pmatrix} i\omega_n & -\Delta \cos\left(\frac{\phi-\alpha}{2}\right) \\ -\Delta \cos\left(\frac{\phi-\alpha}{2}\right) & i\omega_n \end{pmatrix}$$

$$\Sigma^{22}_{\omega_n} = \alpha_n \begin{pmatrix} i\omega_n & -\Delta \cos\left(\frac{\phi+\alpha}{2}\right) \\ -\Delta \cos\left(\frac{\phi+\alpha}{2}\right) & i\omega_n \end{pmatrix}$$

$$\Sigma^{12}_{\omega_n} = \Sigma^{21}_{\omega_n} = |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r))2\cos\alpha/2 & -\Delta f_{\omega_n}(r) 2\cos\phi/2 \\ -\Delta f_{\omega_n}(r) 2\cos\phi/2 & (i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r))2\cos\alpha/2 \end{pmatrix}$$

La matrice $\mathcal{M}_{\omega_n}$ s'écrit sous la forme

$$\mathcal{M}_{\omega_n} = \begin{pmatrix} M^{11} & M^{12} \\ M^{21} & M^{22} \end{pmatrix}$$

où les M sont des matrices 2×2. Avec

$$\mathcal{M}_{\omega_n} = \begin{pmatrix} -i\omega_n + \varepsilon_1\sigma_z - X_1 - \Sigma^{11}_{\omega_n} & -\Sigma^{12}_{\omega_n} \\ -\Sigma^{21}_{\omega_n} & -i\omega_n + \varepsilon_2\sigma_z - X_2 - \Sigma^{22}_{\omega_n} \end{pmatrix}.$$

Les matrices 2×2 qui définissent $\mathcal{M}_{\omega_n}$ sont donc

$$M^{11} = \begin{pmatrix} -i\omega_n(\alpha_n + 1) + \varepsilon_1 - X_1 & \Delta\alpha_n \cos\left(\frac{\phi-\alpha}{2}\right) \\ \Delta\alpha_n \cos\left(\frac{\phi-\alpha}{2}\right) & -i\omega_n(\alpha_n + 1) - \varepsilon_1 - X_1 \end{pmatrix}$$

$$M^{22} = \begin{pmatrix} -i\omega_n(\alpha_n + 1) + \varepsilon_2 - X_2 & \Delta\alpha_n \cos\left(\frac{\phi+\alpha}{2}\right) \\ \Delta\alpha_n \cos\left(\frac{\phi+\alpha}{2}\right) & -i\omega_n(\alpha_n + 1) - \varepsilon_2 - X_2 \end{pmatrix}$$

et

$$M^{21} = M^{12} = -\Sigma^{21}_{\omega_n} = |t|^2 \begin{pmatrix} -(i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r))2\cos\alpha/2 & \Delta f_{\omega_n}(r) 2\cos\phi/2 \\ \Delta f_{\omega_n}(r) 2\cos\phi/2 & -(i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r))2\cos\alpha/2 \end{pmatrix}.$$

E.2 Distance d'injection quelconque

On calcule ici la matrice $\mathcal{M}_{\omega_n}$ générale où les distances d'injection d'électron sont quelconques, en incluant le flux α qui passe par la boucle formée par les nanotubes. La différence avec le cas précédent intervient dans l'expression de Σ_{ω_n} qui fait désormais intervenir des distances r qui dépendent non seulement de l'impureté en question (les indices a, b), mais aussi du côté auquel elles se réfèrent (les indices $j = L, R$). L'opérateur Σ_{ω_n} s'écrit

$$\Sigma^{ab}_{\omega_n} = \sum_{jk} \mathcal{T}^{\dagger}_{ja} e^{-ik\cdot r_{ja}} G_{\omega_n}(k) e^{ik\cdot r_{jb}} \mathcal{T}_{jb},$$

avec $G^{ab}_{j\omega_n} = \sum_k e^{ik\cdot(r_{jb}-r_{ja})} G_{\omega_n}(k) = \sum_k \frac{e^{ik\cdot(r_{jb}-r_{ja})}}{\xi_k^2+\omega_n^2+\Delta^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi_k & \Delta \\ \Delta & i\omega_n - \xi_k \end{pmatrix}$. On rappelle que pour $a = b$, on peut intègrer par rapport à ξ en faisant intervenir la densité d'état constante $\nu(0)$ au lieu d'intégrer sur k directement (résultats identiques à une correction près de l'ordre de Γ/E_F, voir l'annexe G). On obtient alors

$$G^{11}_{j\omega_n} = G^{22}_{j\omega_n} = \frac{\pi\nu(0)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}(i\omega_n + \Delta\sigma_x).$$

On peut déjà remarquer que ce sont des quantités finalement indépendantes de j et donc qu'elles sont identiques au cas symétrique. Ainsi, on a

$$\Sigma^{aa}_{\omega_n} = \frac{\pi\nu(0)2|t|^2}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}} \begin{pmatrix} i\omega_n & -\frac{\Delta}{2}(e^{-i2\delta_{aL}}+e^{i2\delta_{aR}}) \\ -\frac{\Delta}{2}(e^{i2\delta_{aL}}+e^{-i2\delta_{aR}}) & i\omega_n \end{pmatrix}.$$

Pour calculer les autres composantes de Σ_{ω_n}, on se rappelle qu'on a (pour $a \neq b$)

$$G^{ab}_{j\omega_n} = G^{12}_{j\omega_n} = G^{21}_{j\omega_n} = \begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n(r_j)} + g_{\omega_n}(r_j) & \Delta f_{\omega_n}(r_j) \\ \Delta f_{\omega_n}(r_j) & i\omega_n f_{\omega_n}(r_j) - g_{\omega_n}(r_j) \end{pmatrix}.$$

On va maintenant alléger les notations avec $f_j = f_{\omega_n}(r_j)$ et $g_j = g_{\omega_n}(r_j)$. Puisqu'on a $\Sigma^{ab}_{\omega_n} = \mathcal{T}^\dagger_{La} G^{ab}_{L\omega_n} \mathcal{T}_{Lb} + \mathcal{T}^\dagger_{Ra} G^{ab}_{R\omega_n} \mathcal{T}_{Rb}$, on calcule ces termes séparément

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^\dagger_{La} G^{ab}_{L\omega_n} \mathcal{T}_{Lb} &= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega f_L + g_L)e^{i(\delta_{bL}-\delta_{aL})} & -\Delta f_L e^{-i(\delta_{bL}+\delta_{aL})} \\ -\Delta f_L e^{i(\delta_{bL}+\delta_{aL})} & (i\omega f_L - g_L)e^{-i(\delta_{bL}-\delta_{aL})} \end{pmatrix} \\ \mathcal{T}^\dagger_{Ra} G^{ab}_{R\omega_n} \mathcal{T}_{Rb} &= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega f_R + g_R)e^{i(\delta_{aR}-\delta_{bR})} & -\Delta f_R e^{i(\delta_{bR}+\delta_{aR})} \\ -\Delta f_R e^{-i(\delta_{bR}+\delta_{aR})} & (i\omega f_R - g_R)e^{-i(\delta_{aR}-\delta_{bR})} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

De façon explicite, avec $\delta_{2L} - \delta_{1L} = \alpha_1 - \beta_1 = \alpha/2$ et $\delta_{2L} + \delta_{1L} = \phi/2 - (\alpha_1 + \beta_2) = \phi/2$ (en utilisant (E.2) et (E.4)), on a

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^\dagger_{L1} G^{12}_{L\omega_n} \mathcal{T}_{L2} &= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega f_L + g_L)e^{i\alpha/2} & -\Delta f_L e^{-i\phi/2} \\ -\Delta f_L e^{i\phi/2} & (i\omega f_L - g_L)e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ \mathcal{T}^\dagger_{L2} G^{21}_{L\omega_n} \mathcal{T}_{L1} &= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega f_L + g_L)e^{-i\alpha/2} & -\Delta f_L e^{-i\phi/2} \\ -\Delta f_L e^{i\phi/2} & (i\omega f_L - g_L)e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

puis avec $\delta_{1R} - \delta_{2R} = \beta_2 - \alpha_2 = -\alpha/2$ et $\delta_{1R} + \delta_{2R} = \phi/2 - (\alpha_2 + \beta_2) = \phi/2$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^\dagger_{R1} G^{12}_{R\omega_n} \mathcal{T}_{R2} &= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega f_R + g_R)e^{-i\alpha/2} & -\Delta f_R e^{i\phi/2} \\ -\Delta f_R e^{-i\phi/2} & (i\omega f_R - g_R)e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ \mathcal{T}^\dagger_{R2} G^{21}_{R\omega_n} \mathcal{T}_{R1} &= |t|^2 \begin{pmatrix} (i\omega f_R + g_R)e^{i\alpha/2} & -\Delta f_R e^{i\phi/2} \\ -\Delta f_R e^{-i\phi/2} & (i\omega f_R - g_R)e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

On additionne et on obtient $\Sigma^{12}_{\omega_n} = -\mathcal{M}^{12}_{\omega_n}$ et avec $\Sigma^{21}_{\omega_n} = -\mathcal{M}^{21}_{\omega_n}$ avec

$$\Sigma^{12}_{\omega_n} = -|t|^2 \begin{pmatrix} -(i\omega f_L + g_L)e^{i\alpha/2} - (i\omega f_R + g_R)e^{-i\alpha/2} & \Delta(f_L e^{-i\phi/2} + f_R e^{i\phi/2}) \\ \Delta(f_L e^{i\phi/2} + f_R e^{-i\phi/2}) & -(i\omega f_L - g_L)e^{-i\alpha/2} - (i\omega f_R - g_R)e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}$$

$$\Sigma^{21}_{\omega_n} = -|t|^2 \begin{pmatrix} -(i\omega f_L + g_L)e^{-i\alpha/2} - (i\omega f_R + g_R)e^{i\alpha/2} & \Delta(f_L e^{-i\phi/2} + f_R e^{i\phi/2}) \\ \Delta(f_L e^{i\phi/2} + f_R e^{-i\phi/2}) & -(i\omega f_L - g_L)e^{i\alpha/2} - (i\omega f_R - g_R)e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}.$$

On rappelle également que

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}^{11}_{\omega_n} &= \begin{pmatrix} -i\omega_n(\alpha_n+1)+\varepsilon_1-X_1 & \Delta\alpha_n\cos\left(\frac{\phi-\alpha}{2}\right) \\ \Delta\alpha_n\cos\left(\frac{\phi-\alpha}{2}\right) & -i\omega_n(\alpha_n+1)-\varepsilon_1-X_1 \end{pmatrix} \\
\mathcal{M}^{22}_{\omega_n} &= \begin{pmatrix} -i\omega_n(\alpha_n+1)+\varepsilon_2-X_2 & \Delta\alpha_n\cos\left(\frac{\phi+\alpha}{2}\right) \\ \Delta\alpha_n\cos\left(\frac{\phi+\alpha}{2}\right) & -i\omega_n(\alpha_n+1)-\varepsilon_2-X_2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

La suite des calculs se fait numériquement.

Annexe F

Méthode du col

Après avoir "intégré les contacts", puis utilisé une transformation de Hubbard-Stratonovich, on utilise la méthode du col pour calculer l'énergie libre $F = -\beta^{-1} \ln Z$ où

$$Z = Z_S \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}X_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}X_2 \; e^{-A(X_1,X_2)},$$

avec

$$\begin{aligned} A(X_1, X_2) &= +\frac{\beta}{2U_1} X_1^2 + \frac{\beta}{2U_2} X_2^2 - P(X_1, X_2), \\ P(X_1, X_2) &= \sum_n \ln \det \mathcal{M}_{\omega_n} \end{aligned}$$

La méthode du col à deux dimension nous donne

$$Z = Z_S 2\pi e^{-A(\mathbf{X}_0)} \left[\det A^{(2)}(\mathbf{X}_0)\right]^{-1/2} \tag{F.1}$$

où $\mathbf{X}_0$ est le minimum global de $A(X_1, X_2)$ pour une phase donnée ϕ et

$$\left[A^{(2)}\left(\mathbf{X}_0\right)\right]_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} A\left(\mathbf{X}_0\right) = \partial_{ij} A\left(\mathbf{X}_0\right).$$

On a alors

$$\ln Z = \ln Z_S - A\left(\mathbf{X}_0\right) + \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln \left[\det A^{(2)}\left(\mathbf{X}_0\right)\right].$$

Pour $\beta \gg 1$, on néglige le dernier terme (d'un point de vue pragmatique, si on garde l'expression entière de Z dans (F.1), le facteur $\left[\det A^{(2)}(\mathbf{X}_0)\right]^{-1/2}$ donne des fluctuations dans le courant Josephson ; on pourrait souhaiter bien entendu de faire une meilleure

analyse mathématique de cette approximation). En ne gardant que les termes qui dépendent de ϕ, on a finalement

$$F = \frac{\bar{X}_1^2}{2U_1} + \frac{\bar{X}_2^2}{2U_2} - \beta^{-1} \sum_n \ln \det \mathcal{M}_n(\bar{X}_1, \bar{X}_2) \tag{F.2}$$

où $\mathbf{X_0} = (\bar{X}_1, \bar{X}_2)$. La méthode numérique permettant de calculer le courant Josephson suit les étapes suivantes

- on fixe une phase ϕ
- on minimise la fonction (F.2) par un algorithme de “steepest descent”. Comme on peut avoir accès aux dérivées partielles par rapport à X_1 et X_2, on utilise le steepest descent qui nous donne un minimum local ou global en se donnant la fonction à minimiser et ses dérivées partielles.
- à partir des nombres $F(\phi)$ ainsi obtenus, on dérive numériquement pour obtenir le courant Josephson.

La vérification supplémentaire consiste à s’assurer que le minimum fournit par l’algorithme est bien le minimum global de la fonction. Pour cela, à partir d’un graphe en trois dimensions on s’assure que dans un intervalle raisonnable pour X_1 et X_2, la fonction est bien minimisée ; sinon, on déplace le point de départ de la méthode et on laisse l’algorithme fonctionner.

Annexe G

Fonctions de Green des supraconducteurs

On calcule ici les fonctions de Green en inversant un opérateur différentiel après une transformation de Fourier en utilisant les fréquences de Matsubara $\omega_n = \frac{2\pi}{\beta}(n+1/2)$ pour satisfaire les conditions aux bords antipériodiques de $G_k(\tau)$, $\Psi_{jk}(\tau)$ et $d_a(\tau)$ (mais aussi $\bar{\Psi}_{jk}$ et $\bar{d}_a$). On veut maintenant calculer $\Sigma^{ab}_{\omega_n} = \sum_j \mathcal{T}_j^\dagger G^{ab}_{\omega_n} \mathcal{T}_j$. D'abord, on va évaluer

$$G^{ab}_{\omega_n} = \sum_k \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{aj}} G_{k,\omega_n} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{bj}}$$

en partant de l'équation (C.2). L'invariance par translation implique qu'il suffit de résoudre l'équation $(\partial_\tau + \xi_k\sigma_z + \Delta\sigma_x)G_k(\tau) = \delta(\tau)$ ou de manière équivalente l'équation obtenue par transformée de Fourier (avec les fréquences de Matsubara)

$$(-i\omega_n + \xi_k\sigma_z + \Delta\sigma_x)G_{k,\omega_n} = 1.$$

donnant directement pour $(-i\omega_n + \xi\sigma_z + \Delta\sigma_x)^{-1}$

$$\begin{pmatrix} -i\omega_n + \xi & \Delta \\ \Delta & -i\omega_n - \xi \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{-\xi^2 - \omega_n^2 - \Delta^2} \begin{pmatrix} -i\omega_n - \xi & -\Delta \\ -\Delta & -i\omega_n + \xi \end{pmatrix}.$$

On a alors

$$G^{ab}_{\omega_n} = \sum_k \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)}}{\xi_k^2 + \omega_n^2 + \Delta^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi_k & \Delta \\ \Delta & i\omega_n - \xi_k \end{pmatrix} \tag{G.1}$$

avec

$$\mathcal{T}_L = t_L \begin{pmatrix} e^{i\phi/4} & 0 \\ 0 & -e^{-i\phi/4} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{T}_R = t_R \begin{pmatrix} e^{-i\phi/4} & 0 \\ 0 & -e^{i\phi/4} \end{pmatrix}$$

D'après l'expression de $G^{ab}_{\omega_n}$ (G.1), on a les symétries suivantes

$$\begin{aligned}\Sigma^{11}_{\omega_n} &= \Sigma^{22}_{\omega_n}\\ \Sigma^{12}_{\omega_n} &= \Sigma^{21}_{\omega_n}.\end{aligned}$$

Pour $a = b$, on utilise la densité d'états $\nu(\xi) = \sum_k \delta(\xi - \xi_k)$ pour calculer la somme sur k dans $G^{aa}_{\omega_n} := G_{\omega_n}$

$$G_{\omega_n} = \int \mathrm{d}\xi \nu(\xi) \frac{1}{\xi^2 + \omega_n^2 + \Delta^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi & \Delta \\ \Delta & +i\omega_n - \xi \end{pmatrix}.$$

En considérant $\nu(\xi)$ comme une constante $\nu(0)$ ($\forall \xi \in \mathbb{R}$), c'est à dire la densité d'états au niveau de Fermi dans des contacts *normaux*, on peut calculer cette intégrale. En fait, on a juste besoin d'une seule intégrale

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}\xi \frac{1}{\xi^2 + b^2} = \frac{\pi}{b}$$

et on donne une valeur nulle à l'intégrale avec $\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}\xi \frac{\xi}{\xi^2+b^2} := \lim_{\ell\to\infty} \int_{-\ell}^{\ell} \mathrm{d}\xi \frac{\xi}{\xi^2+b^2}$. On a donc après intégration

$$G_{\omega_n} = \frac{\pi\nu(0)}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} (i\omega_n + \Delta\sigma_x)$$

et ainsi

$$\Sigma^{11}_{\omega_n} = \alpha_{\omega_n} \left[i\omega_n - \Delta \cos\frac{\phi}{2}\sigma_x - \gamma\Delta \sin\frac{\phi}{2}\sigma_y \right]$$

avec $\alpha_{\omega_n} = \frac{\pi\nu(0)(t_R^2+t_L^2)}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}$ et $\gamma = \frac{t_L^2-t_R^2}{t_L^2+t_R^2}$.

On s'attache maintenant à calculer les fonctions f et g qui composent G^{12} :

$$G^{12}_{\omega_n} = \begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r) & \Delta f_{\omega_n}(r) \\ \Delta f_{\omega_n}(r) & i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r) \end{pmatrix}$$

G.1 La fonction "f" du CAR

Le calcul diffère un peu du précédent puisqu'on ne fait pas ici d'approximation sur la densité d'état. Toutefois, en utilisant la fonction de partition "numérique" (i.e. la série tronquée sur les fréquences de Matsubara où l'on peut dire que $|\omega_n| \ll E_F$, voir l'expression E.3), on va retrouver l'approximation de la densité d'état constante.
Pour $G^{12}_{\omega_n}$, on utilise

$$\sum_k \to \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k}$$

et on a

$$G^{12}_{\omega_n} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\xi_k^2 + \omega_n^2 + \Delta^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi_k & \Delta \\ \Delta & -i\omega_n + \xi_k \end{pmatrix}$$

avec $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, et $\xi_k = k^2/2m - \mu$, $\mu = k_F^2/2m$. Calculons une première intégrale

$$f_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{k} e^{i\mathbf{kr}} \frac{1}{\xi_k^2 + \omega_n^2 + \Delta^2}.$$

ou bien en coordonnées sphériques :

$$f_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{\infty} \mathrm{d}k\ k^2 \sin\theta e^{ikr\cos\theta} \frac{1}{\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}\right)^2 + \omega_n^2 + \Delta^2}.$$

Après l'intégration sur ϕ et θ, on a

$$f_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{ir} \int_0^{\infty} \mathrm{d}k \left(e^{ikr} - e^{-ikr}\right) \frac{k}{\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}\right)^2 + \omega_n^2 + \Delta^2}.$$

Puisque l'intégrand est paire, on utilise $\int_0^{\infty} \mathrm{d}k \ldots = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \ldots$ (pratique pour l'intégration complexe qu'on va faire) pour écrire

$$f_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\pi}{ir} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \left(e^{ikr} - e^{-ikr}\right) \frac{k}{\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}\right)^2 + \omega_n^2 + \Delta^2}.$$

Les pôles de la fonction à intégrer se mettent sous la forme

$$k = \pm a k_F e^{\pm i\theta}$$

où $a = \left(1 + \left(\frac{2m\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}{k_F^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{4}}$, $\theta = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2m\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}{k_F^2}\right)$. On définit les quatre pôles simples ainsi : $k_1 = a k_F e^{i\theta}$, $k_2 = -a k_F e^{-i\theta}$, $k_3 = -a k_F e^{i\theta}$, $k_4 = a k_F e^{-i\theta}$. Les contours sont le demi-cercle supérieur (sens anti-horaire) pour le terme proportionnel à e^{ikr} et le demi-cercle inférieur (sens horaire) pour e^{-ikr}. Le théorème des résidus donne (pour les pôles simples $Res(f, z_i) = \lim_{z \to z_i} (z - z_i) f(z)$)

$$\begin{aligned} f_{\omega_n}(r) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\pi}{ir} 2i\pi (2m)^2 \left[\frac{k_1 e^{ik_1 r}}{(k_1 - k_2)(k_1 - k_3)(k_1 - k_4)} + \frac{k_2 e^{ik_2 r}}{(k_2 - k_1)(k_2 - k_3)(k_2 - k_4)} \right. \\ &- \left. \frac{-k_3 e^{-ik_3 r}}{(k_3 - k_1)(k_3 - k_2)(k_3 - k_4)} - \frac{-k_4 e^{-ik_4 r}}{(k_4 - k_1)(k_4 - k_2)(k_4 - k_3)} \right], \end{aligned}$$

où les deux premiers termes contiennent les pôles (k_1, k_2) intérieurs au demi-cercle supérieur et les deux autres correspondent aux pôles (k_3, k_4) intérieurs au demi-cercle inférieur. Les intégrales associées aux contours paramétrés par $k = R\ e^{\pm i\theta}$ tendent vers 0 pour r tendant vers l'infini, en utilisant le lemme de Jordan par exemple. On introduit

maintenant l'expression des pôles en fonction de a, k_F, θ :

$$\begin{aligned} f_{\omega_n}(r) &= \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\pi}{ir}(2m)^2(2\pi i)\left[2\frac{ak_F e^{i\theta}e^{iak_F r\cos\theta}e^{-ak_F r\sin\theta}}{(ak_F)^3(e^{i\theta}+e^{-i\theta})(e^{i\theta}+e^{i\theta})(e^{i\theta}-e^{-i\theta})}\right. \\ &+ \left. 2\frac{ak_F e^{-i\theta}e^{-iak_F r\cos\theta}e^{-ak_F r\sin\theta}}{(ak_F)^3(e^{-i\theta}-e^{i\theta})(e^{-i\theta}+e^{-i\theta})(e^{-i\theta}+e^{i\theta})}\right] \end{aligned}$$

Après simplification, on a

$$f_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\pi^2}{ir}(2m)^2\frac{e^{-ak_F r\sin\theta}}{(ak_F)^2\sin 2\theta}\left\{e^{iak_F r\cos\theta} - e^{-iak_F r\cos\theta}\right\},$$

et finalement

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r) = \frac{\Gamma}{2\epsilon_F}\frac{e^{-ak_F r\sin\theta}}{a^2\sin 2\theta}\frac{\sin(ak_F r\cos\theta)}{k_F r} \tag{G.2}$$

avec $\Gamma = 2\pi\nu(0)|t|^2$, $\nu(0) = \frac{V}{(2\pi)^3}4\pi m k_F$, $\epsilon_F = k_F^2/2m$. On vérifie maintenant que

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r) = \frac{\Gamma}{2\epsilon_F}\frac{e^{-ak_F r\sin\theta}}{a^2\sin 2\theta}\frac{\sin(ak_F r\cos\theta)}{k_F r}$$

donne bien $\frac{\pi\nu(0)|t|^2}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}$ pour $\Delta, \omega_n \ll E_F$ et $r = 0$ (on vérifie la consistance du calcul exact et du calcul approché utilisant une densité d'état constante). D'abord on note $\eta = \frac{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}{E_F}$ et on veut développer en série suivant ce paramètre. D'abord on écrit

$$\begin{aligned} a &= 1 + \frac{1}{4}\eta + O(\eta^2) \\ \theta &= \frac{1}{2}\eta + O(\eta^2), \end{aligned}$$

puis en utilisant les developpement en séries des fonctions usuelles et on garde le terme en $1/\eta$, ce qui donne

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r) = \frac{\Gamma}{2E_F}\frac{\sin(k_F r)}{k_F r\eta} + O(1) \tag{G.3}$$

et finalement pour $r = 0$

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r=0) = \frac{\pi\nu(0)|t|^2}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}} + O(1). \tag{G.4}$$

G.2 Calcul de la fonction "g" du *cotunneling*

On utilise le même contour d'intégration pour calculer

$$g_{\omega_n}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\mathbf{k} e^{i\mathbf{kr}} \frac{\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}}{\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m}\right)^2 + \omega_n^2 + \Delta^2}.$$

Après intégration

$$\begin{aligned} g_{\omega_n}(r) &= \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\pi}{ir}(2m)^2\frac{\pi k_F^2}{2m}\frac{e^{-ak_F r\sin\theta}}{(ak_F)^2\sin 2\theta}\left\{e^{i(ak_F r\cos\theta+\theta)}\left(a^2e^{i\theta} - e^{-i\theta}\right)\right. \\ &\qquad \left. -e^{-i(ak_F r\cos\theta+\theta)}\left(a^2e^{-i\theta} - e^{i\theta}\right)\right\}. \end{aligned}$$

Comme pour $f_{\omega_n}(r)$, l'inégalité $|\omega_n| \ll E_F$ permet de simplifier cette expression. On définit toujours $\eta = \frac{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}{E_F}$ et on développe au premier ordre en η

$$|t|^2 g_{\omega_n}(r) = \frac{\Gamma}{2}\left[\frac{\cos k_F r}{k_F r} + O(\eta)\right].$$

Cette fonction diverge en $r = 0$ alors que la forme de la fonction de Green d'un supraconducteur libre suggère que ce processus est négligeable devant les réflections d'Andreev ou bien n'existe pas ; en fait, on voudrait pouvoir intervertir l'intégrale sur k et la limite pour r tendant vers 0, ce qui n'est pas possible ici.
Dans le cadre de la théorie de la matrice T, on peut assimiler $g_{\omega_n}(r)$ au phénomène de *cotunneling* qui correspond au changement de position des électrons entre les deux points quantiques, voir par exemple l'article de Sauret *et al.* [16]. Comme l'étude est ici à l'échelle mésoscopique, on ne devrait toutefois pas donner de signification particulière aux phénomènes se produisant à des distances proches de la longueur de Fermi. Pour finir, on a donc l'élément non-diagonal de $\Sigma_{\omega_n}(r)$ avec

$$\mathcal{T}_L^\dagger G_{\omega_n}^{12}\mathcal{T}_L = |t_L|^2\begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r) & -\Delta f_{\omega_n}(r)e^{-i\phi/2} \\ -\Delta f_{\omega_n}(r)e^{i\phi/2} & i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r)\end{pmatrix},$$

$$\mathcal{T}_R^\dagger G_{\omega_n}^{12}\mathcal{T}_R = |t_R|^2\begin{pmatrix} i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r) & -\Delta f_{\omega_n}(r)e^{i\phi/2} \\ -\Delta f_{\omega_n}(r)e^{-i\phi/2} & i\omega_n f_{\omega_n}(r) - g_{\omega_n}(r)\end{pmatrix},$$

on a

$$\Sigma_{\omega_n}^{12} = \begin{pmatrix} \left[i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r)\right]\left(|t_L|^2 + |t_R|^2\right) & -\Delta f_{\omega_n}(r)\left[|t_R|^2 e^{i\phi/2} + |t_L|^2 e^{-i\phi/2}\right] \\ -\Delta f_{\omega_n}(r)\left[|t_R|^2 e^{-i\phi/2} + |t_L|^2 e^{i\phi/2}\right] & \left[-i\omega_n f_{\omega_n}(r) + g_{\omega_n}(r)\right]\left(|t_L|^2 + |t_R|^2\right)\end{pmatrix}.$$

Annexe H

La coupure dans la fonction de *cotunneling*

La fonction g_{ω_n} correspondant au "cotunneling" diverge à $r = 0$. Dans cette thèse, on n'a pas cherché à résoudre ce problème au niveau du modèle (on ne touche pas aux causes, mais on en cache les effets). Une fois choisi, ce modèle conduit à une divergence lorsqu'on fait la limite $\lim_{r\to 0^+} g(r)$. Il faut remarquer que si on change l'hamiltonien Tunnel (3.6) en un hamiltonien qui décrit des contacts ponctuels en prenant directement $r_j = 0$, cette divergence n'apparaît pas. Le modèle de contact ponctuel a pour lui un succès expérimental qui n'est plus à démontrer. La question à résoudre est de savoir comment généraliser ce modèle à des points d'injections séparés d'une longueur plus petite que la longueur de cohérence du supraconducteur. Cette thèse permet de voir les conséquences du modèle (3.6). Pour le moment le modèle de contacts ponctuels suffit à modéliser des expériences de Cleuziou *et al.* [1] (2006). On peut essayer ici d'obtenir une limite pour r moyennant certaines hypothèses. Il n'est pas évident que ce qui est donné ici constitue une solution au problème.

On définit d'abord $\eta = \frac{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}}{E_F}$ puis on développe la série de Taylor à l'ordre le plus bas

$$\begin{aligned} a &= 1 + O(\eta^2) \\ \theta &= \frac{1}{2}\eta + O(\eta^2), \end{aligned}$$

ce qui donne dans la fonction f_{ω_n} décrivant les effets d'Andreev croisés

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r) = \frac{\Gamma}{2E_F} \frac{e^{-k_F r(1+O(\eta^2))(\eta/2+O(\eta^2))} \sin\left[(1+O(\eta^2))k_F r(1+O(\eta^2))\right]}{(1+O(\eta^2))^2 k_F r(\eta + O(\eta^2))}.$$

On garde le terme en $1/\eta$ qui donne finalement l'égalité

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r) = \frac{\Gamma}{2E_F}\left[\frac{\sin(k_F r)}{\eta k_F r} + O(1)\right]$$

qui semble bien définie pour un modèle de contacts ponctuels (même si l'on donne alors une valeur moyenne à une lorentzienne)

$$|t|^2 f_{\omega_n}(r=0) \quad = \quad \frac{\pi\nu(0)|t|^2}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2}} + \frac{\Gamma}{E_F}O(1).$$

En faisant de même pour $g_{\omega_n}(r)$ décrivant les phénomènes de *cotunneling*, on a

$$\begin{aligned} |t|^2 g_{\omega_n}(r) &= \frac{\Gamma}{2k_F r}\frac{e^{-k_F r(1+O(\eta^2))(\eta/2+O(\eta^2))}}{(1+O(\eta^2))^2(\eta/2+O(\eta^2))} \\ &\times \left[(1+O(\eta^2))^2\left\{\sin C_n r(1+O(\eta^2)+(\eta+O(\eta^2))\cos C_n r)\right\} - \sin C_n r\right] \\ &= \frac{\Gamma}{2}\left[\frac{\cos k_F r}{k_F r} + O(\eta)\right]. \end{aligned}$$

Pour être consistant avec le modèle de contacts ponctuels pour $r=0$ qui montre que les effets du *cotunneling* doivent être au moins négligeables devant les effets d'Andreev croisés (CAR) (on a montré ici que la correction sur f_{ω_n} (CAR) est proportionnelle à $\frac{\Gamma}{E_F}$), on suppose que r doit satisfaire la condition

$$\omega_n\Gamma/E_F \geq \frac{\Gamma}{2}\frac{|\cos k_F r|}{k_F r}$$

ou bien

$$k_F r \geq E_F/2\omega_n.$$

Si on suppose que le *cotunneling* peut être du même ordre que les effets d'Andreev croisés, on a

$$\omega_n\Gamma/2\sqrt{\omega_n^2+\Delta^2} \geq \frac{\Gamma}{2}\frac{|\cos k_F r|}{k_F r}.$$

Pour une valeur de ω_n donnant une "certaine convergence" numérique de la série égale au courant Josephson (par exemple $\omega_n = \Delta$), on obtient $r \geq 0.14\lambda_F$. La limite $\omega_n = \infty$ est bien définie et donne $1 \geq \frac{|\cos k_F r|}{k_F r}$ ou bien $r = 0.11\lambda_F$. Pour justifier cela, on constate *numériquement* que la valeur du courant critique pour $r=0$ est consistante avec celle obtenue pour $r = 0.11\lambda_F$ (voir la figure H.1) et en dessous de cette valeur le courant change rapidement d'ordre de grandeur. Cette valeur de $r = 0.11\lambda_F$ est donc fixée (heuristiquement) et n'est donc pas une coupure physique *ad hoc*.

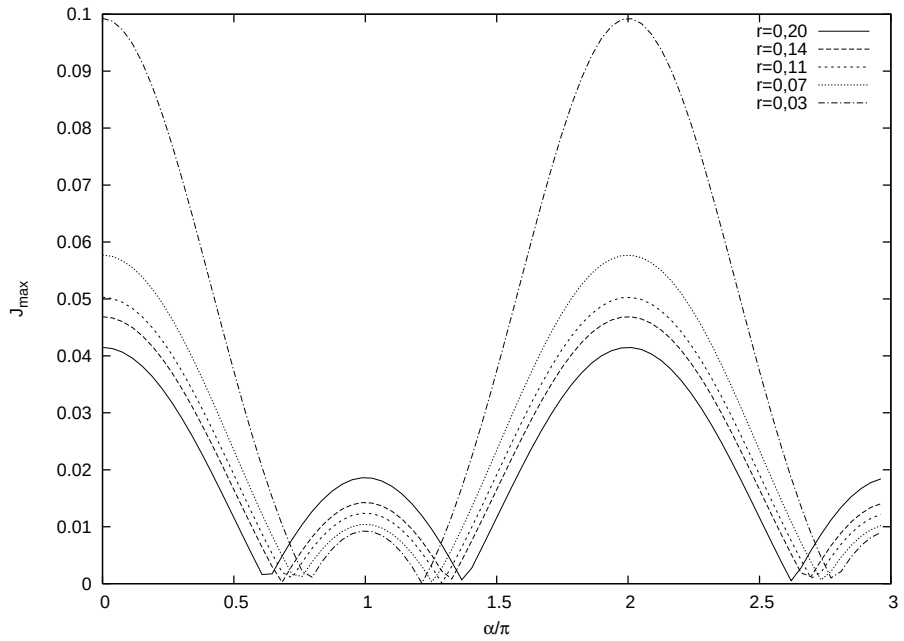

FIGURE H.1: Courant critique en fonction du flux α dans la boucle du SQUID. Les deux points quantiques sont dans une phase 0. Pour $r = 0.14\lambda_F$, le courant critique est consistant avec le courant obtenu dans le cadre du modèle de contact ponctuel. En dessous de $r = 0.14\lambda_F$, le courant critique augmente rapidement et donne lieu à de larges oscillations.

Annexe I

Introduction des tensions dans les amplitudes Tunnel

On considère l'hamiltonien général K qui introduit les tensions par l'intermédiaire des potentiels chimiques :

$$K = \underbrace{H_0 - \mu_j N_j}_{K_0} + H_T$$

où $j = 1, 2, 3, ...$ (un potentiel chimique pour chaque borne). On sait en thermodynamique que la différence de potentiel chimique entre deux réservoirs j et j' est proportionnelle à la tension $V_{jj'}$ entre j et j' avec $\mu_j - \mu_{j'} = eV_{jj'}$. Dans le cadre de la théorie Keldysh où le contour temporel est fermé, on peut utiliser une théorie adiabatique modifiée où la fonction de partition est

$$Z = \frac{1}{\mathrm{tr}\rho_0} \mathrm{tr}\rho_0 \; T_K \left\{ e^{-i \int_K \mathrm{dt} \; \tilde{H}_T(t)} \right\}.$$

Mais puisque le contour est fermé, on a $Z = 1$. L'opérateur $\tilde{H}_T$ est écrit en représentation interaction où il est donné par

$$\tilde{H}_T \quad = \quad e^{iK_0 t} H_T e^{-iK_0 t} = e^{iK_0 t} \left[\sum_{j=1,2,3} \sum_{k,\sigma} T_j^* c_{jk\sigma}^\dagger d_\sigma + h.c. \right] e^{-iK_0 t}. \tag{I.1}$$

L'écriture explicite de l'opérateur d'annihilation du point quantique

$$d_\sigma(t) = e^{iK_0 t} d_\sigma e^{-iK_0 t} = e^{-i(\epsilon - \mu_G)t} d_\sigma$$

peut s'obtenir par l'équation différentielle $\partial_t d_\sigma(t) = ie^{iK_0 t}[K_0, d_\sigma]e^{-iK_0 t} = -i(\epsilon - \mu_G)d_\sigma(t)$. On a alors le même type de relation pour les opérateurs fermioniques relatifs aux supraconducteurs :

$$\partial_t c_{jk\sigma}(t) = ie^{iK_0 t}[K_0, c_{jk\sigma}]e^{-iK_0 t} = -i(\xi_k - \mu_j)c_{jk\sigma}(t),$$

avec $\xi_k = \epsilon_k - \epsilon_F$. L'hamiltonien Tunnel peut donc s'écrire explicitement

$$\tilde{H}_T = \sum_{jk} t_j^* e^{i(\xi_k - (\mu_j - \mu_G) - \epsilon)t} c_{jk\sigma}^\dagger d_\sigma + h.c.$$

Cet hamiltonien est donc équivalent à l'hamiltonien Tunnel donné par la représentation interaction $e^{iH_0 t} H_T e^{-iH_0 t}$ sans potentiels chimiques avec une amplitude Tunnel dépendante maintenant explicitement du temps

$$t^* \to t^* e^{-i(\mu_j - \mu_G)t} \equiv t^*(t).$$

Les deux descriptions suivantes sont équivalentes pour le calcul du courant

$$\begin{aligned} K &= H_0 - \mu_j N^j + H_T \\ K' &= H_0 + H_T(t). \end{aligned}$$

On choisit d'inclure une dépendance temporelle dans l'amplitude, ce qui nous donne une nouvelle expression du courant Tunnel :

$$I_j(t) = -e\partial_t N_j = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k\sigma} \left[t_j e^{i(\mu_j - \mu_G)t} d_\sigma^\dagger(t) c_{jk\sigma}(t) - t_j^* e^{-i(\mu_j - \mu_G)t} c_{jk\sigma}^\dagger(t) d_\sigma(t) \right].$$

Pour étudier les cas où les tensions sont dépendantes du temps (par exemple dans le cas photo-assisté ou bien pour les "pas de Shapiro"), il est commode d'utiliser une transformation unitaire. En partant de l'équation de Schrödinger, changer de base par une transformation unitaire U (laissant invariant les valeurs moyennes d'opérateurs) revient à garder la même base mais en ayant transformé l'hamiltonien initial H (i.e. $i\partial_t U|\psi\rangle = HU|\psi\rangle \Leftrightarrow i\partial_t|\psi\rangle = H'|\psi\rangle$) :

$$H = U^\dagger H' U - U^\dagger i\partial_t U. \tag{I.2}$$

La transformation suivante permet de mettre les potentiels chimiques dans les amplitudes Tunnel

$$U(t) = \exp\left[-i \sum_j \int_a^t \mathrm{d}t' \mu_j(t') \sum_{k_j,\sigma_j} c_{k_j,\sigma_j}^\dagger c_{k_j,\sigma_j} \right] \tag{I.3}$$

avec a arbitraire. Dans notre cas, $j = 1, 2, 3$ et $c_{k_j,\sigma_j}^\dagger$ est l'opérateur de création pour la borne j qui peut être une impureté, un métal ou un supraconducteur. Cette transformation laisse invariant les hamiltoniens de métaux normaux, d'impureté en interaction coulombienne et de supraconducteurs BCS (contenant l'interaction quartique) et fait apparaître naturellement une différence de potentiel chimique. Avec (I.2) et (I.3), on a

$$H' = H_0 + \sum_j \mu_j(t) \sum_{k_j,\sigma_j} n_{k_j,\sigma_j} + U H_T U^\dagger.$$

Le deuxième terme enlève les potentiels chimiques dans H_0 et pour calculer le troisième terme, il nous faut

$$c^\dagger_{k_i,\sigma_i} c_{k_j,\sigma_j} \left(\sum_l \mu_l \sum_{q_l,\sigma_l} n_{q_l,\sigma_l} \right)^n = \left(-\mu_i + \mu_j + \sum_{q_i,\sigma_i} n_{q_i,\sigma_i} \right)^n c^\dagger_{k_i,\sigma_i} c_{k_j,\sigma_j} \tag{I.4}$$

pour $i \neq j$ qu'on établit directement avec les relations canoniques d'anticommutation. L'hamiltonien Tunnel général (avec $t_{ij} = t^*_{ji}$)[1] qui conserve le spin se transforme alors de la manière suivante

$$\begin{aligned} UH_TU^\dagger &= U\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{k_i,k_j}\left[t_{ij}c^\dagger_{k_i,\sigma_i}c_{k_j,\sigma_i} + h.c.\right]U^\dagger \\ &= U\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{k_i,k_j}\left[t_{ij}c^\dagger_{k_i,\sigma_i}c_{k_j,\sigma_i}\sum_n \frac{\left(i\sum_l \int_a^t \mathrm{d}t'\mu_l(t')\sum_{q_i,\sigma_i} n_{q_i,\sigma_i}\right)^n}{n!} + h.c.U^\dagger\right] \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{k_i,k_j}\left[t_{ij}e^{-i\chi_{i,j}(t)}c^\dagger_{k_i,\sigma_i}c_{k_j,\sigma_i} + h.c.\right] \end{aligned} \tag{I.5}$$

avec $\chi_{i,j}(t) = \int_a^t \mathrm{d}t'(\mu_i(t') - \mu_j(t'))$ Dans le cas d'un point quantique placé entre deux réservoirs, on ne parle pas de potentiel chimique mais de tension de grille qui ajoute une énergie similaire au potentiel chimique. On peut alors toujours faire la transformation (I.3). Si la différence de potentiel est nulle, le courant n'est pas nécessairement nul, par exemple dans l'effet Josephson DC généré par un flux magnétique interne à une boucle supraconductrice. Les paires de Cooper sont alors déphasées par ce flux. Dans l'hamiltonien BCS, le paramètre Δ représente la fonction d'appariement d'une paire de Cooper. En toute généralité, elle est complexe $|\Delta|e^{i\Phi}$. On peut le voir comme un champ de Hubbard-Stratonovich permettant de passer d'un hamiltonien BCS avec des interactions quartiques à des interactions de la forme $\Delta^* c^\dagger_{k,\uparrow} c^\dagger_{-k,\downarrow}$ (entre électrons d'une paire de Cooper). La phase Φ accumulée est alors responsable du courant Josephson. On peut se convaincre par le raisonnement suivant. En partant d'un hamiltonien BCS avec l'interaction quartique, on applique la procédure de champs moyens que ce soit par une transformation de Bogolioubov-Valatin ou par des champs de Hubbard-Stratanovitch (voir par exemple [57, 58]). Le "gap" devient une fonction complexe $\Delta = |\Delta|e^{i\Phi}$. On considère ensuite l'hamiltonien général composé de deux supraconducteurs couplés par un hamiltonien Tunnel puis on fait une transformation unitaire analogue à (I.3) qui fait passer cette fois la phase Φ_j d'un supraconducteur j dans les amplitudes tunnel

$$U = \exp\left(\sum_j \frac{\Phi_j}{2} \sum_{k_j,\sigma} c^\dagger_{k_j,\sigma} c_{c_j,\sigma} \right). \tag{I.6}$$

1. En général, les amplitudes Tunnel sont approximées par leurs valeurs à l'énergie de Fermi et ne dépendent pas alors de k_i, en première approximation. De plus, il est difficile de justifier physiquement l'asymétrie $t_{ij} \neq t_{ji}$ et pour simplifier t_{ij} est réel.

L'amplitude Tunnel ainsi déphasée donne un courant en l'absence de tension aux bornes des supraconducteurs. Dans le cas le plus général, la phase d'un coefficient Tunnel sera donc composé d'un déphasage constant provenant de (I.6) et d'un déphasage dépendant du temps provenant de (I.3). Dans le cas où la tension est sinusoïdale (cas non traité dans la "partie supraconductivité" mais traité dans la "partie nanotube") le coefficient Tunnel sera alors de la forme

$$T(t) = Te^{i(\phi_0+\omega_0 t+\alpha\cos(\omega_r t))}$$

où ϕ_0 est la phase provenant d'un champ externe ; ω_0 provient d'une tension continue et ω_r, d'une tension alternative (souvent dans un régime photo-assisté). Ensuite, on utilise en général l'identité de Jacobi-Anger pour exprimer $T(t)$ complètement en termes d'ondes planes

$$e^{iz\cos\phi} = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} i^n J_n(z) e^{in\phi}.$$

A partir de là, le formalisme général pour arriver au courant n'est pas modifié.

Bibliographie

[1] J.-P. Cleuziou, W. Wernsdorfer, V. Bouchiat, T. Ondarçuhu et M. Monthioux : Carbon nanotube superconducting quantum interference device. *Nature Nanotechnology*, 1:53–59, Oct 2006.

[2] S. A. Kivelson et B. Z. Spivak : Aharonov-bohm oscillations with period hc/4e and negative magnetoresistance in dirty superconductors. *Phys. Rev. B*, 45(18): 10490–10495, May 1992.

[3] A. V. Rozhkov et Daniel P. Arovas : Josephson coupling through a magnetic impurity. *Phys. Rev. Lett.*, 82(13):2788–2791, Mar 1999.

[4] L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin et B. Etienne : Observation of the $e/3$ fractionally charged laughlin quasiparticle. *Phys. Rev. Lett.*, 79(13):2526–2529, Sep 1997.

[5] Marjorie Creux : *Détection des corrélations de courant à haute fréquence à l'aide d'un circuit résonnant.* Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, Marseille, France, 2007.

[6] Uri Gavish : *Current noise in mesoscopic devices and its measurement.* Thèse de doctorat, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel, 2004.

[7] Andrei V. Lebedev, Adeline Crepieux et Thierry Martin : Electron injection in a nanotube with leads : Finite-frequency noise correlations and anomalous charges. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 71(7):075416, 2005.

[8] S. Duhot et R. Mélin : Nonlocal andreev reflection in a carbon nanotube superconducting quantum interference device. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 77(1):014525, 2008.

[9] Mahn-Soo Choi, C. Bruder et Daniel Loss : Spin-dependent josephson current through double quantum dots and measurement of entangled electron states. *Phys. Rev. B*, 62(20):13569–13572, Nov 2000.

[10] M. H. Cohen, L. M. Falicov et J. C. Phillips : Superconductive tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 8(8):316–318, Apr 1962.

[11] L. I. Glazman et K. A. Matveev : Resonant josephson current through kondo impurities in a tunnel barrier. *JETP letters*, 89:659, 1989.

[12] J. Hubbard : Calculation of partition functions. *Phys. Rev. Lett.*, 3(2):77–78, Jul 1959.

[13] S. Weinberg : *The Quantum Theory of Fields, volume II*, chapitre 21.6. Camb. Univ. Press, Cambridge, 1996.

[14] Mahn-Soo Choi, Minchul Lee, Kicheon Kang et W. Belzig : Kondo effect and josephson current through a quantum dot between two superconductors. *Phys. Rev. B*, 70(2):020502, Jul 2004.

[15] F. Siano et R. Egger : Josephson current through a nanoscale magnetic quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 93(4):047002, Jul 2004.

[16] Olivier Sauret, Denis Feinberg et Thierry Martin : Quantum master equations for the superconductor–quantum dot entangler. *Phys. Rev. B*, 70(24):245313, Dec 2004.

[17] Richard E. Prange : Tunneling from a many-particle point of view. *Phys. Rev.*, 131(3):1083–1086, Aug 1963.

[18] Patrik Recher, Eugene V. Sukhorukov et Daniel Loss : Andreev tunneling, coulomb blockade, and resonant transport of nonlocal spin-entangled electrons. *Phys. Rev. B*, 63(16):165314, Apr 2001.

[19] M. Büttiker : Role of quantum coherence in series resistors. *Phys. Rev. B*, 33 (5):3020–3026, Mar 1986.

[20] D. J. Thouless : Maximum metallic resistance in thin wires. *Phys. Rev. Lett.*, 39 (18):1167–1169, Oct 1977.

[21] Yuri Galperin : Introduction to modern solid state physics. Lecture Notes.

[22] P. Samuelsson, G. Johansson, Å. Ingerman, V. S. Shumeiko et G. Wendin : Proximity effect and multiple andreev reflections in chaotic josephson junctions. *Phys. Rev. B*, 65(18):180514, May 2002.

[23] J. C. Cuevas, J. Hammer, J. Kopu, J. K. Viljas et M. Eschrig : Proximity effect and multiple andreev reflections in diffusive superconductor–normal-metal–superconductor junctions. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 73(18):184505, 2006.

[24] A. Levy Yeyati, J. C. Cuevas, A. López-Dávalos et A. Martín-Rodero : Resonant tunneling through a small quantum dot coupled to superconducting leads. *Phys. Rev. B*, 55(10):R6137–R6140, Mar 1997.

[25] Yshai Avishai, Anatoly Golub et Andrei D. Zaikin : Tunneling through an anderson impurity between superconductors. *Phys. Rev. B*, 63(13):134515, Mar 2001.

[26] M. R. Buitelaar, T. Nussbaumer et C. Schönenberger : Quantum dot in the kondo regime coupled to superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 89(25):256801, Dec 2002.

[27] M. R. Buitelaar, W. Belzig, T. Nussbaumer, B. Babić, C. Bruder et C. Schönenberger : Multiple andreev reflections in a carbon nanotube quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 91(5):057005, Aug 2003.

[28] A. Zazunov, R. Egger, C. Mora et T. Martin : Superconducting transport through a vibrating molecule. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 73(21):214501, 2006.

[29] Alex Kamenev : Many-body theory of non-equilibrium systems. Les Houches Summer School on "Nanoscopic Quantum Transport", 2004. URL `http://arxiv.org/abs/cond-mat/0412296`.

[30] Alex Kamenev : Keldysh and doi-peliti techniques for out-of-equilibrium systems, 2001. URL `arXiv.org:cond-mat/0109316`.

[31] M. Tinkham : *Introduction to Superconductivity.* Courier Dover Publications, 2004.

[32] Athanassios Bardas et Dmitri V. Averin : Electron transport in mesoscopic disordered superconductor–normal-metal–superconductor junctions. *Phys. Rev. B*, 56(14):R8518–R8521, Oct 1997.

[33] Adeline Crépieux, Pierre Devillard et Thierry Martin : Photoassisted current and shot noise in the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. B*, 69(20):205302, May 2004.

[34] Marine Guigou, Alexandre Popoff, Thierry Martin et Adeline Crépieux : Finite-size effects in a nanotube connected to leads : Super- and sub-poissonian noise. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 76(4):045104, 2007.

[35] LD Landau, EM Lifshitz et LP Pitaevskii : *Statistical Physics.* Butterworth-Heinemann, 1980.

[36] G.B. Lesovik et R. Loosen : On the detection of finite-frequency current fluctuations. *JETP letters*, 65:295, Feb 1997.

[37] Reinhold Egger et Alexander O. Gogolin : Effective low-energy theory for correlated carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 79(25):5082–5085, Dec 1997.

[38] Reinhold Egger et Alexander O. Gogolin : Correlated transport and non-fermi-liquid behavior in single-wall carbon nanotubes. *Eur. Phys. J. B*, 3:281–300, Mar 1998.

[39] A. Crépieux, R. Guyon, P. Devillard et T. Martin : Electron injection in a nanotube : noise correlations and entanglement. *Phys. Rev. B*, 67(20):205408, May 2003.

[40] K.-V. Pham, M. Gabay et P. Lederer : Fractional excitations in the luttinger liquid. *Phys. Rev. B*, 61(24):16397–16422, Jun 2000.

[41] Sander J. Tans, Michel H. Devoret, Hongjie Dai, Andreas Thess, Richard E. Smalley, L. J. Geerligs et Cees Dekker : Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires. *Nature*, 386:474–477, Apr 1997.

[42] S. Tomonaga : Remarks on bloch's method of sound waves applied to many-fermion problems. *Prog. Theor. Phys.*, 5:544, 1950.

[43] J. M. Luttinger : An exactly soluble model of a many-fermion system. *J. Math. Phys.*, 4:1154, 1963.

[44] D. C. Mattis et E. H. Lieb : Exact solution of a many-fermion system and its associated boson field. *J. Math. Phys.*, 6:304, 1965.

[45] F. D. M. Haldane : 'luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, 14:2585, 1981.

[46] J. von Delft et H. Schoeller : Bosonization for beginners - refermionization for experts. *Annalen der Physik*, 7:225, 1998 (arXiv :cond-mat/9805275).

[47] A. Altland et B. Simons : *Condensed Matter Field Theory.* Cambridge University Press, 2006.

[48] I. V. Lerner et I. V. Yurkevich : Impurity in the tomonaga-luttinger model : a functional integral approach. *In Proceedings of LXXXI Les Houches School on Nanoscopic quantum transport*, 2004.

[49] J. Torrès : *Transport et bruit quantique dans les fils mésoscopiques.* Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, Marseille, France, 2001.

[50] Victoria I. Fernández et Carlos M. Naón : Friedel oscillations in a luttinger liquid with long-range interactions. *Phys. Rev. B*, 64(3):033402, Jun 2001.

[51] Lorenz Bartosch et Peter Kopietz : Exactly solvable model of n coupled luttinger chains. *Phys. Rev. B*, 55(23):15360–15363, Jun 1997.

[52] G. B. Lesovik et L. S. Levitov : Noise in an ac biased junction : Nonstationary aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. Lett.*, 72(4):538–541, Jan 1994.

[53] Rosa López, Mahn-Soo Choi et Ramón Aguado : Josephson current through a kondo molecule. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 75 (4):045132, 2007.

[54] F. S. Bergeret, A. Levy Yeyati et A. Martín-Rodero : Josephson effect through a quantum dot array. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 76(17):174510, 2007.

[55] J.W. Negele et H. Orland : *Quantum many-particle systems.* Perseus Books, 1998.

[56] J. Zinn-Justin : *Intégrale de chemin en mécanique quantique.* EDP Sciences ; CNRS Editions, 2003.

[57] Piers Coleman : Many body physics. Monograph.

[58] S. Weinberg : The quantum theory of fields. Vol. 2 : Modern applications. *Cambridge, New York : Cambridge University Press,| c1996*, 1996.