

## THÈSE

Pour obtenir le grade de

### DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Physique de la matière condensée et du rayonnement**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

**Benoît ROCHE**

Thèse dirigée par **Marc SANQUER**  
et codirigée par **Xavier JEHL**

préparée au sein **du laboratoire de transport électronique quantique et supraconductivité,**  
**du service de physique statistique, magnétisme et supraconductivité,**  
**de l'institut nanosciences et cryogénie,**  
**du CEA Grenoble**  
et de l'école doctorale de physique de Grenoble

# Transport électronique à travers deux dopants, en régime statique et dynamique, dans des transistors silicium

Thèse soutenue publiquement le **22 octobre 2012**,  
devant le jury composé de :

**Hervé COURTOIS**

Professeur des Universités de l'Université Joseph Fourier, Président

**Hugues POTHIER**

SPEC / CEA Saclay , Rapporteur

**Benjamin HUARD**

Laboratoire Pierre Aigrain, Rapporteur

**Christian GLATTLI**

SPEC / CEA Saclay , Examineur

**Marc SANQUER**

SPSMS / CEA Grenoble, Directeur de thèse

**Xavier JEHL**

SPSMS / CEA Grenoble, Co-Directeur de thèse





# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>v</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 L'électronique quantique en silicium</b>	<b>5</b>
1.1 Propriétés électroniques des boîtes quantiques en silicium . . . . .	6
1.1.1 Les îlots de Coulomb . . . . .	6
1.1.2 Quantification des niveaux électroniques . . . . .	7
1.1.3 Réalisations de boîtes quantiques . . . . .	8
1.1.4 Caractéristiques électroniques du silicium . . . . .	12
1.1.5 Niveaux électroniques dans un gaz d'électrons bidimensionnel . . . . .	14
1.1.6 Niveaux électroniques des boîtes quantiques . . . . .	14
1.2 Les dopants du silicium . . . . .	17
1.2.1 Spectre des dopants . . . . .	17
1.2.2 Transport à travers des dopants uniques . . . . .	20
1.2.3 Placement des dopants . . . . .	22
1.3 Notre approche . . . . .	22
1.3.1 Fabrication des échantillons . . . . .	23
1.3.2 Îlots de Coulomb définis par la grille . . . . .	23
1.3.3 Géométrie « grilles face à face » . . . . .	25
1.3.4 Dopage de la structure . . . . .	26
1.3.5 Conclusion . . . . .	28
<b>2 Transport à travers une paire de dopants en série</b>	<b>31</b>
2.1 Considérations statistiques . . . . .	32
2.2 Caractérisation de l'échantillon mésoscopique . . . . .	34
2.2.1 Régime à faible tension de substrat . . . . .	34
2.2.2 Régime à forte tension de substrat . . . . .	37
2.3 Électrostatique du système de deux niveaux quantiques . . . . .	37
2.3.1 Diagramme de stabilité . . . . .	38
2.3.2 Caractérisation à tension de polarisation finie . . . . .	39
2.3.3 Caractérisations expérimentales de paires de dopants à faible $V_d$ . . . . .	41
2.4 Spectroscopie des niveaux électroniques des dopants . . . . .	43
2.4.1 Spectroscopie des deux dopants . . . . .	44
2.4.2 Visibilité des lignes de courant . . . . .	45
2.4.3 Sensibilité de la levée de dégénérescence de vallée à l'environnement . . . . .	46

2.4.4	Effet du champ magnétique . . . . .	47
2.5	Transport quantique . . . . .	48
2.5.1	Processus inélastiques . . . . .	48
2.5.2	Corrections dues aux interactions électrostatiques . . . . .	50
<b>3</b>	<b>Dynamique d'un système à deux dopants</b>	<b>55</b>
3.1	Couplage tunnel de l'orbitale d'un dopant . . . . .	56
3.1.1	Couplage tunnel des orbitales électroniques de deux dopants . . . . .	56
3.1.2	Couplage des niveaux électroniques des dopants aux électrodes . . . . .	59
3.2	Modélisation de la dynamique du système . . . . .	60
3.2.1	Pompage d'électrons . . . . .	60
3.2.2	Équation maîtresse . . . . .	61
3.2.3	Transition Landau-Zener . . . . .	63
3.3	Étude du système en régime dynamique . . . . .	64
3.3.1	Régime adiabatique . . . . .	64
3.3.2	Régime non-adiabatique . . . . .	65
<b>4</b>	<b>Évolution cohérente du système</b>	<b>75</b>
4.1	Position du problème . . . . .	76
4.1.1	Les qubits . . . . .	76
4.1.2	Équations du transport . . . . .	77
4.1.3	Cas général . . . . .	79
4.1.4	Décohérence . . . . .	79
4.2	Régime stationnaire . . . . .	80
4.2.1	Équation du transport . . . . .	80
4.2.2	Estimation des paramètres . . . . .	81
4.2.3	Courant inélastique . . . . .	83
4.2.4	Évolution en température . . . . .	85
4.3	Évolution cohérente en régime dynamique . . . . .	85
4.3.1	Transition Landau-Zener . . . . .	86
4.3.2	Transport photo-assisté . . . . .	88
4.3.3	Interférences de Landau-Zener-Stückelberg . . . . .	90
	<b>Conclusion</b>	<b>95</b>
	<b>A Techniques expérimentales</b>	<b>97</b>
	<b>B Mesures automatiques à température ambiante</b>	<b>99</b>
	<b>Liste des publications associées</b>	<b>103</b>
	<b>Références</b>	<b>104</b>



# Remerciements

Les trois ans que j'ai passés à Grenoble, au CEA, représentent une expérience scientifique extrêmement enrichissante qui m'a permis de découvrir le côté expérimental de la physique mésoscopique ; ce que je n'aurais pas pu faire autrement. Tout le mérite revient aux personnes qui m'ont entouré, qui sont toutes talentueuses, ouvertes à la discussion, et prêtes à rendre service. Je tiens tout particulièrement à remercier mes encadrants, qui m'ont pour ainsi dire quasiment tout appris, qui sont à l'origine des systèmes expérimentaux que j'ai eu la chance d'utiliser, et des interprétations des données. Merci Xavier et Marc pour m'avoir pris sous votre responsabilité, pour m'avoir fait confiance et m'avoir laissé une grande liberté dans mon travail. Merci pour toutes ces discussions que l'on a eu et qui m'ont énormément apprises. J'ai appris à vos côtés les techniques expérimentales indispensables à un bon expérimentateur, ainsi que les principes physique du transport dans le silicium, le blocage de Coulomb, les pompes à électrons, et bien d'autres choses qui n'apparaissent pas dans cette thèse. Je garde aussi un très bon souvenir des moments que l'on a pu passer en dehors du laboratoire, autour d'un verre de bière ou bien sur les pistes de ski. Je tiens aussi à remercier Silvano et Eva qui sont à l'origine des expériences de transport photo-assistées que j'ai eu l'occasion de réaliser avec eux. Ce travail n'aurait pas pu se faire non plus sans Romain Wacquez et Maud Vinet, qui ont fabriqué les échantillons et qui répondu à mes nombreuses questions, Yann-Michel Niquet et Manuel Cobian pour les simulations indispensables à tout bon papier, ainsi que pour m'avoir appris tous les détails sur les dopants dans le silicium, et Roman-Pascal Riwar et Janine Splettstösser dont l'aide a été primordiale pour explorer en détail le pompage d'électrons de façon théorique. Dans les coulisses, Pierre et Frédéric à l'électronique, qui ont confectionné une partie de l'électronique bas-bruit, « les microscopes » pour nos échantillons. Jean-Michel et Michel qui ont participé au bon fonctionnement des cryostats. Et les derniers, et non les moindres, Jean-Luc et Marie-Jo qui ont assuré pendant tout ce temps là le bon fonctionnement du labo. Pour finir, j'ai beaucoup appris en discutant avec les théoriciens du SPSMS, merci donc à Vitaly, Julia et Manuel, et à Xavier Waintal. Merci aussi à Harold Baranger qui nous a aidé à comprendre le *Fermi Edge Singularity*.

Au début de ma thèse, j'ai eu la chance de travailler avec Mathieu Pierre, qui était mon prédécesseur sur le sujet, qui s'avère être un physicien remarquable et un excellent informaticien. Ce fut un réel plaisir de pouvoir discuter avec quelqu'un qui partageait mon attrait pour la programmation et pour le Python. En commençant ma thèse, j'ai bénéficié de son héritage informatique inestimable : des programmes pour analyser les données et pour simuler un système arbitraire de boîtes à électrons. Il a aussi été un élément important dans l'automatisation des mesures des échantillons à température ambiante en mettant les mains dans le cambouis de l'HP Basic.

Bien sûr je n'aurai pas pu effectuer ce travail sans les différents soutiens financiers qui ont

entourés ma thèse. Je remercie donc le CEA pour avoir financé mon stage de 5 mois. L'histoire aurait pu s'arrêter là... mais heureusement l'école doctorale de physique de Grenoble a pris le relais pour financer ma thèse. Je la remercie particulièrement pour m'avoir accordé un subventionnement pour trois ans, et pour avoir subventionné mes repas au CEA. Je tiens à remercier le CEA pour tous les moyens matériel et humain qui ont été mis à ma disposition, sans oublier la séance annuelle de soutien moral d'Isabelle Schuster. Je tiens à mettre en avant la facilité avec laquelle il a été possible de profiter des équipements de la DRT, en particulier les stations de test sous pointes, sans lesquelles cette thèse n'aurait pas eu la même saveur. Je n'oublie pas Roland Madar, qui, lorsqu'il était directeur de l'ENSPG, a décidé d'accepter dans son école un candidat qui était un peu loin dans la liste d'attente.

Je remercie aussi les organismes qui ont financé ces travaux, et plus proche de moi les personnes qui ont passé une quantité de temps indécente à écrire, et gérer ces projets : Marc responsable des projets AFSiD et SIMPSSON, et Xavier pour PoESI. J'en profite aussi pour remercier tous les collaborateurs de ces projets pour toutes les interactions que nous avons eues.

Tout aussi important pour la recherche, je remercie très sincèrement l'ensemble des organisateurs des séminaires de la Fondation Nanoscience, ainsi que les responsables du GDR de physique mésoscopique. Un grand merci à tous les organisateurs de la Fête de la science 2012, et tout particulièrement à Colette Lartigue pour son organisation sans faille, à Charlène pour m'avoir motivé à me lancer dans cette expérience formidable, et à Benjamin Lagier pour nous avoir prêté le magnifique circuit aimanté qu'il a réalisé. Tous ces événements sont primordiales pour permettre à la fois aux chercheurs de se rencontrer et d'avoir ainsi l'ouverture d'esprit essentiel au travail de recherche, et d'autre part pour permettre l'échange entre les chercheurs et le grand public.

Je voudrais aussi remercier MM. Hugues Pothier et Benjamin Huard qui ont rapporté cette thèse, et MM. Hervé Courtois et Christian Glattli pour avoir accepté de faire partie du jury. Je les remercie pour leurs remarques et corrections qui ont permis d'améliorer ce manuscrit.

Pour finir je souhaite remercier tous mes collègues du labo qui ont rendu ces trois ans et demi extrêmement enrichissantes d'un point de vue scientifique, mais surtout humain. L'ambiance au laboratoire a toujours été très chaleureuse, et lorsque les manips qui ne marchent pas comme on le voudrait, ça permet d'aller de l'avant. Du côté des thésards et postdocs, je tiens tous d'abord à remercier du fond du cœur Audrey qui a été obligée de m'entendre me plaindre chaque jour, pendant 3 ans. On a partagé ces quelques mois de rédaction enfermés dans un même bureau, à attendre que ces lignes et ces figures viennent grossir un peu plus le compte ultime. Merci pour m'avoir montré comment augmenter la tailles des marges ! Pour avoir partagé Cocazote, Oranginazote et Schweppsazote (les plus dangereux), pour Tis, pour avoir baptisé mon Ficus Benjamina, pour m'avoir montré que je n'étais pas obligé de chasser ma nourriture tous les soirs... bref, pour tout. J'ai eu aussi la chance de rencontrer Benoit, et retrouver Charlène, qui sont apparus comme deux soleils rayonnant leur bonne humeur dans le labo. Je pense aussi aux autres thésards actuels, Alexander, Andreas, Boris et Paul, avec qui j'ai passé de très bons moments (profitez de votre thèse ! Ça vous manquera quand elle sera finie) ; les anciens thésards, Mathieu, Thomas et Guillaume, le groupe du rez-de-chaussée : Eva, Pana, Massimo, Georgios, Nathalia (bons souvenirs de Bilbao), Eduardo (qui a réussi à me faire oublier le stress de Zürich, pour passer de très bons moments !), Aurélien (merci

pour tes conseils musicaux) et Aaron. Sans oublier Byron, Soumya, Mario, Zoltan, Bashcar et Paul Cavalier. Chez IMAPEC : Valentin, Matthieu, Mounir, Alexandra et Amalia. Les théoriciens : Caroline, Benoit et Driss. Du côté du LETI, je remercie Veeresh et Hadrien. Et enfin un grand merci à tous les chercheurs et permanents du labo avec qui j'ai pris beaucoup de plaisir à discuter de physique, et surtout d'autres choses : Claude (grâce à qui je pense bien avoir entendu toute l'œuvre de Bach), Vincent (qui m'a fait voir la chartreuse comme je ne l'avais jamais vue), François, Louis, Max, Christophe, Jean-Pascal, Bernard, Georg, Alexandre, Daniel, Daï et Fred G..

Je souhaite aussi remercier chaleureusement Alexei qui a apporté un peu d'esprit russe au sein du laboratoire pendant plusieurs mois. Je garde un très bon souvenir de nos discussions sérieuses, et celles qui l'étaient un peu moins. J'ai eu l'occasion d'apprendre quelques phrases importantes en russe, de quoi survivre si je vais un jour en Russie.

Merci aux développeurs des logiciels libres Matplotlib, Numpy, Scipy (et les autres modules que j'ai oubliés), Spyder, Python(x,y), Inkscape, Notepad++, MiKTeX, TexMaker, TeXcount, JabRef, TortoiseSVN, SumatraPDF, UltraVNC et TightVNC, que j'ai été utilisés abondamment au cours de ma thèse.

Et pour finir, je voudrais remercier ceux qui ont eu le courage de relire ce manuscrit pour l'alléger de ses fautes : Alexander, Audrey et Claude qui a pris le temps, même quand il n'en avait plus, de corriger le français des paragraphes importants ; ainsi qu'Alexandre et Paul (le thésard parfait).



# Introduction

## Contexte

Les semi-conducteurs sont omniprésents dans le monde actuel, leurs applications touchant de nombreux domaines : le traitement de l'information (puces électroniques, mémoires), la photonique (LED, LASER), la réalisation de capteurs (capteurs photo-sensibles), et l'étude de la physique (dispositifs à électrons uniques, information quantique). Après plus d'un demi-siècle d'efforts de recherche, les semi-conducteurs dévoilent encore des propriétés nouvelles. Citons par exemple la découverte du graphène et de sa structure de bande particulière, ou la réalisation d'isolants topologiques. Les avancées dans le domaine des semi-conducteurs concernent aussi les progrès technologiques, comme la possibilité de réaliser des structures de très petites dimensions, ce qui a permis d'améliorer considérablement les performances des transistors en micro-électronique. Le contrôle de dopants uniques fait partie des réalisations récentes qui permettent de concevoir des dispositifs nouveaux. Le travail présenté dans cette thèse a pour objectif d'étudier expérimentalement les possibilités offertes par le contrôle de deux dopants couplés dans le silicium.

Actuellement, une partie des efforts de recherche en électronique quantique concerne l'information quantique. La motivation bien souvent évoquée pour l'étude des boîtes quantiques est la réalisation d'un ordinateur quantique, qui serait capable d'effectuer des calculs en utilisant des algorithmes dont la complexité (et donc le temps d'exécution) serait nettement plus avantageuse que celle de leurs homologues en logique classique. Cette perspective est certes très attrayante, mais elle n'est pas la seule utilité des boîtes quantiques pour l'électronique. Les boîtes quantiques sont des objets de très petite taille, extrêmement sensibles à leur environnement, et semblent donc bien adaptés pour sonder une région très réduite de l'espace. En optique quantique, les centres  $NV^-$  sont ainsi capables de mesurer des champs magnétiques à quelques nanomètres près.

L'étude des dopants isolés a commencé dans les années 1950. Il n'était pas possible à l'époque d'accéder à des dopants uniques, les expériences étaient donc effectuées sur un ensemble de dopants isolés. C'est ainsi que des mesures optiques ont permis de révéler le spectre des dopants. De nos jours, nous avons la possibilité de calculer les états électroniques des dopants en exploitant la capacité de calcul des ordinateurs actuels. Ces calculs sont essentiels, car en pratique on place les dopants dans des nanostructures pour être en mesure de les manipuler. La présence de différents matériaux perturbe la structure électronique des dopants, qui doit alors être simulée.

Dans le domaine de l'électronique quantique, les dopants sont vus comme une alternative possible aux boîtes quantiques. Ces dernières, qui ont été étudiées intensivement depuis les

années 1990, présentent comme les dopants des niveaux électroniques discrets. Cependant, contrairement aux boîtes quantiques, les dopants offrent la possibilité de créer des structures parfaitement reproductibles, à condition de pouvoir contrôler précisément la position de quelques atomes. De plus, la taille ultime des dopants permet d'obtenir des niveaux très séparés en énergie, ce qui est un atout indéniable pour leur manipulation.

L'étude de dopants uniques s'appuie sur un socle théorique assez solide, soutenu par de nombreux travaux théoriques. Le défi majeur actuel consiste à réaliser les dispositifs permettant de les manipuler, les premières expériences qui vont dans ce sens datent seulement de quelques années. Le premier pas majeur, qui consiste à étudier le passage d'un courant à travers un seul dopant, nécessite déjà trois électrodes de taille réduite : deux électrodes distantes d'environ 20 à 30 nm pour venir contacter et faire passer un courant à travers le dopant, et une électrode qui permet de modifier le potentiel électrostatique au niveau du dopant. Les technologies de fabrication nécessaires pour réaliser une telle structure n'ont été mises au point que récemment. À l'image des expériences effectuées avec des boîtes quantiques, un système à deux dopants offre de nombreuses possibilités inaccessibles aux dispositifs à un seul dopant, comme la manipulation d'électrons uniques.

Dans ce manuscrit, nous présentons les premières mesures de dispositifs constitués de deux dopants en série entre une source et un drain. Les deux dopants sont contrôlés indépendamment par deux grilles, ce qui permet d'ajuster indépendamment leurs niveaux d'énergie. L'architecture que nous avons dessinée permet d'obtenir un couple de dopants avec un bon rendement, ce qui a permis d'étudier deux échantillons de ce type.

Ce travail s'inscrit dans la continuité des recherches effectuées au laboratoire, qui utilisent les procédés de fabrication issus de la micro-électronique pour réaliser des dispositifs électroniques fonctionnant à basse température. La fabrication d'échantillons est assurée en collaboration avec le LETI (Laboratoire d'Électronique des Technologies de l'Information), qui possède le matériel et le savoir-faire nécessaires à la réalisation de dispositifs pour la micro-électronique (qui mériterait amplement d'être qualifiée de « nano-électronique » de nos jours). Ce travail fait suite à deux thèses ; la première, effectuée par Max Hofheinz, a permis de montrer que des transistors issus de la technologie silicium sont capables de réaliser des boîtes quantiques, et d'étudier des impuretés uniques. Au cours de la thèse de Mathieu Pierre, des échantillons ont été dessinés spécialement pour les mesures à basse température. Celui-ci a alors étudié l'effet des procédés technologiques de fabrication sur les caractéristiques des dispositifs. Il a mis en évidence le transport à travers une impureté unique.

## Contenu

Ce manuscrit est organisé en 4 chapitres. Le premier chapitre est destiné à présenter les différentes possibilités de réalisation des boîtes quantiques en silicium, et à les comparer aux dopants. Nous détaillerons la réalisation de nos échantillons, ainsi que leurs caractéristiques principales. Dans le deuxième chapitre nous présenterons l'étude en transport à travers deux dopants. Nous montrerons que nous sommes capables de sélectionner une paire de dopants idéalement placée, grâce au choix de l'architecture du dispositif et au contrôle de son dopage, et ce malgré une approche statistique de placement des dopants. On détaillera les différents mécanismes de transport à travers ces dopants, en nous concentrant plus particulièrement sur le transport élastique entre deux niveaux, qui permet de révéler le spectre d'un dopant.

Ces résultats seront comparés aux résultats théoriques. Le troisième chapitre sera consacré à l'étude de la dynamique de ce système. On analysera le courant induit par le dispositif lorsque les tensions de grille sont variées périodiquement. On comparera ce courant à un modèle nous permettant d'obtenir la valeur des couplages tunnels du problème. Pour finir, nous présenterons des mesures de transport photo-assisté, qui permet de sonder la cohérence du système. Le temps de cohérence et les mécanismes de décohérence seront discutés.





# Chapitre 1

## L'électronique quantique en silicium

### Sommaire

---

<b>1.1 Propriétés électroniques des boîtes quantiques en silicium . . . . .</b>	<b>6</b>
1.1.1 Les îlots de Coulomb . . . . .	6
1.1.2 Quantification des niveaux électroniques . . . . .	7
1.1.3 Réalisations de boîtes quantiques . . . . .	8
1.1.4 Caractéristiques électroniques du silicium . . . . .	12
1.1.5 Niveaux électroniques dans un gaz d'électrons bidimensionnel . . . . .	14
1.1.6 Niveaux électroniques des boîtes quantiques . . . . .	14
<b>1.2 Les dopants du silicium . . . . .</b>	<b>17</b>
1.2.1 Spectre des dopants . . . . .	17
1.2.2 Transport à travers des dopants uniques . . . . .	20
1.2.3 Placement des dopants . . . . .	22
<b>1.3 Notre approche . . . . .</b>	<b>22</b>
1.3.1 Fabrication des échantillons . . . . .	23
1.3.2 Îlots de Coulomb définis par la grille . . . . .	23
1.3.3 Géométrie « grilles face à face » . . . . .	25
1.3.4 Dopage de la structure . . . . .	26
1.3.5 Conclusion . . . . .	28

---

En un demi-siècle le silicium a prouvé ses qualités comme matériau de base pour la microélectronique. Le silicium est particulièrement abondant sur Terre puisqu'il s'agit du second élément chimique le plus abondant dans la croûte terrestre après l'oxygène. Il s'agit d'un matériau qui cristallise relativement bien, et qui peut être obtenu avec une très grande pureté. Ces quelques propriétés ont permis au silicium d'être le substrat bon marché par excellence.

En contraste avec la microélectronique, l'électronique quantique a base de semi-conducteurs a jusqu'à présent utilisé préférentiellement l'arséniure de gallium au lieu du silicium. Ce matériau offre la possibilité de créer un gaz d'électrons bidimensionnel possédant une excellente mobilité, et dont la masse effective des électrons est faible. Il est alors possible d'étudier des phénomènes cohérents en utilisant des structures plus grandes que celles qu'il faudrait fabriquer en technologie silicium. Néanmoins l'arséniure de gallium n'a pas l'avantage, comme le silicium, d'avoir bénéficié d'un large développement technologique. En utilisant une technologie silicium, on est assuré de pouvoir intégrer les dispositifs au sein de circuits électroniques classiques, ce qui est un atout indéniable pour des applications pratiques. De plus l'arséniure de gallium possède des limitations intrinsèques lorsqu'il est question de manipuler des spins de façon cohérente. En effet, les noyaux des atomes d'arsenic et de gallium, contrairement aux noyaux du silicium, ont inévitablement un spin non nul qui crée un champ magnétique non-uniforme, et fluctuant dans le temps. De plus, le couplage spin-orbite, qui participe à la décohérence des spins, est plus grand dans l'arséniure de gallium que dans le silicium.

Les progrès continus des technologies de fabrication en silicium permettent aujourd'hui de faire des structures dont la taille caractéristique correspond à quelques dizaines d'atomes de large. Il s'agit des nanostructures auto-assemblées, telles que les nanocristaux ou les nanofils, ou bien des structures réalisées par lithographie. Dans ce chapitre, nous verrons comment obtenir des boîtes quantiques en utilisant de telles structures. Ces dernières sont parfois qualifiées d'« atomes artificiels » car elles peuvent confiner des électrons sur des niveaux discrets, similaires aux orbitales des atomes, mais il est possible d'utiliser de « vrais » atomes pour confiner des électrons dans le silicium : les dopants. Nous étudierons dans ce chapitre les caractéristiques des dopants uniques, et nous verrons les progrès récents qui ont été faits dans ce domaine.

## 1.1 Propriétés électroniques des boîtes quantiques en silicium

### 1.1.1 Les îlots de Coulomb

L'îlot de Coulomb est la brique de base de l'électronique à électrons uniques, il permet de confiner un petit nombre d'électrons dans une région de l'espace réduite. Il est d'abord caractérisé par son énergie de charge  $E_c$ . Dans la configuration de confinement maximal,  $E_c$  correspond à l'énergie qu'il faut donner au système pour chasser un électron de l'îlot (quelques milliélectron-volts pour les dispositifs les plus standards). Pour confiner efficacement un électron, on est généralement amené à abaisser la température du système de sorte que l'énergie d'excitation thermique ne soit pas en mesure de chasser un électron de l'îlot :  $k_B T \ll E_c$ . L'énergie de charge correspond à la différence d'énergie électrostatique  $W$  de l'îlot lorsque le nombre d'électrons qu'il contient varie d'une unité. L'énergie électrostatique est obtenue en

sommant sur l'espace l'énergie du champ électrique  $E$  créé par l'îlot :

$$W = \int d^3\tau \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varepsilon_r E^2$$

Lorsqu'une électrode métallique est placée proche de l'îlot, les lignes du champ électrique partant de l'îlot sont dirigées préférentiellement vers cette électrode, formant un condensateur de capacité  $C_i$ . L'énergie du champ électrique entre l'électrode et l'îlot se ramène alors à l'énergie de charge de cette capacité :  $E = \frac{1}{2} C_i V^2$ , où  $V$  est la différence de potentiel entre l'îlot et l'électrode. Les lignes de champ qui s'échappent à l'infini participent à la capacité propre de l'îlot (*self capacitance* en anglais). On note  $C_\Sigma$  la somme de toutes ces capacités. L'énergie de charge de l'îlot selon ce modèle est  $E_c = e^2/2C_\Sigma$ . Les calculs approfondis de l'électrostatique des îlots de Coulomb ont été effectués dans les références [1, 2].

En transport électronique, on cherche souvent à faire varier le nombre d'électrons dans l'îlot de Coulomb. Des réservoirs à électrons, appelés contacts, sont alors couplés à l'îlot par une barrière tunnel. Le dispositif électronique de base est le transistor à un électron, composé d'une source et d'un drain connectés à l'îlot de Coulomb, et d'une grille qui contrôle le potentiel électrostatique de l'îlot. En mesurant le courant traversant l'îlot de Coulomb en fonction de la tension source-drain  $V_d$  et de la tension de grille  $V_g$ , on obtient les fameux diamants de Coulomb qui nous renseignent sur l'occupation de l'îlot et ses éventuels niveaux d'énergie discrets [3].

L'échange d'un électron entre une électrode de contact et l'îlot de Coulomb est caractérisé par un taux tunnel, décrivant l'évolution de la probabilité  $p(t)$  que l'électron soit passé par effet tunnel à travers la barrière de potentiel à l'instant  $t$  :  $p(t) = p(0) (1 - \exp(-\Gamma t))$ . Le taux tunnel dépend généralement des paramètres du système (l'état de charge de l'îlot, les tensions de grille, la tension entre la source et le drain, la température, etc.). Les couplages tunnel de l'îlot définissent donc la durée de vie  $\Delta t$  d'une charge de l'îlot, qui, d'après le principe d'incertitude de Heisenberg, est liée à la largeur spectrale  $\Delta E$  de ce niveau :  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ . Cette relation assez peu précise est très générale, nous étudierons le problème de façon plus rigoureuse au chapitre 4 dans le cas particulier du système que l'on étudie.

### 1.1.2 Quantification des niveaux électroniques

La seconde grandeur importante des îlots de Coulomb est l'énergie moyenne entre deux niveaux du spectre à une particule  $\Delta_1$ . Si on ajoute un électron dans le système,  $\Delta_1$  représente l'écart moyen entre les niveaux accessibles à cet électron supplémentaire. Connaissant  $\Delta_1$ , on est en mesure de déterminer si les électrons dans l'îlot vont occuper des niveaux bien définis, ce qui est le cas lorsque  $\Delta_1 \gg \hbar\Gamma, k_B T$  (où  $\Gamma$  caractérise les barrières tunnel de l'îlot) ; on parlera alors de boîte quantique. Dans le cas contraire, la séparation entre les niveaux dans l'îlot ne pourra pas être résolue, on parlera d'un îlot métallique.

Lorsque  $\Delta_1$  est suffisamment élevée, on est en mesure d'étudier le spectre discret de l'îlot par transport électronique. Citons par exemple le travail de Tarucha et collègues [4] : ils ont étudié le remplissage des premiers niveaux d'une boîte quantique (une hétérostructure en GaAs/AlGaAs) en mesurant la séparation entre les pics de Coulomb et l'effet du champ magnétique. Ils ont montré que la structure électronique de la boîte quantique est retrouvé en

la modélisant par un puits quantique harmonique bidimensionnel. La boîte quantique qu'ils ont réalisé présente une séparation entre niveau d'environ 3 meV.

Pour manipuler les états d'une boîte quantique, il est essentiel d'avoir des niveaux bien séparés. Par exemple l'écart entre deux niveaux  $\delta_1$  est un facteur qui limite la vitesse de manipulation des états quantiques. On peut l'expliquer de la façon suivante : Lorsque le système est irradié avec un signal de fréquence  $\delta_1/h$ , il se produit bien souvent une transition entre les deux états. Pour éviter ce type de transition involontaire, on est donc contraint de travailler à des fréquences plus faibles.

Les niveaux électroniques d'une boîte quantique peuvent être calculés de façon approchée en utilisant la théorie de la masse effective. On ne s'intéresse qu'à la composante de la fonction d'onde des électrons qui varie lentement par rapport à la périodicité du cristal (l'enveloppe de la fonction d'onde). Pour se débarrasser des détails microscopiques du cristal, on utilise la masse effective des électrons dans le matériau. L'électron est décrit comme une particule libre soumis à un potentiel extérieur, avec une masse renormalisée. Le potentiel vu par l'électron sera une combinaison du potentiel électrostatique et de l'énergie des bandes des matériaux composant la structure. Les masses effectives des trois semiconducteurs évoqués dans ce manuscrit ont été rassemblées dans le tableau 1.1. La masse effective du silicium et du germanium est anisotrope, c'est pourquoi l'on donne deux valeurs. Le calcul des niveaux électroniques d'un dopant en utilisant cette méthode sera effectué dans la section 1.2.1.

Silicium	$m_l^* = 0,916 / m_t^* = 0,190$
Germanium	$m_l^* = 1,64 / m_t^* = 0,082$
GaAs	$m^* = 0,067$

TABLE 1.1 – Masses effectives des électrons dans le bas de la bande de conduction pour le silicium, le germanium et l'arséniure de gallium.

On voit que les masses effectives du silicium et du germanium sont un ordre de grandeur plus élevées que celle de l'arséniure de gallium. En conséquence, il faudra créer une boîte quantique plus petite en silicium ou en germanium pour avoir le même spectre qu'une boîte quantique en arséniure de gallium.

### 1.1.3 Réalisations de boîtes quantiques

Pour réaliser un îlot de Coulomb il faut disposer d'une nanostructure. Il peut s'agir d'un nanocristal, d'un nanofil ou d'un puits quantique à deux dimensions. Il est souvent nécessaire d'y adjoindre des grilles pour faire varier le potentiel électrostatique, ou pour créer un puits de potentiel pour les électrons. Nous allons voir les différentes méthodes qui ont été utilisées jusqu'à présent pour réaliser des îlots de Coulomb en silicium, et nous comparerons leurs caractéristiques.

#### 1.1.3.1 Les nanocristaux

Les nanocristaux présentent la solution la plus directe pour réaliser un îlot de Coulomb. Ces nanostructures sont créées naturellement grâce à l'épitaxie par jet moléculaire, en contrôlant précisément les paramètres de la croissance. On obtient alors un substrat sur lequel les

boîtes quantiques sont réparties pseudo-aléatoirement. Il est même possible, grâce à une étape de lithographie préliminaire, de faire croître les nanocristaux à des positions prédéterminées. Ces boîtes quantiques sont capables intrinsèquement de confiner des électrons (ou des trous), mais la difficulté pour effectuer des mesures électriques consiste à venir les contacter. Généralement on utilise la lithographie électronique pour placer des électrodes au contact de la boîte quantique. Cette étape requiert une grande précision dans l'alignement du faisceau d'électron avec les nanocristaux, et bien souvent les couplages tunnel avec la boîte sont assez difficiles à contrôler.

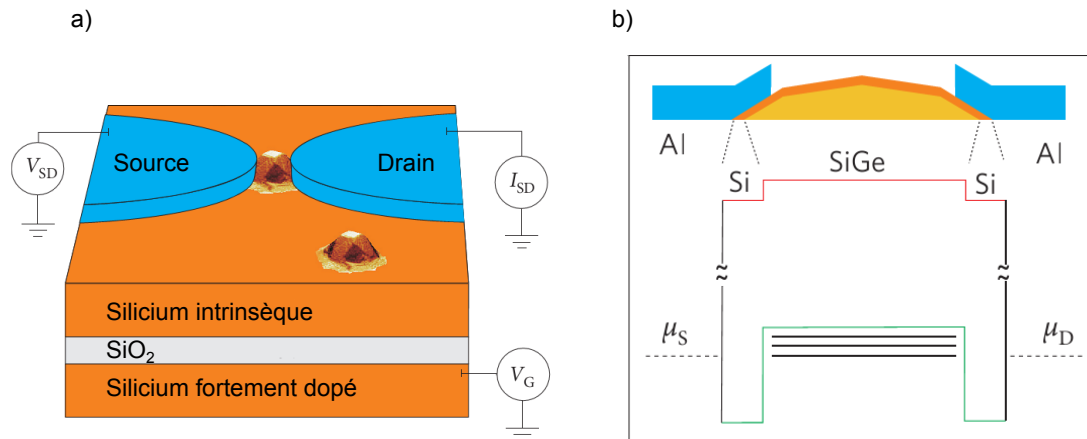


FIGURE 1.1 – a) Représentation schématique du contact d'un nanocristal de silicium-germanium par des électrodes en aluminium. b) La structure de bande du nanocristal permet de confiner des trous. Une faible couche de silicium est utilisée pour former une barrière tunnel entre les électrodes et le nanocristal. Figures extraites de [5].

L'équipe de De Franceschi à Grenoble travaille avec des nanocristaux de silicium-germanium qui croissent sur un substrat de silicium (figure 1.1). Ces nanocristaux mesurent environ 20 nm de hauteur et 80 nm de diamètre. Ils sont recouverts de 2 nm de silicium qui permettent de confiner des trous dans les nanocristaux, grâce au décalage des bandes de valence du silicium et du germanium (figure 1.1). Une fois contactés avec des électrodes en aluminium, les nanocristaux se comportent comme des transistors à un électron dont l'énergie de charge peut aller jusqu'à 20 meV [5].

### 1.1.3.2 Les nanofils

Il est aussi possible d'utiliser des nanofils de silicium, ou de silicium-germanium, pour réaliser des boîtes quantiques. On sait aujourd'hui faire croître des nanofils de façon contrôlée, en utilisant un procédé « vapeur-liquide-solide ». On obtient des nanofils dont le diamètre peut aller de 3 nm à une centaine de nanomètres. Les nanofils réalisés sont ensuite couchés sur un substrat et contactés par des électrodes métalliques.

Pour réaliser les barrières tunnel qui isolent la boîte quantique des électrodes, plusieurs méthodes ont été utilisées. Une première solution consiste à moduler le dopage lors de la croissance du fil, pour créer une alternance de régions fortement et faiblement dopées N [6]. Les régions faiblement dopées, déplétées, forment des barrières tunnel. Cette méthode présente

l'avantage de pouvoir contrôler très précisément la taille des boîtes quantiques réalisées. En contrepartie, le système obtenu possède peu de paramètres de contrôle. Souvent, le nanofil est contacté par une source, un drain et couplé électrostatiquement à une grille arrière globale. Il n'est pas possible de faire varier les barrières tunnel.

Le groupe de Lieber à Harvard a fabriqué des nanofils de germanium avec une coquille de silicium, et montré qu'il était possible de confiner des trous dans une telle structure [7, 8] (suivant le même principe que pour les nanocristaux de la figure 1.1). Par la suite, le groupe de Marcus à Harvard a utilisé ces nanofils pour réaliser des architectures plus complexes, en créant deux boîtes quantiques au sein d'un nanofil, et en le couplant à un détecteur de charge. Ils ont utilisé pour cela des grilles pour former les barrières tunnel [9]. Les barrières tunnel obtenues sont contrôlées par la tension de grille : à tension positive les trous sont chassés du nanofil, la zone de déplétion agit comme une barrière de potentiel. Pour une tension négative, la barrière tunnel est fortement réduite.

Il existe une dernière méthode couramment utilisée pour réaliser des barrières tunnel. On utilise l'interface entre un métal et le silicium qui forme alors une barrière Schottky. Plusieurs réalisations de ce type ont été effectuées dans différents groupes [10, 11, 12]. En élevant la température, il est possible de faire diffuser le métal dans le silicium, le résultat de ce mélange est un alliage métallique qui forme lui aussi une barrière Schottky avec le silicium (figure 1.2). On peut ainsi contrôler la position de l'interface, et placer les deux interfaces séparant la boîte quantique très proche l'une de l'autre. L'équipe de Kouwenhoven à Delft a ainsi obtenu des boîtes quantiques de très petites dimensions, présentant des énergies de charge d'environ 30 meV [12].

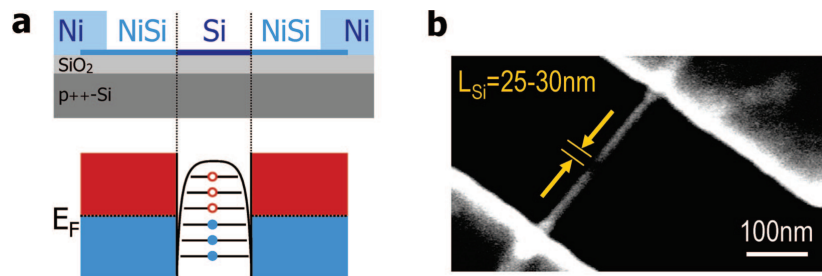


FIGURE 1.2 – Réalisation d'un îlot de Coulomb à partir d'un nanofil, en utilisant des barrières Schottky. a) Représentation schématique du dispositif et diagramme de bande du système. Le silicium intrinsèque, qui est capable d'accumuler des trous, est séparé des électrodes de contact en NiSi par des barrières Schottky. Le substrat agit comme une grille, qui permet de changer le potentiel dans l'îlot. b) Image MEB du dispositif, le NiSi apparaît plus clair que le silicium. Figure extraire de [13].

Pour finir, il faut aussi noter le travail de Zhong et collègues, qui ont mesuré des nanofils de silicium d'un diamètre inférieur à 10 nm [14]. Ils montrent qu'en contactant ces fils, ils obtiennent des boîtes quantiques avec une énergie de charge de plusieurs dizaines de millielectron-volts. Néanmoins dans ce type de dispositif l'origine des barrières tunnel est incertaine.

### 1.1.3.3 Les gaz d'électrons bidimensionnels

La meilleure façon de créer une ou plusieurs boîtes quantiques et d'avoir un contrôle complet de leurs couplages tunnel est de façonner les boîtes quantiques à partir d'un gaz d'électrons bidimensionnel à haute mobilité. Cette technique a déjà fait ses preuves en arséniure de gallium, la difficulté en silicium consiste à obtenir un gaz bidimensionnel peu désordonné.

Pour réaliser un gaz bidimensionnel en silicium, on peut utiliser une structure MOS (métal oxyde semiconducteur) pour confiner les électrons à l'interface avec l'oxyde. Il faut alors utiliser une grille pour créer le gaz d'électrons. La première réalisation de ce type date de 1995 [15]. Plusieurs groupes utilisent une grille supérieure globale pour créer un gaz d'électrons, et placent des grilles locales entre cette grille et l'interface pour créer la boîte quantique [16, 17]. La grille supérieure peut être remplacée par une grille locale définissant un canal d'électrons à l'interface, qui peut être interrompu pour créer une boîte quantique. Cette méthode est utilisée à *The University of New South Wales* en Australie par les groupes de Dzurak et Morello pour créer une boîte quantique [18], puis deux en série [19]. Ils ont utilisé cette structure pour mesurer le temps de relaxation du spin d'un électron autour d'un dopant [20].

Les mobilités des gaz bidimensionnels localisés à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> peuvent atteindre jusqu'à 40 000 cm<sup>2</sup>/Vs [21]. Les inévitables défauts à l'interface avec le SiO<sub>2</sub> empêchent l'obtention de meilleurs mobilités. En utilisant des hétérostructures de Si/Ge, il est possible d'avoir une interface avec le silicium sans défauts, qui représente une barrière de potentiel pour les électrons. La réalisation de ces hétérostructures est délicate à cause de la différence des paramètres de maille entre le silicium et le germanium, qui peut provoquer des dislocations. Il est nécessaire d'utiliser des empilements de plusieurs couches, dont certaines sont réalisées en faisant varier le rapport de silicium et de germanium de façon continue. De cette façon, Lu et collègues ont ainsi obtenu des gaz bidimensionnels présentant une mobilité de 1 600 000 cm<sup>2</sup>/Vs [22]. La réalisation de boîtes quantiques dans ces hétérostructures a été effectuée dans le groupe de Erikson [23] et par une équipe des laboratoires HRL en Californie [24], qui s'en est ensuite servie pour manipuler le spin d'électrons uniques[25].

### 1.1.3.4 Gravure d'un fil de silicium

En s'inspirant de la fabrication de transistors sur substrat SOI (*silicon on insulator*), on peut graver un fil à partir d'une fine couche de silicium monocristaline. Le fil de silicium obtenu est comparable aux nanofils dont nous avons discuté précédemment. Cependant, le fil gravé ne possède généralement pas une section ronde comme les nanofils obtenus par croissance, mais carrée, voire trapézoïdale [26]. On peut ensuite utiliser les méthodes décrites précédemment pour réaliser des barrières tunnel : modulation de dopage, grilles, barrières Schottky. Le contrôle précis de la position du fil obtenu par gravure est un avantage indéniable par rapport aux nanostructures réalisées par croissance.

Nous avons choisi cette approche pour réaliser nos échantillons, nous y reviendrons plus en détail dans la suite. Cette méthode a aussi été utilisée par une équipe de NTT au Japon [27]. Ils utilisent alors une grille globale pour réaliser le gaz d'électrons, et des grilles locales pour former les barrières tunnel.

### 1.1.3.5 Divers

Pour finir, notons l'approche originale développée par l'équipe de Simmons de *The University of New South Wales*, qui est en mesure de créer des nanocristaux bidimensionnel de dopants phosphore dans un cristal de silicium. Les atomes de phosphore sont placés localement à l'aide d'un STM, formant ainsi des surfaces monoatomiques. Le dispositif est finalement encapsulé dans du silicium par épitaxie. Les barrières de potentiel sont réalisées par le silicium hôte qui sépare les différents plans d'atomes de phosphore. Ils ont ainsi réalisé des boîtes quantiques de taille nanométrique [28], et ont réussi à réduire la taille des nanocristaux jusqu'à obtenir un dopant unique [29].

### 1.1.3.6 Compatibilité CMOS

On peut imaginer intégrer des îlots de Coulomb au milieu de transistors plus conventionnels. C'est ce qui a été fait Prager et collègues, en couplant des transistors N et P, et des transistors à un électron en aluminium [30]. Les réalisations actuelles restent néanmoins assez modestes, et relèvent plutôt de la démonstration de principe. Pour pouvoir s'appuyer sur les technologies existantes afin d'intégrer des boîtes quantiques dans des structures très complexes, il faut que la fabrication de ces dernières soit compatible avec les procédés de fabrication des puces de la microélectronique. Pour être « compatible CMOS », les boîtes quantiques doivent pouvoir supporter toutes les étapes de fabrication d'une puce électronique, et plus particulièrement, les recuits à haute température qui sont réalisés.

Nordberg et collègues [16] réalisent ainsi des îlots de Coulomb dans une salle blanche parfaitement compatible CMOS. Cependant ils utilisent des grilles en aluminium qui sont pourtant peu standard dans les puces électroniques. Il existe des exemples d'îlots de Coulomb et de boîtes quantiques qui ont été fabriqués dans une salle blanche semi-industrielle de production de circuit CMOS. Ainsi, Shin et collègues ont fabriqué des transistors à un électron en silicium présentant des oscillations de Coulomb à température ambiante [31]. C'est aussi le cas des dispositifs présentés dans ce manuscrit, qui sont directement inspirés des transistors de la microélectronique (voir section 1.3).

## 1.1.4 Caractéristiques électroniques du silicium

Le silicium cristallise sous la forme d'une structure de type « diamant » avec un paramètre de maille  $a = 5.43 \text{ \AA}$ . La symétrie cubique de ce cristal implique que chaque vecteur  $\vec{k}$  de l'espace réciproque possède 6 directions équivalentes. Le maximum de la bande de valence du silicium se trouve en  $\vec{k} = 0$ , mais le minimum de sa bande de conduction se trouve entre les points  $\Gamma$  et  $X$  de la zone de Brillouin, pour  $\|\vec{k}_0\| \approx 0,85(2\pi/a)$  (figure 1.3). Le silicium possède donc un *gap* indirect. Ce minimum dans la bande de conduction est atteint en six points équivalents de la zone de Brillouin, on parle généralement des six vallées de la bande de conduction du silicium.

Pour chaque vallée (dont le vecteur d'onde sera noté  $\vec{k}_0$ ) on peut approximer la bande de conduction par une relation de dispersion parabolique autour de  $\vec{k}_0$ , en utilisant les masses effectives transversales  $m_t^*$  et longitudinales  $m_l^*$



$$E(\vec{k}_0 + \vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{k_l^2}{m_l^*} + \frac{k_{t1}^2}{m_t^*} + \frac{k_{t2}^2}{m_t^*} \right], \quad (1.1)$$

$k_l$  est la composante de  $\vec{k}$  colinéaire à  $\vec{k}_0$ , et  $k_{t1}$  et  $k_{t2}$  sont les deux autres composantes. La relation 1.1 décrit une bande de conduction dont les surfaces iso-énergétiques sont des ellipsoïdes (figure 1.4).

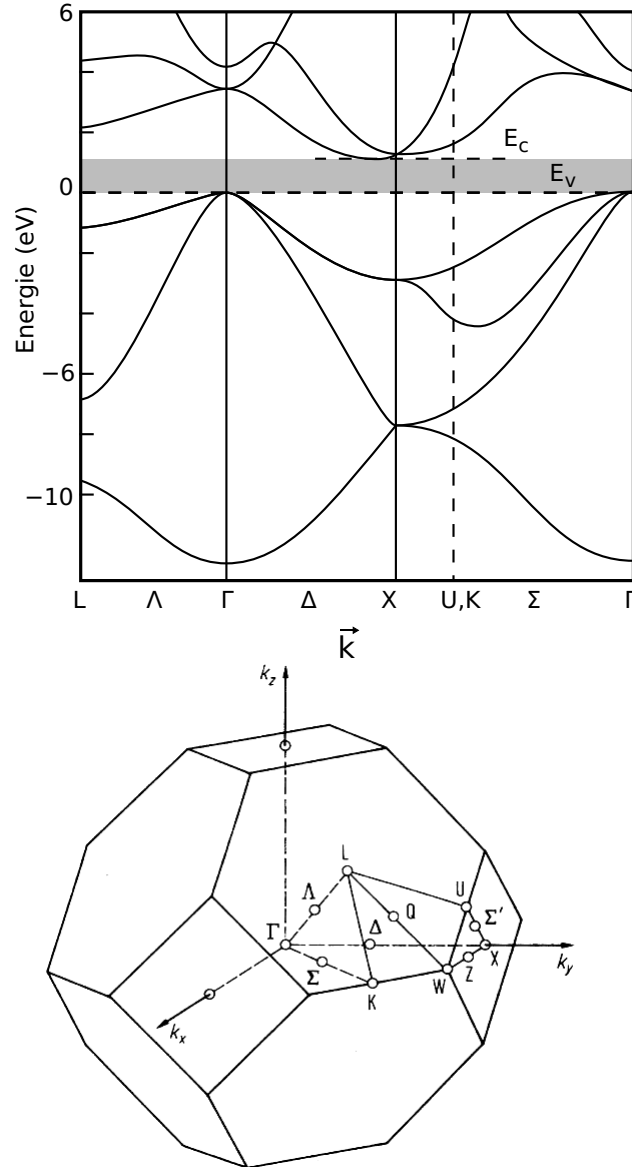


FIGURE 1.3 – (haut) Structure de bande du silicium, adaptée de [32]. La bande interdite est indiquée en gris. (bas) Première zone de Brillouin de l'espace réciproque d'un cristal de silicium. La notation des points utilisés pour décrire la structure de bande du silicium y est indiquée.

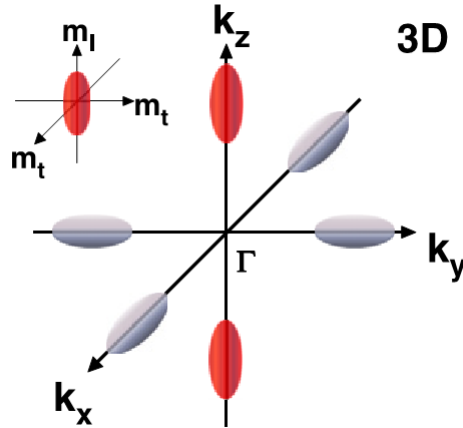


FIGURE 1.4 – Surfaces iso-énergétiques du bas de la bande de conduction du silicium massif, représentées dans l'espace des  $\vec{k}$ . Extrait de [33].

### 1.1.5 Niveaux électroniques dans un gaz d'électrons bidimensionnel

Lorsque l'on confine des électrons en deux dimensions, la structure de bande du silicium massif est modifiée pour le gaz bidimensionnel ainsi créé. Au niveau du gaz bidimensionnel, la symétrie 6 du cristal est brisée, et par conséquent les six vallées du silicium massif ne sont plus équivalentes. On observe une levée partielle de la dégénérescence des six vallées en quatre vallées  $\Delta$  et deux vallées  $\Gamma$  (figure 1.5). Les vallées  $\Delta$  possèdent une énergie supérieure de quelques dizaines de milliélectron-volts aux deux vallées  $\Gamma$  [34].

La dégénérescence des deux vallées  $\Gamma$  est elle aussi levée d'une énergie  $\Delta E_{VO}$  par la variation abrupte du potentiel au niveau de l'interface. Cette levée de dégénérescence est très sensible aux détails microscopiques de l'interface, ce qui la rend difficile à évaluer. On constate effectivement que la valeur de cette levée de dégénérescence est très dépendante de l'échantillon : elle dépend du plan cristallographique de l'interface, de sa rugosité et de la présence éventuelle de défauts. La différence d'énergie  $\Delta E_{VO}$  peut être mesurée grâce à l'oscillation de Shubnikov–de Haas à forts champs magnétiques [35]. Les mesures expérimentales rendent compte généralement d'une énergie de séparation comprise entre 0,3 et 1,2 meV [35]. Une exception est néanmoins à noter avec le travail de Ouisse et collègues [36], et plus récemment Takashina et collègues [37, 38], qui mesurent une différence d'énergie  $\Delta E_{VO}$  pouvant dépasser 20 meV. Bien qu'il y ait quelques travaux théoriques qui proposent une explication [39], l'origine de cette séparation en énergie anormalement grande est encore mal comprise.

### 1.1.6 Niveaux électroniques des boîtes quantiques

On s'intéresse ici aux boîtes quantiques en silicium qui sont formées à partir d'un gaz bidimensionnel d'électrons. C'est souvent le cas pour une approche *top-down* car une interface entre le silicium et un isolant est utilisée pour localiser les électrons dans un plan (on notera  $\vec{z}$  la direction perpendiculaire à ce plan). On peut calculer la valeur approchée de  $\Delta_1$  en connaissant la surface  $S$  du gaz bidimensionnel, lorsqu'un seul mode transversal est impliqué [34]

$$\Delta_1 = \frac{2\pi\hbar^2}{d_{\text{spin}}d_{\text{vallée}}m^*S}, \quad (1.2)$$

où les valeurs des dégénérescences sont  $d_{\text{spin}} = 2$  et  $d_{\text{vallée}} = 2$  (on suppose que la levée de dégénérescence des vallées  $\Gamma$  est faible).

Par exemple, si l'on veut réaliser une boîte quantique en silicium qui possède des niveaux séparés de 1 meV (un bon ordre de grandeur de la séparation nécessaire pour manipuler ces niveaux), on doit réaliser une boîte de surface  $S = (20 \text{ nm})^2$ , ce qui représente encore un challenge pour la fabrication. En GaAs, la faible masse effective des électrons permet d'avoir la même séparation entre niveaux pour des boîtes quantiques plus grosses ; toujours pour avoir  $\Delta_1 = 1 \text{ meV}$ , on obtient  $S = (60 \text{ nm})^2$ .

Le spectre exact d'une boîte quantique dépend fortement de sa géométrie et de la structure électronique du matériau hôte. Par exemple, si le potentiel de la boîte quantique possède une symétrie sphérique, on retrouvera un spectre organisé comme la structure en couches des atomes. Dans un gaz d'électrons bidimensionnel, on peut avoir une symétrie cylindrique qui donnera lieu à une structure en couches similaire, mais différente de celle des atomes [4].

La bande de conduction en vallées du matériau hôte a un effet direct sur le spectre de la boîte quantique. Il s'agit d'un degré de liberté supplémentaire pour les électrons, au même titre que le spin. La séparation  $\Delta E_{VO}$  entre les premières vallées se retrouvera dans le spectre de la boîte quantique. L'énergie  $\Delta E_{VO}$  est mesurée la plupart du temps dans des gaz d'électrons bidimensionnels, voire dans des points contacts quantiques [40]. La mesure directe de cette séparation dans une boîte quantique en silicium est plus compliquée car elle nécessite une boîte quantique petite et peu désordonnée, mais a néanmoins été effectuée par Lim et collègues [33]. Le spectre de la boîte ainsi créée est étudié par magnéto-transport. Nous allons détailler cette expérience.

Les deux minima  $VO_1$  et  $VO_2$  de la bande de conduction sont séparés de  $\Delta E_{VO}$ . À champ magnétique nul, les deux niveaux de plus basse énergie de la boîte quantique sont les états  $|\downarrow\rangle$  et  $|\uparrow\rangle$  de  $VO_1$ . L'effet du champ magnétique est de lever la dégénérescence de spin des deux niveaux par l'énergie Zeeman  $\Delta E_z = g\mu_B B$ , comme indiqué sur la figure 1.6. En augmentant le champ magnétique, l'état de spin  $|\downarrow\rangle$  de  $VO_2$  va croiser l'état  $|\uparrow\rangle$  de  $VO_1$  et devenir le second état de plus basse énergie. Les deux états peuvent être distingués par leur comportement en champ magnétique : un état de spin  $\uparrow$  voit son énergie augmenter avec le champ magnétique, tandis que l'énergie d'un état de spin  $\downarrow$  diminue avec  $B$ . L'évolution de la position en énergie des pics de Coulomb pour les deux premières résonances de la boîte quantique en fonction de  $B$  est représentée sur la figure 1.6. La cassure visible dans l'évolution du second niveau à  $B = 0,86 \text{ T}$  correspond au croisement de l'état  $\uparrow$  de  $VO_1$  avec l'état  $\downarrow$  de  $VO_2$ . La séparation  $\Delta E_{VO}$  est égale à l'énergie Zeeman d'un électron soumis à ce champ magnétique, soit environ 0,10 meV.

La dégénérescence de vallée est souvent considérée comme un obstacle à la manipulation des niveaux d'une boîte quantique. Il existe cependant des propositions pour utiliser ce degré de liberté supplémentaire pour stocker une information quantique. Le qubit obtenu serait alors moins sensible aux fluctuations des paramètres extérieurs par comparaison aux qubits de spin ou de charge plus classiques [41]. Le contrôle de l'écart entre les différents états de vallées est requis pour pouvoir manipuler ces états. Dans les boîtes quantiques, cela représente

encore un défi, mais le contrôle de  $\Delta E_{VO}$  avec une tension de grille a été obtenu dans un gaz bidimensionnel [37].

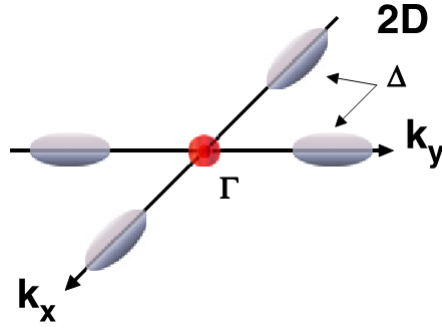


FIGURE 1.5 – Minima locaux de la bande de conduction du silicium pour un gaz d'électrons bidimensionnel. Les deux vallées  $\Gamma$  sont plus basses en énergie que les quatre vallées  $\Delta$ . Extrait de [33]

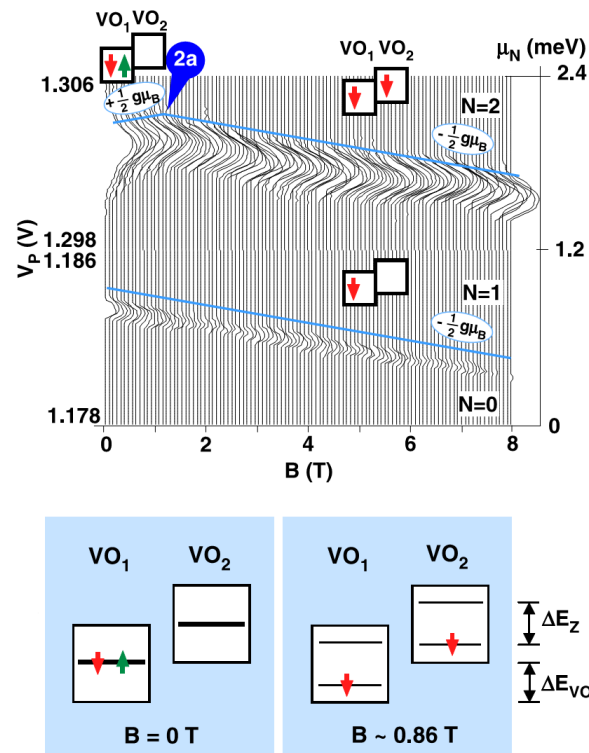


FIGURE 1.6 – Mesure de la séparation en énergie des vallées  $\Gamma$  du gaz d'électrons bidimensionnel d'une boîte quantique en silicium. (haut) Évolution des deux premières résonances de Coulomb en champ magnétique. (bas) Représentation schématique du remplissage des niveaux à 0 T, et lorsque  $\Delta E_z = \Delta E_{VO}$ . Extrait de [33]

## 1.2 Les dopants du silicium

Le dopage est un élément clé de la microélectronique, il permet d'ajuster la position du niveau de Fermi dans la structure de bande du silicium. Avec la miniaturisation des transistors, on est arrivé à des dimensions telles que le nombre moyen de dopants dans le cœur des transistors est seulement de quelques dizaines d'unités. La variation du nombre de dopants est grande, ce qui a un effet néfaste sur la variabilité des caractéristiques des transistors. Mathieu Pierre a montré au cours de sa thèse que la présence d'un unique dopant dans le canal d'un transistor peut gravement diminuer ses performances [42]. Pour les applications en microélectronique, on préfère maintenant éviter de doper le canal des transistors réalisés sur substrat SOI afin d'éviter cette source de variabilité.

Par opposition à la microélectronique, les dopants offrent à l'électronique quantique un formidable moyen de localiser des électrons. Il suffit de placer un unique dopant dans du silicium pour créer un potentiel attractif pour les électrons. Ce potentiel très abrupt et très local ne permet de localiser qu'un ou deux électrons. Nous allons décrire les états créés par un donneur dans le silicium dans la suite de ce manuscrit.

### 1.2.1 Spectre des dopants

#### 1.2.1.1 Dopants dans le silicium massif

La description théorique des états électroniques créés par la substitution d'un atome de silicium par un donneur a été effectuée pour la première fois par Kohn et Luttinger [43] en 1955. L'idée principale consiste à faire l'analogie entre un donneur dans le silicium et l'atome d'hydrogène dans le vide. Le donneur est vu comme une charge positive dans la matrice de silicium, qui est soit occupée par un électron (état  $D^0$ ), soit ionisé ( $D^+$ ). Les états électroniques discrets créés par ce donneur sont calculés en considérant l'hamiltonien d'un électron dans une matrice de silicium, sentant une charge  $+|e|$  supplémentaire due au donneur

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\text{Si}}\hat{r}} + V(\hat{r}), \quad (1.3)$$

où  $V$  est le potentiel périodique du cristal de silicium vu par l'électron,  $m_e$  la masse de l'électron dans le vide, et  $\epsilon_{\text{Si}}$  la constante diélectrique relative du silicium qui vaut 11,9 (et 11,4 à basse température [44]). Avec cette constante diélectrique assez élevée, le silicium écrante assez bien le potentiel créé par le donneur. On s'attend donc à avoir des fonctions d'onde électroniques qui s'étendent sur plusieurs mailles du cristal. Kohn et Luttinger vérifient que l'on peut utiliser l'approximation de masse effective pour décrire les états électroniques des donneurs, qui s'expriment par la modulation des fonctions de Bloch  $\phi_j$  (où  $j = x, -x, y, \dots -z$ ) des électrons du bas de la bande de conduction du silicium par une fonction enveloppe  $F_j$ .

$$\psi_j(\vec{r}) = F_j(\vec{r})\phi_j(\vec{r}) = F_j(\vec{r})u_j(\vec{r})e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}},$$

avec  $u_j$  une fonction qui possède la même périodicité que le cristal. Les fonctions enveloppe vérifient l'équation de Schrödinger, où la masse de l'électron est remplacée par ses masses effectives. Par exemple  $F_z$  vérifie

$$\left[ \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m_t^*} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_l^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\text{Si}}\hat{r}} - E \right] F_z = 0. \quad (1.4)$$

$E$  représente la différence d'énergie entre le bas de la bande de conduction et les états électroniques du donneur. Pour simplifier les calculs, on peut prendre une masse effective isotrope  $m^* = \sqrt[3]{m_t^* m_l^*} \approx 0,32 m_e$ , et on retrouve l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène.

L'état  $1s$  de plus basse énergie, est caractérisé par son énergie  $E$ , et son rayon de Bohr  $a_B^*$  :

$$E = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon_0^2 \epsilon_{\text{Si}}^2} = \frac{m^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_{\text{Si}}^2} E^{(\text{H}_2)} \approx 33 \text{ meV}, \quad (1.5)$$

$$a_B^* = \frac{\hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_{\text{Si}}}{\pi m^* e^2} = \epsilon_{\text{Si}} \frac{m_e}{m^*} a_B \approx 1,8 \text{ nm}. \quad (1.6)$$

Dans le cas général décrit par l'équation 1.4, on trouve six solutions  $\psi_j$  pour chacune des vallées du silicium. La solution approchée pour  $F_z$ , par exemple, est la suivante :

$$F_z(\vec{r}) = (\pi a^2 b)^{-1/2} \exp[-(\rho^2/a^2 + z^2/b^2)^{1/2}], \quad (1.7)$$

où  $a$  et  $b$  peuvent être approchées respectivement par  $\frac{\hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_{\text{Si}}}{\pi m_t^* e^2}$  et  $\frac{\hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_{\text{Si}}}{\pi m_l^* e^2}$  [45].

Ces six fonctions  $\psi_j$  sont équivalentes par rotation, et dégénérées en énergie. L'énergie de ces niveaux est indépendante de l'espèce chimique du donneur. Faulkner [44] a calculé ces énergies en utilisant une méthode plus précise que Kohn et Luttinger, et trouve  $E = -31,27 \text{ meV}$ .

Pour aller au delà de l'approximation de la masse effective, les états du système sont des combinaisons linéaires des  $\psi_j$  qui doivent satisfaire la symétrie tétraédrique  $T_d$  du donneur dans le cristal. Des arguments de symétrie imposent à ces fonctions d'appartenir aux sous-groupes  $A_1$  (non-dégénéré),  $E$  (dégénéré 2 fois) et  $T_2$  (dégénéré 3 fois). Ces solutions sont de la forme

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_j \alpha_j \psi_j(\vec{r}) \quad (1.8)$$

En pratique, ces trois niveaux n'ont pas la même énergie. La fonction d'onde appartenant à  $A_1$  a la particularité d'être la seule à posséder un poids non nul en  $r = 0$ . Ses coefficients valent  $\alpha_j = 1/\sqrt{6}$ . La partie de la fonction d'onde proche du donneur est mal décrite par le modèle précédent car elle ne satisfait pas l'hypothèse initiale qui suppose que l'électron est loin du donneur. C'est pourquoi l'énergie associée à cette fonction d'onde s'éloigne de la valeur donnée par la théorie de la masse effective (voir figure 1.7), et devient même dépendante de l'espèce chimique. Elle possède une énergie plus basse que les autres niveaux, et représente donc l'état fondamental du donneur. Les autres états, de symétrie  $E$  et  $T_2$ , ont des énergies plus proches de la valeur obtenue par l'approximation de masse effective.

Les énergies des premiers niveaux des dopants usuels ont été rassemblées dans le tableau 1.2. La différence d'énergie entre les deux premiers états orbitaux sont respectivement

11,7 meV pour le phosphore et 21,09 meV pour l'arsenic. Ces écarts entre les deux premiers niveaux des dopants sont deux ordres de grandeurs plus élevé que celui de la boîte quantique présentée dans la section 1.1.6. La dégénérescence de vallée du silicium est responsable de la valeur de cette dernière. Les dopants, quant à eux, sont capables de lever cette dégénérescence grâce au puits de potentiel de taille atomique créée par le noyau du donneur.

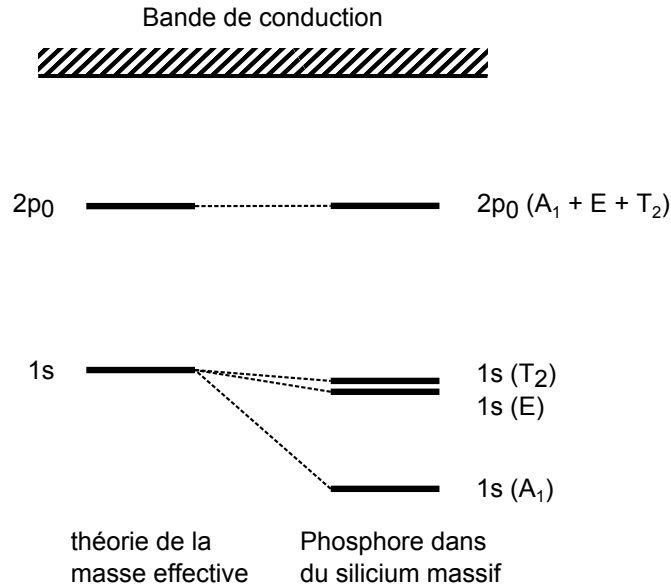


FIGURE 1.7 – Comparaison des premiers niveaux d'un dopant phosphore avec les niveaux donnés par la théorie de la masse effective.

Niveau	P	As	théorie de la masse effective
$1s(A_1)$	45,59	53,76	31,27
$1s(T_2)$	33,89	32,67	31,27
$1s(E)$	32,58	31,26	31,27
$2p_0$	11,48	11,50	11,51
$2s$		9,11	8,83
$2p_{\pm}$	6,40	6,40	6,40
$3p_0$	5,47	5,49	5,48

TABLE 1.2 – Comparaison des énergies des premiers niveaux des dopants phosphore et arsenic dans le silicium (en meV), et celles obtenues par le modèle de masse effective. Les valeurs sont issues de la référence [46], et de celles qui y sont citées. La valeur manquante n'a pas pu être mesurée.

### 1.2.1.2 Dans une nanostructure

La résolution du problème précédent utilise des arguments de symétrie. Lorsqu'un dopant est placé dans une nanostructure, la symétrie est souvent réduite par la présence d'interfaces entre le silicium et un oxyde, ou par la présence d'un champ électrique. Pour calculer les

fonctions d'onde électroniques des dopants dans ce cas, et les niveaux associés, il faut avoir recours au calcul numérique. Yann-Michel Niquet du CEA-Grenoble a effectué des simulations pour nous aider à comprendre l'effet de la nanostructure, et du champ électrique, sur le spectre d'un dopant. Ces résultats seront présentés dans la section 2.4.3. En règle générale, une perturbation a pour effet de déformer la fonction d'onde de l'électron. Pour le niveau  $A_1$ , cela signifie que le poids de la fonction d'onde au niveau du donneur va être réduit, et la levée de dégénérescence de vallée sera moindre.

La présence de différents matériaux a aussi un effet sur l'énergie de ionisation des dopants. Par exemple, lorsqu'un dopant est placé proche d'une interface avec du  $\text{SiO}_2$ , il est soumis au potentiel attracteur de sa charge image. Cette charge virtuelle, positive, est créée par la différence de constante diélectrique du silicium et de son oxyde. L'électron voit son énergie de ionisation augmenter [47] car il est localisé à la fois par le potentiel du donneur, et celui de la charge image.

### 1.2.2 Transport à travers des dopants uniques

Expérimentalement, la possibilité d'accéder à des dopants uniques n'est apparue que durant les dix dernières années, dès qu'il a été possible de réaliser des dispositifs suffisamment petits. La première réalisation d'un transistor en silicium dans lequel un dopant d'arsenic est contacté par une source et un drain, et contrôlé par une tension du grille, a été effectué par l'équipe de Rogge à Delft [50]. En réalisant la spectroscopie à tension source-drain finie, ils mesurent l'énergie des premiers états excités (figure 1.8, **a**). La mesure systématique de plusieurs dispositifs leur a permis de déterminer les états excités de plusieurs dopants arsenic [48]. L'énergie du premier état excité pour l'arsenic, qui est environ 21 meV dans le silicium massif, est comprise entre 2 meV et 5 meV dans leurs dispositifs. Cette différence s'explique par la présence d'un fort champ électrique au niveau des donneurs, qui diminue la levée de dégénérescence de vallée induite par les dopants.

Le transport à travers un dopant unique est ensuite effectué par l'équipe de Dzurack en Australie [49]. Leur dispositif est constitué de deux grilles situées proche d'une interface Si/ $\text{SiO}_2$ , où le silicium est dopé localement. Une tension positive est appliquée sur la première grille pour accumuler un gaz d'électrons. La seconde grille permet de dépléter localement ce gaz au niveau des dopants (figure 1.8, **b**). Ils observent l'effet du champ magnétique sur les états des dopants et mesurent le premier état excité dû à l'effet Zeeman. Cependant, les données ne permettent pas de mettre clairement en évidence les états excités orbitaux des dopants car les motifs des trois dopants qu'ils mesurent se chevauchent.

La mesure de dopants uniques aussi été effectuée dans notre équipe par Mathieu Pierre [42] en utilisant un transistor de la microélectronique (légèrement modifié). Dans ce dispositif, les quelques dopants visibles à basse température sont responsables du courant de fuite du transistor à température ambiante, ce qui est la preuve directe qu'un unique dopant peut dégrader la caractéristique d'un transistor. Il n'est pas possible d'extraire l'énergie des états excités du premier dopant à partir des données. La spectroscopie du dopant est perturbée par la fluctuation de la densité d'états dans les contacts (étudiée plus en détail dans [51]).

Un dopant unique peut aussi être situé dans un système plus complexe. À Grenoble, Vitaly Golovach réalise l'étude théorique du transport électronique à travers un dopant en



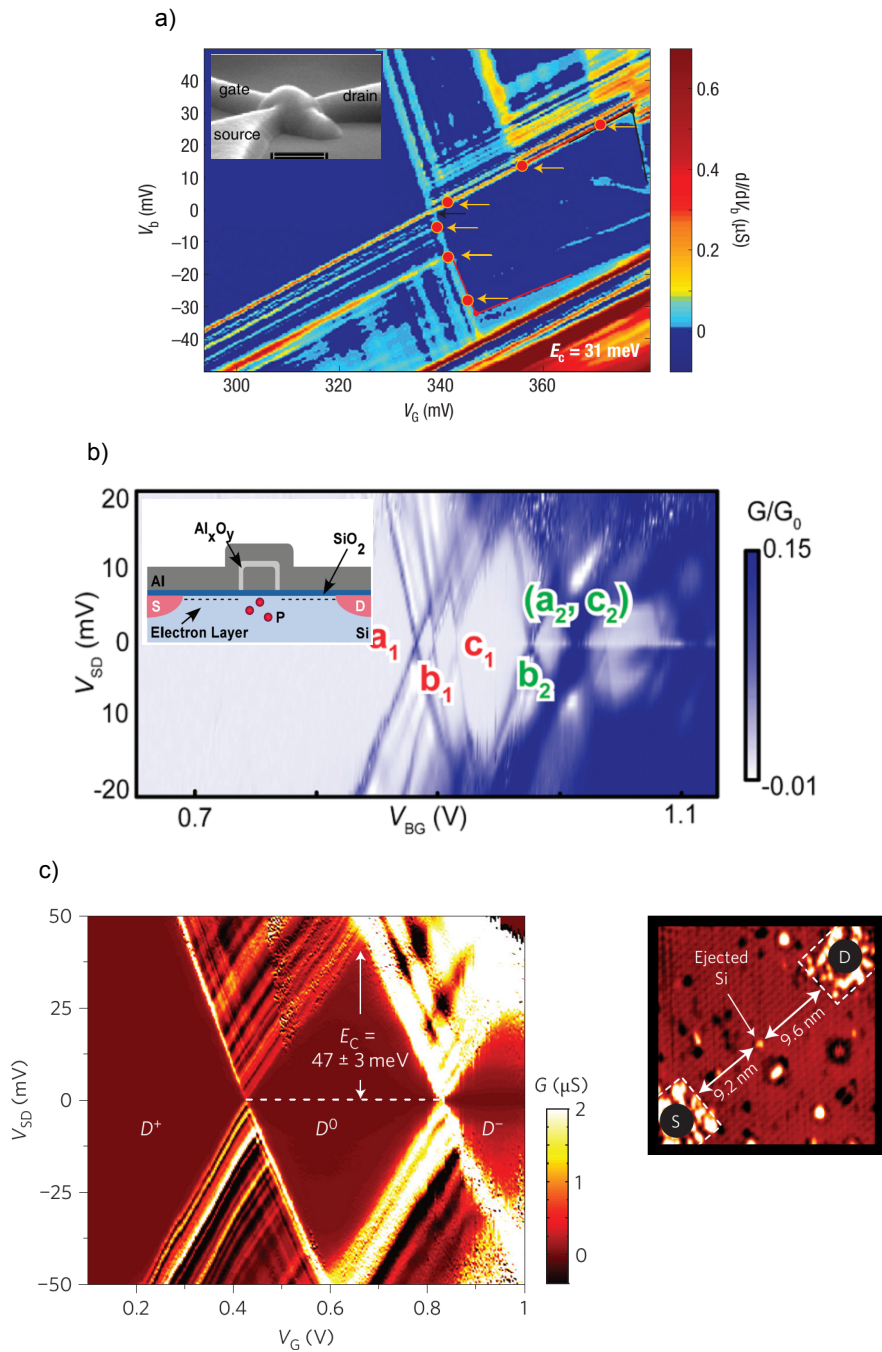


FIGURE 1.8 – Transport à travers des dopants uniques. a) Mesure effectuée dans un FinFET (image MEB en haut à gauche, la barre d'échelle correspond à 200 nm). Les états excités sont indiqués par les flèches (d'énergies respectives 3,5 meV, 15,5 meV et 26,4 meV). Extrait de [48]. b) Dispositif réalisé en combinant deux grilles au-dessus d'une interface Si/SiO<sub>2</sub> (en haut à gauche : une grille globale crée un gaz d'électrons, qui est déplété localement par la seconde). Ce dispositif permet d'étudier 3 dopants en parallèles. Extrait de [49]. c) Étude d'un dopant unique par placement déterministe à l'aide d'un STM. La double occupation du dopant est mise en évidence. Une image du dispositif est indiquée à droite (la grille est située en dehors de l'image). Extrait de [29].

série avec un transistor à un électron [52]. Ce travail est appuyé par les mesures d'un tel système effectuées dans notre équipe.

Pour finir, l'équipe de Simmons en Australie a réalisé elle aussi un dispositif qui permet de mesurer le courant à travers un dopant (figure 1.8, **c**). Leur dispositif met en évidence la double occupation du dopant, c'est-à-dire la possibilité pour le dopant de confiner deux électrons (ce qui correspond à l'état  $D^-$ ). Les énergies de ionisation mesurées ont été confortées par des simulations numériques. Cependant, les nombreuses lignes visibles dans le motif associé au dopant, qui sont dues à la fluctuation de densité d'états dans les contacts, masque la présence des états excités. Leur détermination ne peut donc pas être effectuée.

### 1.2.3 Placement des dopants

Le positionnement précis des dopants reste encore un challenge technologique. Les premiers résultats faisant état du placement déterministe d'un dopant phosphore en utilisant un STM datent de 2003 [53]. Il a fallu près d'une dizaine d'années à l'équipe de Simmons en Australie pour perfectionner cette technique afin de contacter un dopant unique. Leur approche permet de positionner un atome de phosphore à 1 nm près.

Une autre méthode de positionnement des dopants consiste à créer un masque avant l'implantation de dopants. Il est en principe possible de créer des ouvertures dans une résine d'une dizaine de nanomètres de diamètre. Le placement des dopants se fera avec cette précision. Des efforts ont été réalisés pour implanter un nombre fixe de dopant, en détectant l'arrivée d'un dopant dans la nanostructure par la modification brutale de ses caractéristiques électriques [54].

Une équipe au Japon a utilisé le faisceau focalisé d'un canon à ions pour implanter des dopants uniques dans une structure en silicium [55]. Le dopant unique est détecté à l'aide des électrons secondaires qui sont émis lorsque le dopant pénètre le silicium. Le dopant peut être implanté avec une précision d'environ 60 nm.

Pour finir, le dopage global d'une nanostructure est une méthode qui a fait ses preuves pour étudier des dopants uniques. Les outils développés pour la microélectronique permettent de prévoir précisément la répartition des dopants lors de l'implantation. Le contrôle précis de la concentration des dopants offre la possibilité de maximiser les chances d'obtenir le placement voulu.

## 1.3 Notre approche

Notre approche consiste à profiter des progrès de la microélectronique, qui repose sur une recherche technologique intensive depuis des dizaines d'années, pour réaliser des nanostructures de très petites dimensions. En réalisant nos échantillons en suivant un procédé de fabrication industriel, nous pouvons bénéficier d'une grande maîtrise du dopage des nanostructures. De plus, nous assurons la compatibilité de la réalisation de nos dispositifs pour une intégration future avec des circuits électroniques plus classiques.

### 1.3.1 Fabrication des échantillons

Dans cette section, on décrit brièvement la fabrication des échantillons, et plus particulièrement les procédés importants pour le travail présenté dans ce manuscrit. Les échantillons présentés dans ce manuscrit ont été réalisés sur des substrats de silicium sur isolant (SOI, *silicon on insulator*) de 200 mm.<sup>1</sup> La réalisation des nanostructures a lieu dans un premier temps, puis elles sont intégrées au sein d'une « puce » qui contient les éléments nécessaires pour pouvoir les mesurer (lignes métalliques, plots de contact, etc.). Seule la réalisation de l'échantillon nous intéresse ici. L'intégration de l'échantillon au sein d'une puce est néanmoins importante car elle permet de protéger le dispositif de l'environnement extérieur, en particulier des pièges de charge pouvant polluer la surface, qui dégradent généralement les performances du dispositif.

La fabrication des échantillons est représentée schématiquement sur la figure 1.9. On prend l'exemple d'un dispositif ayant la même géométrie qu'un transistor de la microélectronique, composé d'un fil de silicium et d'une grille. On commence à partir du substrat de SOI (a), qui consiste en un mince film de silicium cristallin posé sur du SiO<sub>2</sub> (le BOX, pour *buried oxide*). La première étape importante consiste à doper le film de silicium par implantation (b). Ce premier dopage sera ensuite présent dans tout le dispositif final. On choisit un dopage relativement faible pour avoir des dopants isolés, et empêcher de rendre le silicium métallique. Ensuite le film de silicium est gravé par lithographie électronique pour lui donner sa géométrie finale. Du SiO<sub>2</sub>, puis du silicium poly-cristallin sont déposés, et gravés par lithographie électronique pour former les grilles du dispositif (c). Des espaceurs en Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> sont placés le long de la grille,<sup>2</sup> le silicium est épitaxié pour augmenter son épaisseur, et dopé à forte dose pour rendre les sources et drain métalliques (d). Cette étape est ensuite répétée (e). Réaliser les sources et drain en deux fois, comme décrit précédemment, permet d'adoucir le gradient de dopage entre les source et drain et le cœur du dispositif, ce qui améliore la performance des transistors.

Au cours de notre travail, nous avons effectué quelques variantes au procédé de fabrication précédent. Nous avons ainsi réalisé des dispositifs sans dopage initial (étape b), ou avec uniquement un seul espaceur (on s'arrête à l'étape e). Le film de silicium ainsi que le silicium polycristallin peuvent être mis en forme à souhait grâce à la lithographie électronique. Cela permet de s'éloigner de la géométrie de transistor et de dessiner des dispositifs complexes. Dans la suite de cette partie, nous présentons quelques dispositifs réalisés dans le cadre des projets AFSiD [56] et PoÉSI, sur lesquels repose ce manuscrit.

### 1.3.2 Îlots de Coulomb définis par la grille

Comme l'a montré Max Hofheinz au cours de sa thèse [26], la géométrie en transistor des dispositifs décrits précédemment permet de réaliser des îlots de Coulomb en utilisant une seule grille de contrôle. Après lui, Mathieu Pierre a étudié au cours de sa thèse [57] l'effet des paramètres de fabrication sur les îlots de Coulomb obtenus. L'îlot de Coulomb est formé

---

1. Au moment de la rédaction de ce manuscrit, on utilise maintenant des substrats de 300 mm. Il s'agit du nouveau standard de la microélectronique.

2. La technique utilisée, qui consiste à graver un film de Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> déposé de façon uniforme, permet un auto-alignement des espaceurs avec les grilles.

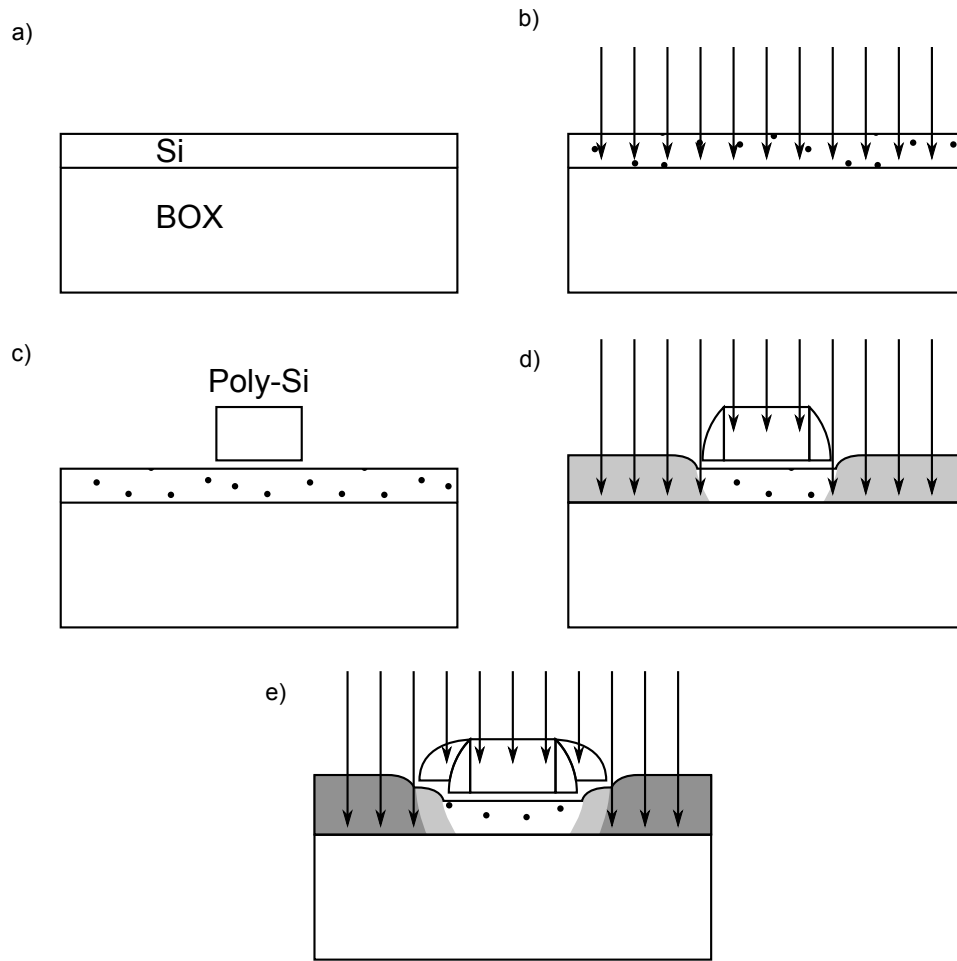


FIGURE 1.9 – Principales étapes de la fabrication des échantillons (voir texte). On prend l'exemple d'une géométrie de transistor, où les électrons circulent dans un nanofil et sont contrôlés par une grille. On a représenté une coupe le long de ce nanofil. La grille est perpendiculaire au fil de silicium.

sous la grille où un gaz bidimensionnel d'électrons est accumulé pour des tensions de grille positives. Les espaceurs permettent de séparer ce gaz d'électrons de la source et du drain.

La réalisation de grilles d'une vingtaine de nanomètres (figure 1.10) permet d'obtenir des îlots de Coulomb qui présentent une séparation entre niveaux à un électron théorique proche du milli-électronvolt (voir section 1.1.6). La figure 1.11 montre la caractéristique d'un échantillon de petite taille. La grille possède une largeur  $L = 20$  nm, une longueur  $W = 20$  nm et une épaisseur  $t_{Si} = 10$  nm. La surface de recouvrement  $S$  du fil de silicium par la grille correspond approximativement à la surface du gaz d'électrons (ce point a été étudié en détail dans la thèse de Max Hofheinz [26]). On trouve  $S = L(W + 2t_{Si}) \approx (28 \text{ nm})^2$ , ce qui correspond approximativement à  $\Delta_1 \approx 0,5$  meV d'après la relation 1.2. Il s'agit d'un gain d'un facteur 3 environ par rapport aux transistors étudiés quelques années auparavant dans le groupe [58].

La mesure à polarisation finie des boîtes quantiques, tels que la figure 1.11, est sensible aux spectres des électrons. Dans les mesures de ce type, les états excités se manifestent par

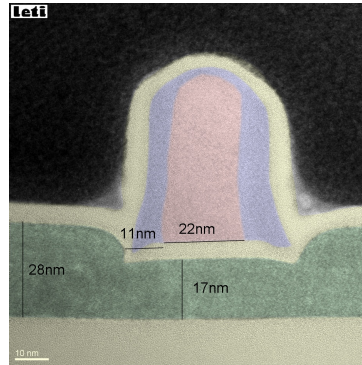


FIGURE 1.10 – Coupe TEM d’un dispositif de petite taille. La grille (en rouge) est large de 22 nm et le fil de silicium (en vert) est épais de 17 nm. Les espaceurs ont été coloriés en bleu, et le  $\text{SiO}_2$  en jaune.

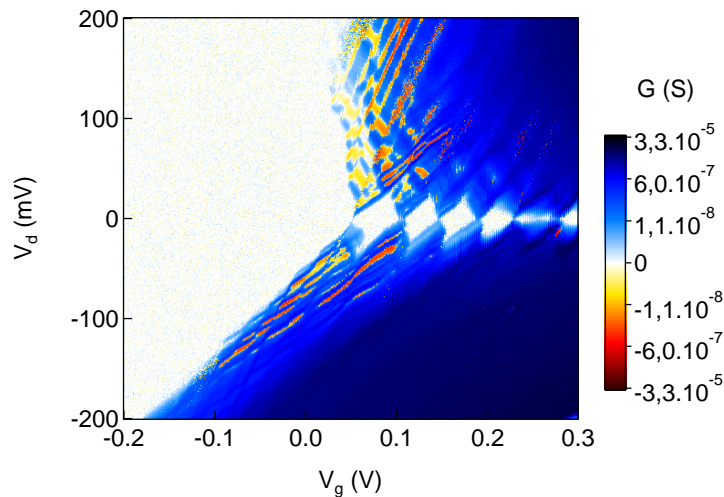


FIGURE 1.11 – Conductance différentielle d’un transistor de petite taille à 4,2 K.

le présence de lignes de conductance différentielle positive. Une multitude des lignes sont présentes sur la figure précédente, mais il est délicat d’associer, ou non, ces lignes aux états excités. Certaines lignes peuvent venir, par exemple, de la fluctuation de la densité d’états dans les contacts (voir section 1.2.2), ou de la présence d’un piège à électron à proximité de l’îlot de Coulomb [59].

Notons au passage que cette figure est relativement unique. On peut voir une séparation très nette entre la région bloquée (à gauche), et la première ligne de courant associé au passage d’un électron. Ce contraste, qui s’étend jusqu’à des énergies de polarisations  $|e|V_d$  de 200 meV, nous fait penser que nous voyons le premier électron qui occupe la boîte quantique.

### 1.3.3 Géométrie « grilles face à face »

Parmi les nombreuses géométries réalisées au cours des projets, celle qui nous intéresse tout particulièrement dans ce manuscrit est la géométrie « grilles face à face » (GFF), qui

est représentée en figure 1.12. Nous utiliserons ce dispositif dans les chapitres suivants pour étudier le transport électronique à travers deux dopants en série. La géométrie GFF permet de contacter des dopants uniques grâce aux électrodes de source et de drain séparées de quelques dizaines de nanomètres, des deux grilles locales et de la possibilité d'appliquer une tension sur substrat. Il peut sembler contre-intuitif de mettre les grilles de part et d'autre du fil de silicium pour étudier des dopants en série, et non pas en parallèle, mais cette solution permet d'obtenir une distance entre la source et le drain plus courte.

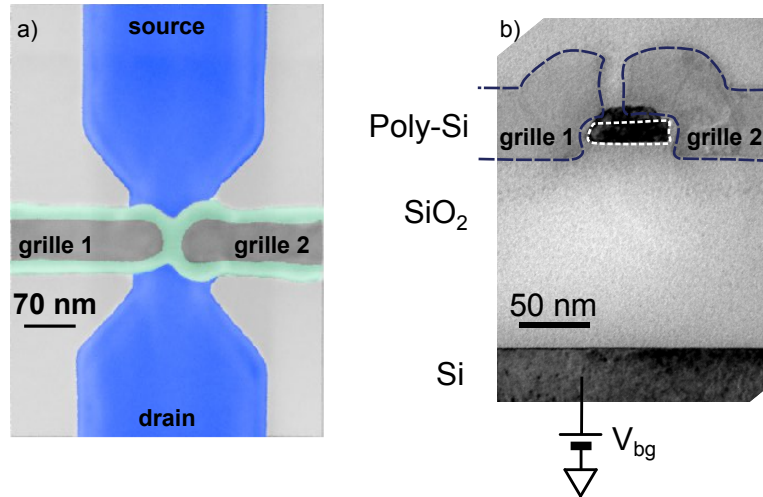


FIGURE 1.12 – Vues de la géométrie GFF. Ces dispositifs proviennent du même lot que ceux mesurés dans ce manuscrit. a) Image MEB du dispositif (fausses couleurs), le silicium est en bleu, les grilles en gris et les espaceurs en vert. b) Coupe TEM effectuée sur un dispositif réel (généralement, les coupes TEM sont effectuées sur un motif dédié très long). La partie de silicium en dehors du tireté blanc est due à l'épithaxie des sources et drain, qui n'est pas dans le même plan que les grilles.

Ce dispositif correspond à un transistor classique dont la grille a été séparée en deux. La distance entre les deux grilles est d'environ 15 nm. Les deux grilles sont indépendantes, et on notera  $V_{g1}$  et  $V_{g2}$  leurs potentiels électrostatiques respectifs. Le masqueur, qui réalise la lithographie du dispositif en deux fois, doit effectuer un alignement pour que le fil de silicium et les grilles soient correctement positionnés les uns par rapport aux autres. Cet alignement se fait avec une erreur moyenne d'une dizaine de nanomètres. Il en résulte que l'espace entre les deux grilles n'est pas aligné avec le fil de silicium pour certains échantillons. Le dispositif est alors peu intéressant, car l'une des deux grilles n'a qu'un effet faible sur le dispositif. La mesure de l'échantillon à température ambiante permet de déterminer si les grilles sont alignées avec le fil de silicium.

### 1.3.4 Dopage de la structure

Le dopage d'une nanostructure par implantation présente plus de difficultés que celui d'un cristal massif. La difficulté réside d'une part dans la nécessité d'obtenir un dopage uniforme dans la faible épaisseur de la couche de silicium, tout en utilisant une dose relativement faible pour éviter d'induire trop de défauts dans le silicium, et dans son oxyde. Pour doper

seulement quelques nanomètres de silicium, l'énergie d'implantation des ions doit être faible. Pour améliorer l'uniformité de la couche, on rajoute au-dessus du film de silicium une couche d'oxyde (« l'oxyde sacrificiel ») qui permet de ralentir les ions, et qui sera retiré par la suite. D'autre part il faut recuire le silicium autour de 1000 °C pour éliminer les défauts créés par l'implantation, et permettre aux dopants de s'insérer en substitution d'un atome du cristal. Au cours du recuit, les dopants ont tendance à migrer vers les bords de la nanostructure et à venir se piéger au niveau des interfaces. Pour limiter ce phénomène, le recuit dure le moins de temps possible, quelques secondes en pratique, grâce à la méthode de *rapid thermal annealing*. Un exemple du profil de concentration dans le dispositif final est représenté en figure 1.13.

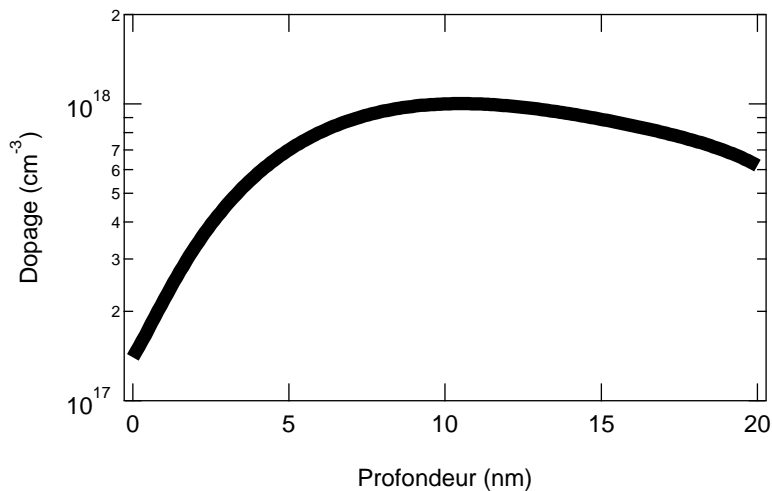


FIGURE 1.13 – Profil de dopage d'un dispositif de 20 nm d'épaisseur, dopé avec des ions arsenic accélérés avec une énergie de 30 keV, à une dose de  $3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . 5 nm de  $\text{SiO}_2$  et 5 nm de Si ont été utilisés pour ralentir les ions, et ont été retirés par la suite (non représentés). La profondeur est comptée à partir de l'interface supérieure du fil de silicium (l'interface avec le BOX est située en  $x = 20 \text{ nm}$ ). Ce profil a été obtenu par simulation.

Un paramètre supplémentaire dans le contrôle du dopage est l'angle avec lequel les ions sont implantés. Pour doper efficacement une nanostructure, il est usuel d'utiliser un angle de quelques degrés. Sans l'utilisation d'un angle non nul, les ions arrivent sur le silicium en étant colinéaire à des rangées atomiques. Un ion qui s'engouffre dans une rangée vide d'atome peut parcourir une distance plus élevée. En implantant sans angle on obtient donc une plus grande dispersion des dopants dans le cristal de silicium.

On peut aussi utiliser un angle plus élevé pour doper sélectivement certaines parties du dispositif. L'implanteur qui a été utilisé pour réaliser les échantillons permet de doper avec un angle qui peut aller jusqu'à 55°. L'effet de l'angle d'implantation sur la géométrie GFF est représenté sur la figure 1.14. Le dopage sous angle est réalisé en deux fois, pour les deux orientations représentées sur la figure 1.14, afin de rendre symétrique l'échantillon. Il faut noter aussi que pour cette géométrie, on s'attend à remplir l'espace entre les grilles par de  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , qui protège du dopage le fil situé en-dessous.

La caractérisation électrique des échantillons à température ambiante met clairement en évidence l'effet de l'implantation sous angle sur le dopage des échantillons. Ici on utilise une implantation sous angle pour réaliser le dopage à haute dose des électrodes de source

et de drain (étape **d** de la figure 1.9). La figure 1.15 donne le courant source-drain  $I_{ds}$  en fonction de la tension  $V_g$  appliquée aux deux grilles. On représente les échantillons mesurés sur deux plaques de silicium différentes, pour deux géométries légèrement différentes. La première plaque (S952 W09) a été implantée avec un angle de  $55^\circ$  dans la direction nord-sud (NS), tandis que l'implantation de la seconde (S952 W10) était orienté est-ouest (EW). Mis à part l'angle de l'implantation, ces deux plaques ont suivi les mêmes étapes de fabrication. Deux types d'échantillons sont représentés, le premier, de type A (DLPWPN\_6), possède un fil de silicium orienté nord-sud et une distance entre les deux grilles dessinée à 30 nm. Le second, de type B (WBPTN\_2), est orienté à  $90^\circ$  par rapport au précédent, et a été dessiné avec un écart de 40 nm entre les grilles. Pour résumer, les échantillons A-NS et B-EW correspondent au schéma **a** de la figure 1.14, et les échantillons A-ES et B-NS au schéma **b**.

Les caractéristiques à température ambiante mettent en évidence que certains échantillons ne « ferment » pas bien (un courant circule encore pour une tension des grilles très négative). Les échantillons qui ne ferment pas correctement contiennent trop de dopants au sein de leur canal. C'est le cas en particulier de tous les échantillons B-NS, que nous allons essayer de détailler. Deux hypothèses s'offrent à nous pour expliquer pourquoi le cœur de l'échantillon B-NS est très dopé. Soit la distance entre les source et drain diminue trop à cause de l'implantation sous angle (schéma de droite de la figure 1.14 **b**), ce qui empêche le transistor de bien fermer (cet effet est connu sous le nom de *short channel effects* en microélectronique). On écarte cette hypothèse car cet effet n'est pas aussi prononcé pour les échantillons A-EW, qui ont pourtant la même distance source-drain. L'autre possibilité qui est offerte aux dopants pour arriver dans le canal est de passer à travers l'espace entre les grilles. En effet, la distance entre les grilles est un peu plus grande pour B-NS que pour A-EW, on peut imaginer que les espaceurs ne remplissent pas bien l'espace entre les grilles si la distance entre les grilles dépasse les 30 nm dessinés.

On remarque aussi qu'au sein d'une même série d'échantillons, leurs caractéristiques peuvent être très différentes. Par exemple la série A-EW, qui correspond au dopage **b** de la figure 1.14, comprend à la fois des échantillons qui ferment très bien (rapport  $I_{on}/I_{off} = \sim 20\,000$ ), et d'autre mal ( $I_{on}/I_{off} = \sim 2$ ). Cette différence de comportement semble être liée à la variabilité du dopage, qui est très certainement accentuée par la géométrie inhabituelle du dispositif pour la microélectronique.

Afin d'étudier deux dopants isolés dans le canal, il est préférable d'utiliser des dispositifs qui ferment relativement bien. La caractérisation à température ambiante des échantillons est alors un outil précieux pour sélectionner les échantillons. Dans la suite de ce manuscrit on étudiera en détail les échantillons GFF-P et GFF-As indiqués sur la figure 1.15.

### 1.3.5 Conclusion

La technologie silicium bien établie offre une multitude de moyens et de modèles qui permettent de maîtriser la réalisation d'échantillons. Néanmoins, lorsque l'on approche des limites de ces procédés, on augmente la variabilité des caractéristiques des dispositifs. L'alignement des motifs, le contrôle fin du dopage commencent à atteindre leurs limites. La réponse à cette variabilité est la possibilité de réaliser un très grand nombre de dispositifs sur une unique puce de silicium (rappelons que les processeurs d'ordinateur les plus avancés sont composés de plus d'un milliard de transistors). Une première sélection des dispositifs peut-être réalisée



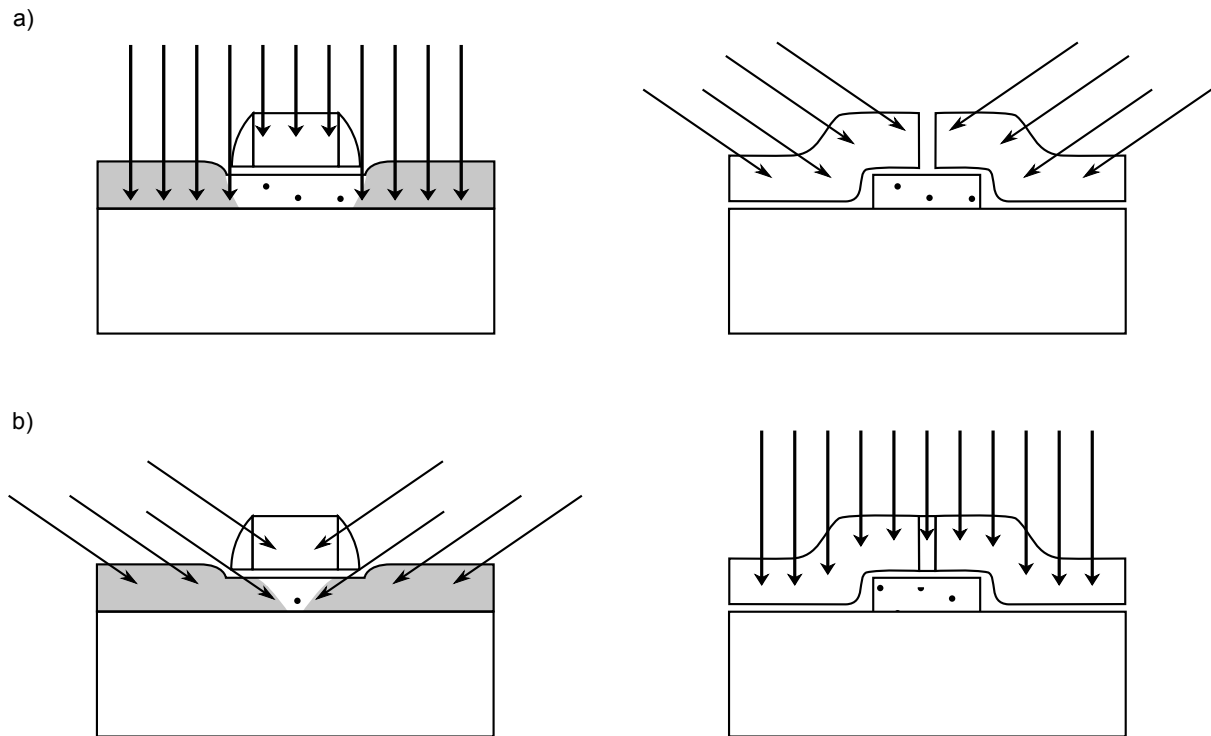


FIGURE 1.14 – Représentation schématique de l'effet d'une implantation sous angle sur le dopage de la géométrie GFF. a) L'implantation est perpendiculaire au fil, la partie du fil entre les grilles est protégée du dopage. b) L'implantation est orientée le long du fil, les dopants pénètrent plus profondément sous les grilles.

à température ambiante. Au cours de ce travail nous avons eu la possibilité de caractériser à température ambiante environ 50 000 échantillons en utilisant une station sous pointe semi-automatique. Cette idée peut être poussée un cran plus loin en imaginant pouvoir mesurer un grand nombre de dispositifs à basse température. La possibilité d'intégrer de l'électronique sur la même puce que les dispositifs offre peut-être cette possibilité, et bien d'autres.

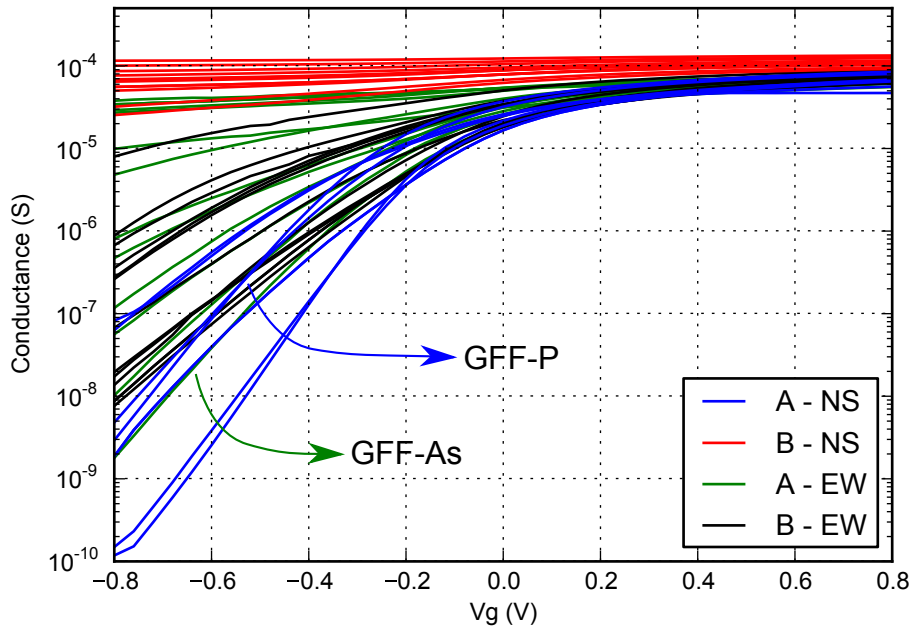


FIGURE 1.15 – Caractéristiques de 4 groupes d'échantillons à température ambiante. La conductance à faible polarisation est mesurée en fonction de la tension  $V_g$  appliquée aux deux grilles du dispositif ( $V_d = 10$  mV). Les échantillons sont représentés sur la figure 1.14 : A-NS et B-EW correspondent au cas **a**, B-NS et A-EW au cas **b**. Au sein d'un même groupe d'échantillons, le placement aléatoire des dopants explique la dispersion des caractéristiques. Les différentes tendances entre les séries traduisent le dopage des dispositifs : le transistor ferme mieux lorsqu'il contient globalement moins de dopants.

## Chapitre 2

# Transport électronique à travers une paire de dopants en série

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Considérations statistiques . . . . .</b>	<b>32</b>
<b>2.2</b>	<b>Caractérisation de l'échantillon mésoscopique . . . . .</b>	<b>34</b>
2.2.1	Régime à faible tension de substrat . . . . .	34
2.2.2	Régime à forte tension de substrat . . . . .	37
<b>2.3</b>	<b>Électrostatique du système de deux niveaux quantiques . . . . .</b>	<b>37</b>
2.3.1	Diagramme de stabilité . . . . .	38
2.3.2	Caractérisation à tension de polarisation finie . . . . .	39
2.3.3	Caractérisations expérimentales de paires de dopants à faible $V_d$ . . . . .	41
<b>2.4</b>	<b>Spectroscopie des niveaux électroniques des dopants . . . . .</b>	<b>43</b>
2.4.1	Spectroscopie des deux dopants . . . . .	44
2.4.2	Visibilité des lignes de courant . . . . .	45
2.4.3	Sensibilité de la levée de dégénérescence de vallée à l'environnement . . . . .	46
2.4.4	Effet du champ magnétique . . . . .	47
<b>2.5</b>	<b>Transport quantique . . . . .</b>	<b>48</b>
2.5.1	Processus inélastiques . . . . .	48
2.5.2	Corrections dues aux interactions électrostatiques . . . . .	50

---

Nous avons vu au chapitre précédent qu’une impureté dans un cristal de silicium est une alternative très séduisante aux boîtes quantiques, mais que la maîtrise de leur position et de leur couplage à l’environnement représente encore un défi. Dans ce chapitre, nous montrons qu’il est possible de connecter deux dopants en série dans une nanostructure fabriquée avec une approche *top-down*. Les progrès de la micro électronique permettent aujourd’hui de concentrer des grilles indépendantes dans un petit volume et de maîtriser le processus d’implantation de dopants dans les nanostructures. Nous montrerons que ces réalisations techniques rendent possible l’étude de dopants couplés.

La caractérisation de ce système en régime statique par mesures de transport permet d’obtenir la plupart des paramètres du système. En outre, il révèle le spectre de chacun des deux dopants, qui sera comparé au spectre des dopants dans le silicium massif.

## 2.1 Considérations statistiques

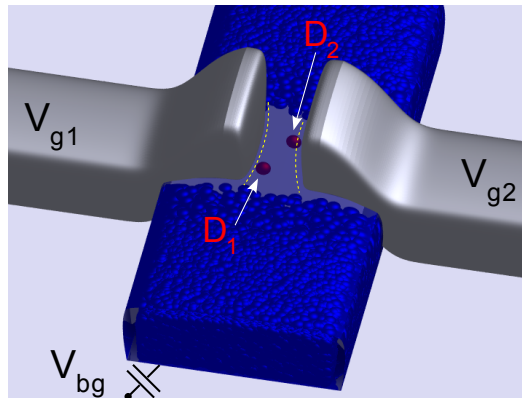


FIGURE 2.1 – Vue d’artiste du dispositif utilisé pour étudier deux dopants couplés (les espaceurs n’ont pas été représentés). Les deux électrodes de contact sont dopées à une forte concentration (boules bleues). Dans le canal, seuls deux dopants sont étudiés (boules rouges).

Les données sur lesquelles repose ce chapitre sont issues de deux échantillons décrits dans le chapitre précédent. Il s’agit des échantillons GFF-P et GFF-As, ayant la même géométrie mais dont les procédés de dopage diffèrent. Le corps de l’échantillon GFF-P est intentionnellement dopé avec du phosphore à une concentration d’environ  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , tandis que les dopants qui se trouvent dans le corps de l’échantillon GFF-As sont des dopants arsenic issus de la réalisation des source et drain par implantation avec un angle de  $55^\circ$ . Dans tout ce chapitre, nous nous concentrerons principalement sur l’échantillon GFF-P dont les données en transport sont plus intéressantes.

Afin de pouvoir réaliser la conduction d’électrons à travers deux dopants en série il faut ajuster les dimensions de l’échantillon et son dopage pour avoir une probabilité suffisamment élevée d’avoir deux dopants en série entre la source et de drain. Le choix de la concentration de dopants dans le corps de l’échantillon est crucial pour une approche *top-down*. Il faut trouver le bon compromis entre un dopage faible qui permet d’avoir des dopants isolés et peu nombreux dans le corps du transistor, et un dopage plus fort qui permet d’augmenter les chances de trouver une paire de dopants idéalement placée. La figure 2.2 donne une représentation du

dopage de l'échantillon GFF-P en ayant pris une distribution aléatoire de dopants compatible avec son dopage. Seul le corps du transistor faiblement dopé est représenté (d'un volume  $60 \times 60 \times 20 \text{ nm}^3$ ). On considère que les contacts de source et de drain sont les plans définis par  $L = 0$  et  $L = 60 \text{ nm}$ . On a placé dans ce volume une cinquantaine de dopants (points bleus et rouges) de façon aléatoire et uniforme.<sup>1</sup> La question qui se pose maintenant est de savoir quels couples de dopants permettent le transport électronique de la source au drain dans les conditions de la mesure de l'échantillon GFF-P. La tension positive appliquée au substrat permet de sélectionner les dopants situés dans les premiers nanomètres inférieurs du fil de silicium, les autres dopants ayant des énergies de ionisation loin des niveaux de Fermi dans les contacts. On ne garde donc que les dopants situés à moins de 5 nm de l'interface inférieure. De plus, on estime que les couplages avec les électrodes de source et drain correspondent à une distance inférieure à 20 nm environ (en s'inspirant de la référence [29]), et le couplage entre les dopants correspond à une séparation maximale d'environ 30 nm (voir section 2.3.3). En appliquant ces quatre conditions à tous les couples de dopants de cette distribution aléatoire, il ne reste qu'un couple de dopant (en rouge) qui permet le transport électronique de la source au drain.

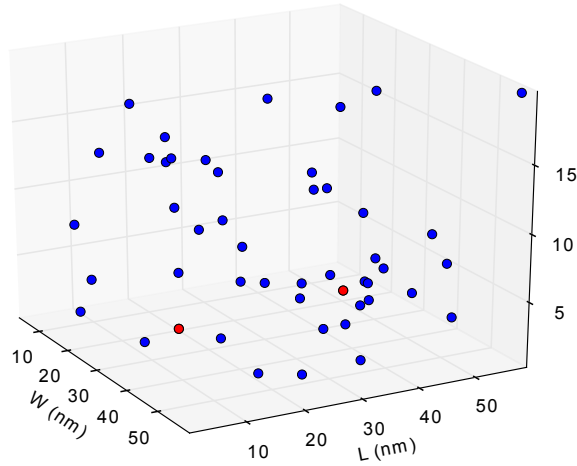


FIGURE 2.2 – Génération aléatoire d'une distribution de cinquante dopants dans le corps du transistor. Seuls deux dopants (rouges) présentent les conditions décrites dans le texte pour permettre aux électrons de passer de la source au drain.

Cet exemple nous permet de montrer d'une part qu'il est facile de restreindre les électrons à circuler à travers un couple de dopants alors que le corps du transistor en contient une cinquantaine. D'autre part on remarque que les deux dopants qui assurent le transport des électrons ne sont pas forcément chacun le premier voisin de l'autre. Il y a une forte probabilité pour que d'autres dopants se trouvent plus proches de l'un ou de l'autre des dopants qui forme le couple. En effet, dans un modèle 3D infini la distance moyenne entre dopants pour une concentration  $c$  est  $0.554 \times c^{-3}$  [60], soit environ 10 nm dans notre cas. Pourtant la séparation des deux dopants, estimée à partir des couplages, est d'environ 30 nm.

Dans ce système mésoscopique qui contient plusieurs dizaines de dopants, est-ce que l'on peut toujours considérer que l'on étudie deux dopants isolés? Quand on place un dopant dans une nanostructure, on peut modifier son énergie de ionisation [47], ou son spectre [61]. Dans ce

1. En pratique la concentration des dopants n'est pas uniforme sur toute la hauteur du fil, voir chapitre 1.

manuscrit, on s'intéresse plus particulièrement au spectre du dopant, et plus particulièrement à la séparation entre son état fondamental et son premier état excité (voir chapitres 3 et 4). On considèrera qu'un dopant est suffisamment isolé si son spectre est faiblement modifié par rapport au cas idéal d'un dopant isolé dans un cristal massif. La fonction d'onde de l'électron pourrait fortement s'éloigner du cas isolé si son état électronique était hybridé avec un autre état, comme par exemple un autre dopant ou un état à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> [61]. Cependant, pour que l'état D<sup>0</sup> s'hybride avec l'état d'un autre dopant, il faut deux conditions. D'une part il faut que les dopants soient suffisamment proches pour être couplés par effet tunnel (nous reviendrons plus en détail sur ce point au chapitre 3), et d'autre part il faut que leurs niveaux d'énergie soient suffisamment proches. Dans notre cas le potentiel électrostatique varie considérablement au sein du transistor grâce aux trois grilles de contrôle. Il y a alors peu de chance pour que deux dopants proches forment des états électroniques hybridés.

Le champ électrique induit par un donneur ionisé avoisinant est un autre facteur qui pourrait modifier considérablement le spectre d'un dopant. L'effet du champ électrique est de décaler la fonction d'onde de l'électron du donneur. Le poids de la fonction d'onde au niveau du donneur est alors réduit, ce qui modifie le spectre du dopant, notamment en réduisant la levée de dégénérescence de vallées. Un calcul simple permet d'estimer le champ électrique  $E$  induit par un donneur ionisé au niveau du noyau d'un autre donneur situé à une distance  $R = 5$  nm,

$$E \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{Si}R^2} \approx 5 \text{ mV/nm}.$$

Comme nous le verrons plus loin dans ce chapitre (section 2.4.3) un champ électrique de 5 mV/nm a un effet faible sur le spectre du dopant.

## 2.2 Caractérisation de l'échantillon mésoscopique

Nous allons maintenant caractériser l'échantillon GFF-P dans sa globalité, pour une grande plage de tensions de grilles. L'effet qui domine le transport électronique dans le régime linéaire est le blocage de Coulomb qui empêche un courant se s'établir, sauf pour des tensions de grilles précises pour lesquelles il y a une dégénérescence des états de charge des îlots de Coulomb. Ces îlots de Coulomb peuvent être de plusieurs natures; ce sont soit des puits de potentiels créés par les grilles, ils peuvent alors contenir jusqu'à plusieurs centaines d'électrons [62], soit des donneurs uniques qui ne peuvent contenir qu'un ou deux électrons. Des situations intermédiaires sont envisageables où l'îlot serait un dopant couplé à un état d'interface, voire un petit paquet de dopants. Nous allons montrer que suivant les tensions appliquées sur les grilles, plusieurs régimes de conduction différents peuvent être dégagés, en fonction de la nature des îlots de Coulomb présents dans le dispositif.

### 2.2.1 Régime à faible tension de substrat

La tension de substrat est le principal paramètre de contrôle qui détermine le régime de transport à travers l'échantillon. La figure 2.3 représente le courant mesuré à travers l'échantillon en fonction de la tension des grilles supérieures ( $V_{g1} = V_{g2}$ ) et de la tension de substrat. L'énergie de polarisation  $|eV_d|$  a été choisie pour être faible comparée à l'énergie de charge

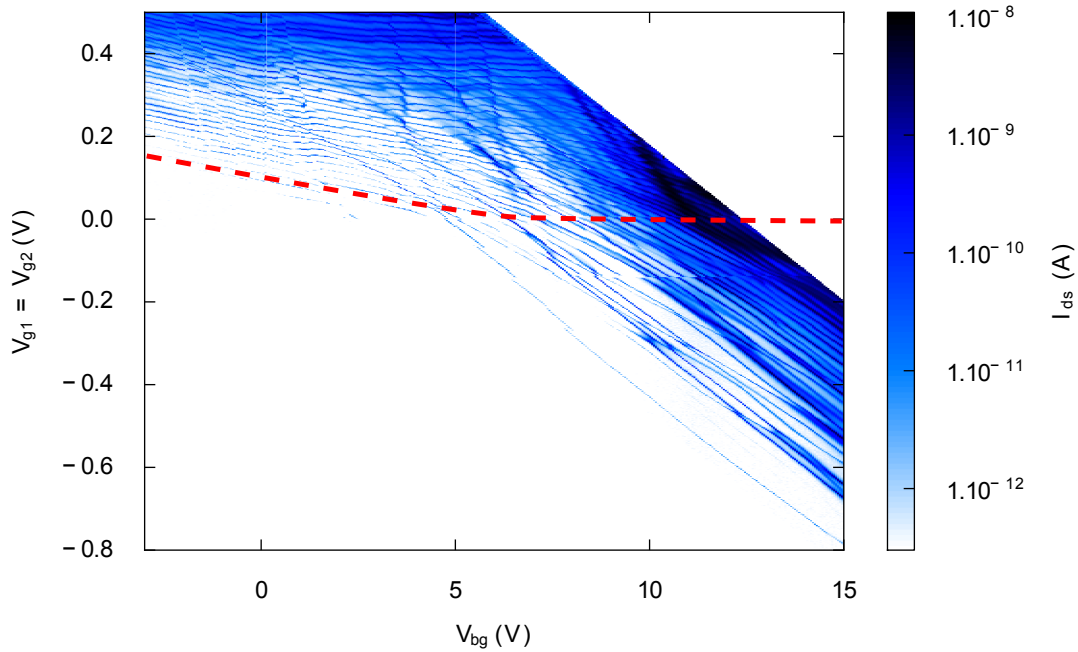


FIGURE 2.3 – Courant  $I_{ds}$  mesuré entre la source et le drain du dispositif en fonction des tensions de grilles à 150 mK. La tension source-drain est  $V_d = 0,5$  mV (loin du régime linéaire). On peut séparer en deux parties cette carte de courant (tireté rouge). Dans la partie supérieure, les lignes de courant horizontales correspondent aux résonances d'îlots de Coulomb situés sous les grilles supérieures. Dans la partie inférieure du graphique, seuls les états disponibles dans la partie inférieure du fil de silicium participent au courant.

des différents îlots de Coulomb, mais suffisamment élevée pour pouvoir faire apparaître distinctement les lignes de courant. On distingue deux régimes dans cette carte de courant. Le premier, situé au-dessus du tireté rouge, est caractérisé par des lignes quasiment horizontales, régulièrement espacées. Cette régularité, que l'on retrouve aussi dans l'intensité du courant, est caractéristique d'un îlot pouvant contenir un grand nombre d'électrons. Le très bon couplage électrostatique aux grilles supérieures laisse penser qu'il s'agit d'îlots formés sous ces grilles. Pour étudier plus en détail ce régime, nous fixons la tension de substrat à 4 V, là où le courant est dominé par ces lignes parallèles au tireté rouge. La figure 2.4 a) correspond au courant mesuré à cette tension de substrat en fonction des deux grilles supérieures. Nous voyons apparaître un réseau de deux séries de lignes de courant, qui sont pratiquement perpendiculaires entre elles. On a donc deux îlots de Coulomb, chacun ayant un couplage électrostatique privilégié à l'une des deux grilles. Ces constatations laissent à penser que l'on aurait dans ce régime deux îlots sous chacune des grilles supérieures. On remarque que le couplage électrostatique des deux îlots entre eux se traduit par le décalage des lignes quand celles-ci se croisent. De plus, on note la présence de perturbations au sein du réseau, qui trahissent la présence d'états isolés qui se ionisent. Bien que ce système de deux îlots couplés à des impuretés puisse certainement faire l'objet d'une étude plus poussée nous ne reviendrons pas sur ce régime dans la suite de ce manuscrit afin de nous focaliser sur les impuretés uniques.

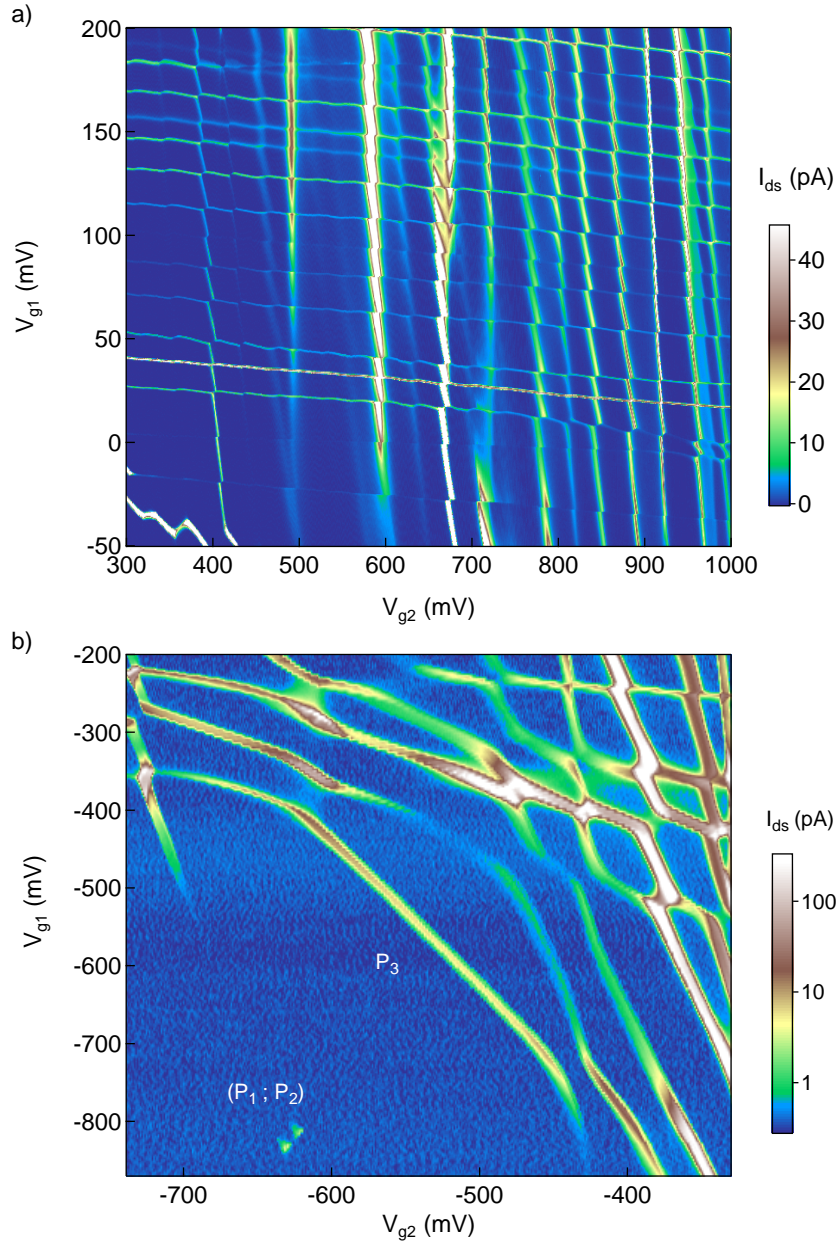


FIGURE 2.4 – Courant en fonction des deux grilles supérieures pour deux tensions de substrat différentes. a)  $V_{bg} = 4V$  et  $V_d = 0.3mV$ . Dans ce régime, le transport est principalement dominé par la présence de deux îlots de Coulomb en parallèle. b)  $V_{bg} = 11,5V$  et  $V_d = 2mV$ . On ne voit ici que les états situés dans la partie inférieure du fil de silicium, dont les niveaux s’anti-croisent.  $P_3$  est un état unique isolé.  $(P_1; P_2)$  est un couple d’états isolés.



### 2.2.2 Régime à forte tension de substrat

Nous revenons sur la figure 2.3 pour en décrire la partie inférieure. Les lignes de courant qui apparaissent diffèrent des précédentes. Tout d'abord le couplage électrostatique aux grilles est différent et la pente de ces lignes  $dV_{bg}/dV_{gi}$ , bien plus forte que précédemment, traduit un meilleur couplage électrostatique au substrat. Les îlots de Coulomb responsables de ces lignes de courant sont donc placés plus loin des grilles supérieures. L'écart entre les lignes n'est pas aussi régulier qu'avant, et leur intensité varie considérablement (on note que l'échelle de couleur est logarithmique, ce qui atténue considérablement ces variations). Ces indices montrent que ce ne sont plus seulement deux îlots qui sont responsables de ces lignes de courant. De plus on voit nettement que plusieurs de ces lignes se rencontrent, faisant apparaître des anti-croisements. Ces nombreux anti-croisements correspondent à chaque fois à l'hybridation des états de charge de deux îlots de Coulomb. Pour ces tensions de grilles nous sommes donc en présence d'un certain nombre d'îlots de Coulomb. La plupart de ces îlots sont des dopants.

La figure 2.4 représente le courant dans le régime décrit précédemment à  $V_{bg} = 11.5$  V en fonction des deux grilles supérieures. On retrouve sur cette figure les premières lignes de courant qui apparaissent sur la figure précédente. On ne retrouve pas sur cette figure la régularité de la figure 2.4 a). Au contraire on peut voir que les lignes ont des pentes souvent différentes, signe que ces îlots de Coulomb sont répartis à différents endroits dans le fil de silicium. Au croisement de deux lignes, on observe à chaque fois un décalage électrostatique, ainsi qu'un arrondissement de la cassure qui traduit le couplage tunnel de ces îlots de Coulomb [63, 57].

Parmi cet ensemble d'états qui permet le transport d'électrons de la source au drain, deux d'entre eux sont bien isolés des autres. Il s'agit des états notés  $P_3$  et  $(P_1; P_2)$ . Le premier correspond vraisemblablement à un dopant unique. Cet état n'est pas complètement isolé puisque l'on peut voir qu'il s'anti-croise avec d'autres états. Néanmoins il y a une plage de tensions pour laquelle cet état se traduit par une ligne de courant bien séparée des autres, ce qui de l'étudier sans perturbation par un état visible (figure 2.5). On constate que, contrairement aux autres états, il est couplé presque symétriquement aux deux grilles supérieures, ce qui laisse à penser que cet état est centré entre ces deux grilles.

Le couple d'état  $(P_1; P_2)$  est un couple de dopant, ce qui sera confirmé par les données de spectroscopie présentées dans ce chapitre. Il conduit à un courant formant deux triangles dans le plan  $(V_{g1}, V_{g2})$ , qui caractérise les points triples du système (nous reviendrons sur la notion de points triples à la section 2.3.1). Dans la suite de ce manuscrit nous nous concentrerons sur ce couple de dopants, ainsi que sur un couple similaire mesuré dans l'échantillon GFF-As.

## 2.3 Électrostatique du système de deux niveaux quantiques

La forme triangulaire du courant mesuré à travers un couple de dopants est décrite par un modèle de deux îlots de Coulomb couplés électrostatiquement. Ce problème a déjà été largement étudié dans des travaux précédents [63, 64], et nous ne présenterons ici qu'un résumé des résultats utiles pour décrire les mesures présentées dans la suite de ce manuscrit. Nous nous restreindrons au cas de niveaux quantiques ne pouvant accepter qu'un seul électron. Dans un premier temps nous allons considérer uniquement les deux niveaux fondamentaux des dopants, nous introduirons les états excités dans la section suivante.

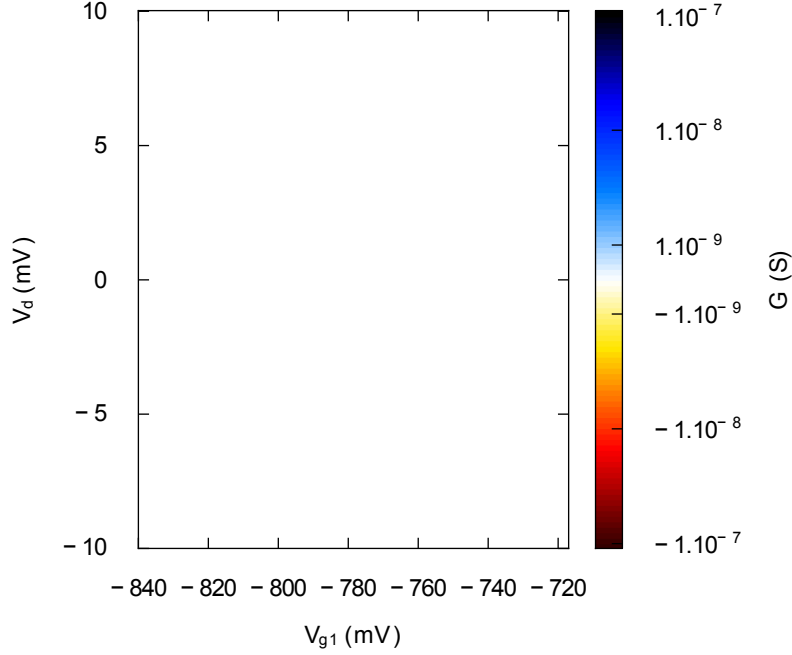


FIGURE 2.5 – Caractérisation de l'état  $P_3$  par mesure de transconductance ( $V_{g2} = 0,45$  V,  $V_{bg} = 10,95$  V,  $V_d^{AC} = 40$   $\mu$ eV,  $T = 50$  mK). On observe de nombreuses lignes, qui sont dues à la fluctuation de la densité d'états dans les contacts. Le premier état excité de  $P_3$  est délicat à déterminer.

### 2.3.1 Diagramme de stabilité

Pour décrire ce système, nous utiliserons le schéma en figure 2.6 a). Les états quantiques sont représentés par leurs potentiels électro-chimiques, qui dépendent de leur état de charge, ainsi que celui du puits de potentiel voisin. On note  $U(i, j)$  l'énergie totale du système où  $i$  (respectivement  $j$ ) vaut 0 s'il n'y a pas d'électron dans le puits de potentiel rattaché à la source (respectivement au drain), et  $g$  ou  $e$  si un électron occupe son niveau fondamental ou son premier état excité.<sup>2</sup> Alors le potentiel électro-chimique du niveau rattaché, par exemple, à la source est défini par  $\mu_s(i, j) = U(i, j) - U(0, j)$ .

À tension de polarisation  $V_d$  nulle, l'état de charge du système est donné par son diagramme de stabilité. Un exemple de ce diagramme a été superposé à la mesure de la conductance de l'échantillon GFF-P à faible  $V_d$ . L'état du système est indéterminé à la frontière des différents domaines (en pointillés sur la figure 2.6), il fluctue alors dans le temps. Quand les états de charge des deux puits de potentiels sont dégénérés, on parle alors de point triple. Au point triple les électrons peuvent passer à travers le système à tension  $V_d$  nulle de façon séquentielle, ce qui donne la figure expérimentale 2.6 b). Dans un système de deux puits quantiques pouvant chacun accepter au maximum un électron, il y a deux points triples. Le premier permet le transport d'un électron de la source au drain grâce à la suite d'états de charge  $(0, 0) \rightarrow (1, 0) \rightarrow (0, 1) \rightarrow (0, 0)$ , tandis que l'on peut considérer que l'on transporte une charge positive grâce au second point triple, à travers les états de charge suivants :

2. Dans le cadre plus général des boîtes quantiques, cette notation ne permettrait pas de rendre compte de l'occupation d'un niveau par plus d'un électron.

$(1, 1) \rightarrow (1, 0) \rightarrow (0, 1) \rightarrow (1, 1)$ . C'est pourquoi nous les qualifierons de point triple « électron » et de point triple « trou<sup>3</sup> » pour les distinguer.

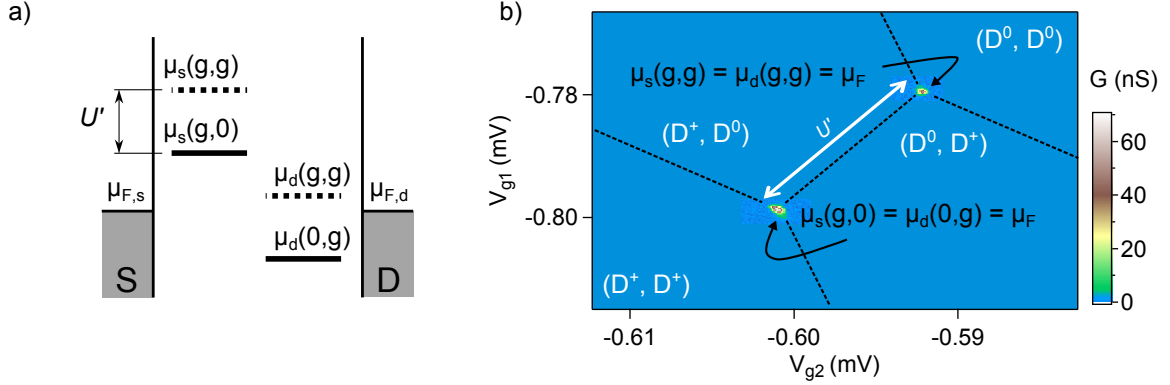


FIGURE 2.6 – a) Représentation schématique du système de deux dopants en série, situés entre des électrodes de source (S) et de drain (D). Le potentiel électrochimique de l'état électronique d'un dopant est représenté par un trait plein quand le donneur voisin est dans l'état  $D^+$  et par un trait pointillé quand son voisin est neutre ( $D^0$ ). b) La mesure de conductance d'un tel système à faible tension source-drain ( $V_d = 50 \mu\text{V}$ ) fait apparaître les deux points triples. Le diagramme de stabilité est superposé aux données, et l'état du système est indiqué entre parenthèses.

Les deux points triples sont séparés par l'énergie de couplage électrostatique  $U'$ . Il s'agit principalement de l'énergie de répulsion électrostatique entre deux électrons qui sont chacun dans leur puits quantique respectifs. En négligeant la déformation de la fonction d'onde d'un électron par le champ électrique créé par son voisin, on a :

$$U' \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{Si}R}. \quad (2.1)$$

Cela suppose que les électrons sont ponctuels, mais comme nous l'avons vu au chapitre 1 la fonction d'onde d'un électron autour d'un donneur est concentrée non loin du noyau du donneur, à une distance caractéristique de l'ordre du rayon de Bohr, tandis que deux donneurs faiblement couplés sont séparés d'au moins une dizaine de nanomètres (voir section 3.1.1). On néglige aussi la présence à quelques nanomètres d'un plan d'oxyde de silicium qui tend à diminuer la constante diélectrique effective du milieu.

### 2.3.2 Caractérisation à tension de polarisation finie

Pour décrire la caractéristique du système à plus forte tension de polarisation, nous nous plaçons dans le cas où  $|eV_d| < U'$ . Dans ce cas les deux triangles qui apparaissent ne se chevauchent pas, et nous pouvons considérer chaque point triple indépendamment. Pour plus de simplicité on notera alors  $\epsilon_s$  et  $\epsilon_d$  les potentiels électro-chimiques associés au point triple qui nous intéresse, i.e.  $\epsilon_s = \mu_s(g, 0)$  pour le point triple « électron », et  $\epsilon_s = \mu_s(g, g)$  pour

3. On place ce terme entre guillemets pour ne pas confondre avec les quasi-particules désignées usuellement par ce terme, correspondant à un manque d'électron dans la bande de valence.

le point triple « trou ». Dans la suite on notera  $\varepsilon = \varepsilon_s - \varepsilon_d$  le décalage en énergie des deux niveaux et  $\delta = (\varepsilon_s + \varepsilon_d)/2$  l'énergie moyenne des deux niveaux. On utilise une relation linéaire pour décrire l'effet des tensions de grille sur  $\varepsilon_s$  et  $\varepsilon_d$ ,

$$\begin{pmatrix} \Delta\varepsilon_d \\ \Delta\varepsilon_s \end{pmatrix} = \mathbf{M} \cdot \begin{pmatrix} \Delta V_{g1} \\ \Delta V_{g2} \end{pmatrix}.$$

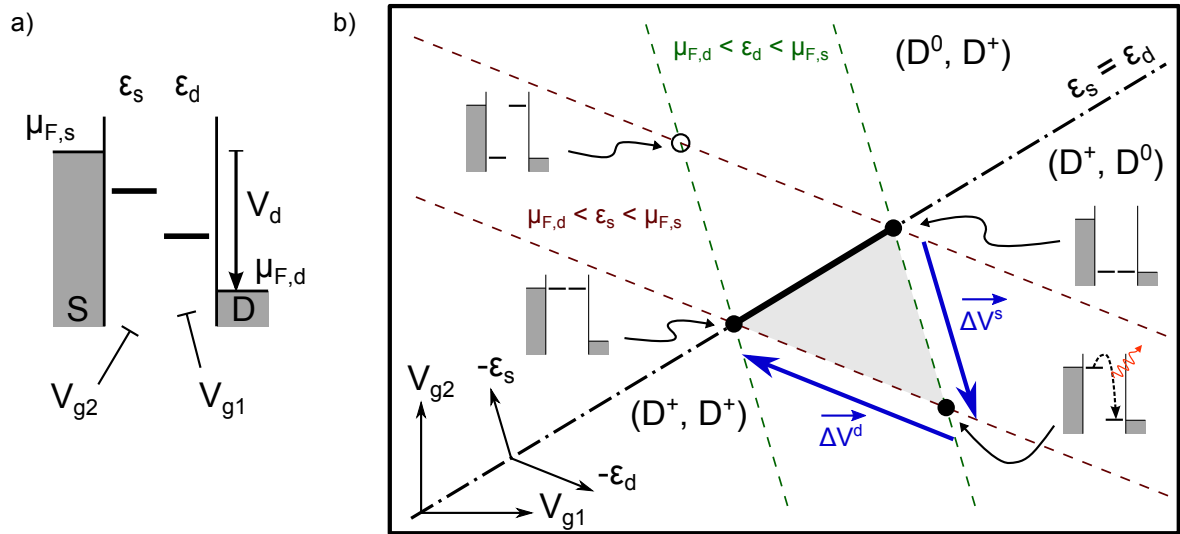


FIGURE 2.7 – État de charge d'un système de deux dopants autour d'un point triple lorsqu'une faible tension de polarisation  $V_d$  est appliquée ( $< U'/e$ ). Les états excités ne sont pas pris en compte. a) Représentation schématique du système. Les deux niveaux sont contrôlés par deux tensions de grille  $V_{g1}$  et  $V_{g2}$ . Une différence de potentiel  $V_d > 0$  est appliquée entre la source et le drain. b) Diagramme de stabilité du système autour de l'un des deux points triples. L'état de charge du double dopant est indiqué entre parenthèses. Un courant inélastique peut s'établir dans la partie grisée, tandis qu'un transport élastique des électrons ne peut s'effectuer que sur la ligne grasse.

La figure 2.7 représente les différentes régions du plan  $(V_{g1}, V_{g2})$  caractérisant la position relative des niveaux entre eux, et par rapport aux niveaux de Fermi  $\mu_{F,s}$  et  $\mu_{F,d}$  dans les contacts. Le transport séquentiel d'électrons à travers ces deux niveaux à température nulle n'est possible que pour deux situations. Si le transport est élastique, il ne peut se faire que lorsque les deux niveaux sont alignés et s'ils sont situés dans la fenêtre de polarisation, c'est-à-dire entre les deux niveaux de Fermi dans les contacts. Cette situation est représentée par la ligne grasse sur la figure. Si le transport est inélastique, les deux niveaux doivent se trouver dans la fenêtre de polarisation, sans quoi leur état de charge serait fixe. De plus, le second niveau doit alors être en-dessous du premier pour que le passage d'électrons du premier au second niveau se fasse avec émission d'énergie. En effet, à température nulle l'absorption d'énergie n'est pas possible. Ces conditions limitent la possibilité de transport inélastique seulement dans la région grisée de la figure.

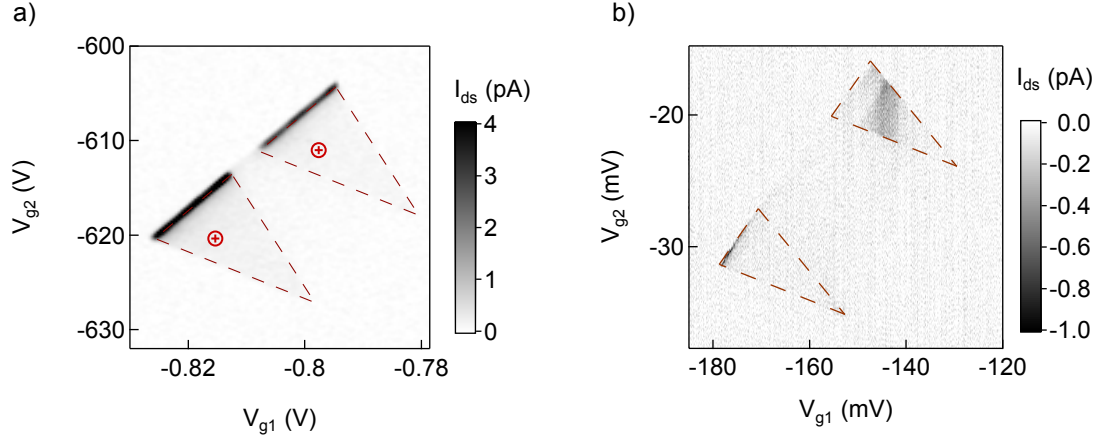


FIGURE 2.8 – Mesures des triangles associées au transport à travers deux dopants à très basse température ( $< 150$  mK). a) Échantillon GFF-P, avec  $V_d = 3,14$  mV et  $B = 2$  T. Les points triples mesurés à faible tension de polarisation sont indiqués par le symbole rouge. b) Échantillon GFF-As avec  $V_d = -2$  mV et  $B = 0,25$  T.

### 2.3.3 Caractérisations expérimentales de paires de dopants à faible $V_d$

La mesure à basse température des deux échantillons GFF-P et GFF-As font tous deux apparaître la signature d'un double dopant. La figure 2.8 montre les deux paires de triangles isolés mesurés pour chacun des échantillons. Dans le cas de GFF-P la correspondance avec le modèle décrit précédemment est remarquable. On distingue très nettement la base des triangles portant le courant élastique et un léger courant à l'intérieur du triangle correspondant au courant inélastique. La paire de triangles de l'échantillon GFF-As n'est pas aussi apparente, seul l'un des deux triangles possède une base visible, ce que nous tenterons d'expliquer au chapitre 4. La mesure à plus forte polarisation (figure 2.18), qui fait apparaître nettement les formes triangulaires, nous permet de confirmer la détermination en pointillés des frontières.

Ces mesures permettent de connaître la matrice  $\mathbf{M}$  de couplage électrostatique aux grilles. Pour déterminer cette relation de linéarité, on utilise les deux vecteurs  $\overrightarrow{\Delta V^s}$  et  $\overrightarrow{\Delta V^d}$  indiqués sur la figure 2.7, et l'on a :

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{1}{|e|V_d} \cdot \begin{pmatrix} \Delta V_{g1}^d & \Delta V_{g1}^s \\ \Delta V_{g2}^d & \Delta V_{g2}^s \end{pmatrix}.$$

Le tableau 2.1 rassemble les valeurs mesurées pour les deux paires de triangles. On remarque que les couplages sont très inégaux, ce qui traduit le placement aléatoire des dopants par rapport aux grilles. Par exemple, le dopant côté source de l'échantillon GFF-P est également couplé aux deux grilles, ce qui suggère que ce dopant est bien centré entre les deux grilles. L'autre dopant du couple est contrôlé de façon préférentielle par la grille n°1. Cette différence des rapports de couplage avec les deux grilles rend possible le contrôle indépendant des niveaux.

Connaissant cette matrice de conversion, nous pouvons d'ores et déjà l'utiliser pour calculer l'énergie de répulsion coulombienne entre les deux dopants. La séparation entre les deux

points triples (figure 2.6) ou entre les deux triangles (figure 2.8) correspond à  $\delta = U'$  et  $\varepsilon = 0$ .<sup>4</sup> Ces deux énergies de couplage électrostatique sont relativement élevées en comparaison avec d'autres valeurs trouvées dans la littérature, dans le cas d'îlots de Coulomb double. Les valeurs les plus élevées trouvées dans la littérature ont été rassemblées dans le tableau 2.2.

En utilisant la relation 2.1, nous pouvons estimer la distance entre les deux dopants, que nous noterons  $R'$ . Les valeurs obtenues ont été rassemblées dans le tableau 2.1.

Échantillon	$\mathbf{M}$	$U'$	$R'$
GFF-P (S952 W09 D07 DLPWPN_6)	$-e \begin{pmatrix} 0.151 & 0.147 \\ 0.072 & 0.303 \end{pmatrix}$	4 meV	30 nm
GFF-As (S952 W10 D10 DLPWPN_6)	$-e \begin{pmatrix} 0.036 & 0.239 \\ 0.091 & 0.208 \end{pmatrix}$	4.5 meV	25 nm

TABLE 2.1 – Récapitulatif des couplages des dopants aux grilles, de l'énergie de couplage électrostatique et de la séparation entre dopants correspondante.

Système	$U'$ (meV)	référence
Nanotubes de carbone	1,3	[65]
Hétérostructures de GaAs/AlGaAs	0,43	[66]
Hétérostructures de Si/SiGe	1,3 ; 0,5	[24] ; [23]
Silicium	1,3	[19]
Silicium (dont un îlot non-intentionnel)	1,7	[67]

TABLE 2.2 – Récapitulatif des valeurs de  $U'$  pour des boîtes quantiques doubles réalisées dans différents matériaux.

### 2.3.3.1 Modification des couplages tunnel avec la tension de substrat

Les réservoirs de source et de drain ne sont pas complètement figés. Certes, le dopage du silicium ne peut pas être modifié, mais un gaz d'électron peut être induit par des tensions de grille positives, et modifier ainsi l'étendue de ces électrodes. Dans le cas de l'échantillon GFF-P, le couple de dopants apparaît pour une tension de substrat élevée. Pour une telle tension, le rôle du gaz bidimensionnel qui apparaît à l'interface entre le silicium et l'oxyde enterré est important, au point que le transistor est à l'état ouvert lorsque les grilles supérieures sont mises à la masse (figure 2.3). Les tensions de grilles supérieures négatives permettent de couper ce gaz bidimensionnel, et ainsi réaliser le transport à travers des états uniques.

À tension de substrat fixe, le couplage tunnel des dopants aux grilles dépend des tensions de grilles supérieures. Sur la figure 2.4 a), on peut voir que le couple de dopants est dans l'alignement parfait avec une ligne de courant qui apparaît pour  $V_{g2} > -0,5$  V. Cette ligne correspond au passage direct des électrons à travers un seul des deux dopants de la paire.

En faisant varier la tension de substrat, le couplage des deux dopants autour des points triples change aussi. La figure 2.9 montre l'allure des points triples pour des tensions de substrat différentes. Pour des tensions trop faibles le couple de dopants n'est pas apparent,

4. À noter que pour  $|V_d| \geq U'/|e|$ , les deux triangles se chevauchent.

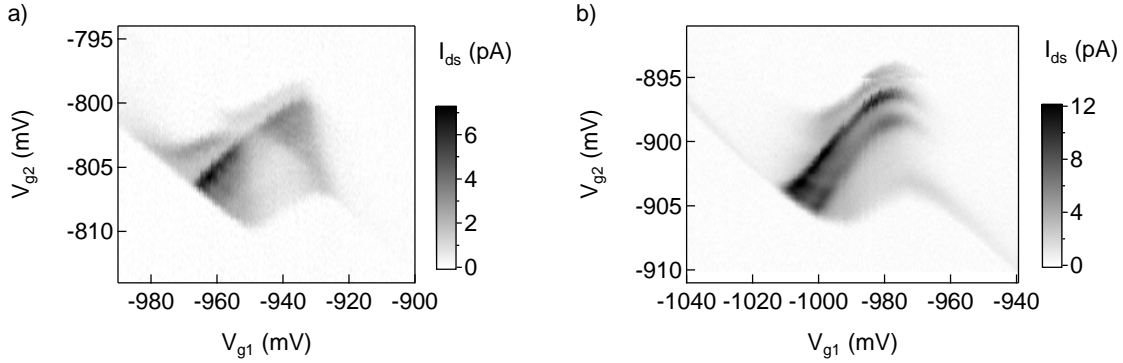


FIGURE 2.9 – Courant au niveau des points triple des deux dopants de l'échantillon GFF-P pour différentes tensions de substrat. a) Pour  $V_{bg} = 14$  V un faible courant traduit le passage des électrons à travers une seul dopant de la paire. On note aussi la présence de co-tunneling entre les deux triangles b) Pour une tension  $V_{bg} = 15$  V le co-tunneling est devenu tellement important qu'on ne peut plus distinguer les deux triangles.

un des couplages tunnel est trop faible et limite le courant en-dessous d'une valeur accessible à l'expérience. Au contraire, pour des tensions de substrat trop fortes, l'un des deux dopants permet le transport direct de la source au drain, au point de déformer considérablement les deux triangles.

Pour l'échantillon GFF-As la situation est différente car le couple de dopant apparaît avec des tensions de substrat légèrement négatives, dans une plage assez réduite comprise entre  $-0,5$  V et  $-2$  V.

On voit ici l'intérêt de disposer de trois grilles pour contrôler deux dopants ; deux grilles sont essentielles pour contrôler les deux niveaux indépendamment et obtenir les triangles caractéristiques du système. La troisième grille, le substrat de silicium, est impérative pour ajuster les couplages. Dans la suite du manuscrit nous garderons la tension de substrat fixe à une valeur qui permet d'avoir une signature claire des deux niveaux en série.

## 2.4 Spectroscopie des niveaux électroniques des dopants

On va maintenant considérer les états excités des dopants. Comme nous l'avons vu au chapitre 1, les dopants phosphore et arsenic possèdent l'intéressante propriété d'induire dans le silicium un premier état fondamental électronique non-dégénéré, séparé d'au moins une dizaine de milliélectron-volts du premier état excité. Cet écart relativement élevé par rapport aux boîtes quantiques usuelles en silicium est indéniablement un atout pour la manipulation des niveaux (voir chapitre 3 et 4). La détermination des niveaux d'un dopant contacté n'est pas toujours possible, à cause des contacts ou des perturbations par l'environnement (voir section 1.2.2). Le système de deux dopants en série permet d'effectuer cette spectroscopie en s'affranchissant de certaines perturbations de l'environnement.

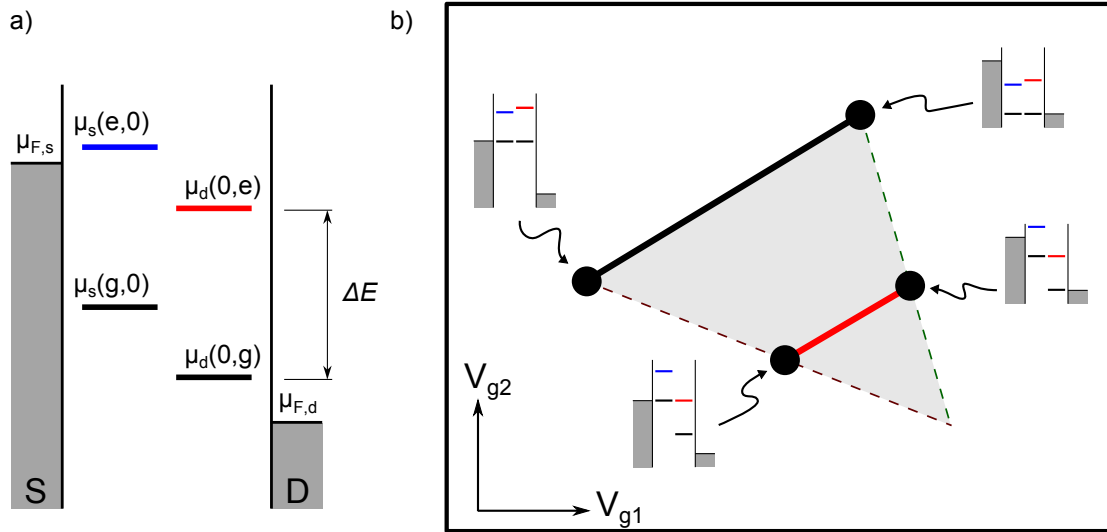


FIGURE 2.10 – Transport à travers un système de deux dopants. On ne considère ici que les transitions n’impliquant qu’un seul électron dans le système. a) Représentation schématique des niveaux des dopants. Chaque dopant est représenté par son état fondamental et son premier état excité. b) Représentation du motif de courant associé à ce système. Les lignes grasses correspondent au courant élastique, et le fond gris représente le courant inélastique.

### 2.4.1 Spectroscopie des deux dopants

Quand l’énergie  $|eV_d|$  est supérieure à l’énergie de l’état excité de l’un des dopants, le transport séquentiel d’électrons à travers cet état excité devient possible. La situation est schématisée en figure 2.10. Le transport élastique d’électron intervient lorsque deux niveaux s’alignent. Cependant il faut toujours que les états fondamentaux soient d’énergie décroissante de la source au drain, pour empêcher la situation bloquante où un électron est piégé sur le premier dopant.

On souhaite utiliser ce système à deux dopants pour effectuer la spectroscopie d’un seul des dopants. Le mécanisme qui nous intéresse est le passage élastique des électrons par l’état fondamental du premier dopant et l’état excité du second. En d’autres termes, on se sert du premier dopant comme d’un filtre en énergie pour les électrons de la source afin de sonder le spectre du second dopant. Un état excité se traduit alors par une ligne de courant parallèle à la base des triangles (figure 2.10).

La figure 2.16 montre la mesure du courant à travers les deux dopants de l’échantillon GFF-P pour  $V_d = 16$  mV. Les deux triangles sont imbriqués l’un dans l’autre car l’énergie  $|eV_d|$  est maintenant plus grande que  $U'$ . On voit nettement une ligne de courant parallèle à la base du triangle, qui correspond à un état excité du premier dopant. On représente la spectroscopie du dopant en réalisant une coupe dans cette carte de courant (figure 2.16). Le courant est tracé en fonction de  $\varepsilon$ , ce qui permet une lecture directe de l’énergie de ce état excité.<sup>5</sup> Pour différentes tensions  $V_d$ , le courant associé au premier état excité apparaît sensiblement à une même énergie  $\Delta E = 9,5 \text{ meV} \pm 0,5 \text{ meV}$ , avec une légère diminution quand la tension de drain augmente. Cela montre que l’état excité du dopant est sensible au

5. Pour convertir les tensions de grilles en énergies, on utilise la relation linéaire donnée dans le tableau 2.1



champ électrique induit par la tension source-drain. Au-delà du premier état excité, il n'est plus possible de distinguer des lignes de courant bien séparées.

La résonance associée à cet état excité possède une forme lorentzienne (figure 2.16), de largeur  $\tilde{\Gamma} = 670 \mu\text{eV}$ . Cette largeur correspond à un état possédant une durée de vie approximative de  $\hbar/\tilde{\Gamma} \approx 10^{-12}$  s. On mesure alors soit i) le temps de relaxation de l'état excité du second dopant, ou ii) le couplage tunnel de l'état excité du second dopant au drain.

Entre la base du triangle et la ligne de courant associée au premier état excité, on remarque la présence d'une autre ligne, courbe, d'intensité légèrement plus faible. On écarte la possibilité qu'il s'agisse d'un état excité du dopant car elle n'est pas parallèle à la base du triangle, et contrairement aux autres lignes de courant, n'est pas rectiligne. Il peut s'agir d'une augmentation du courant inélastique dû à l'environnement (voir section 2.5.1).

Lorsque l'on inverse la tension  $V_d$ , on vient alors sonder l'autre dopant. Le résultat de cette mesure est donnée en figure 2.17. Les triangles sont un peu perturbés à cette polarité, mais nous pouvons toujours distinguer les bords des triangles et la ligne associée au premier état excité. On retrouve une fois de plus une ligne qui n'est pas parallèle à la base du triangle, qui ne correspond donc pas à la signature d'un état excité. Le spectre de ce dopant montre que le premier état excité se trouve à  $\Delta E = 9 \text{ meV} \pm 0,2 \text{ meV}$ .

La mesure de l'échantillon GFF-As à forte tension  $V_d$  est donnée en figure 2.18. La séparation entre les deux premiers niveaux est de  $7,4 \text{ meV}$ , ce qui représente une réduction d'un facteur trois de l'écart entre les deux premiers niveaux d'un dopant arsenic dans du silicium massif. La proximité du dopant à l'interface permet d'expliquer une telle réduction (voir section suivante). Bien que réduite, cette séparation reste encore grande, supérieure aux précédentes mesures de ce type [48], qui ne dépassent pas  $5 \text{ meV}$ . Pour l'autre polarité de  $V_d$ , nous n'avons pas pu mesurer l'énergie de premier état excité car le courant était trop faible.

## 2.4.2 Visibilité des lignes de courant

L'intensité des lignes de courant dans les triangles dépend des différents taux tunnel (entre les contacts et les dopants, et entre les niveaux des dopants). Ainsi, il est possible qu'un état excité ne soit pas apparent en effectuant la spectroscopie à deux dopants précédente, si les taux tunnel sont trop faibles. Le cas du spin est un exemple de ce problème. Soumis à un champ magnétique, l'état fondamental d'un dopant se sépare en deux, pour les deux états de spin, par l'énergie Zeeman  $g\mu_B B$ . C'est le cas par exemple lors de la spectroscopie de la figure 2.16, qui a été effectuée avec un champ magnétique de 2 teslas. Cependant on ne voit pas d'état pour  $\varepsilon \approx 2 \times 58 \mu\text{eV} \cdot T^{-1} \times 2T = 232 \mu\text{eV}$ . En effet, pour avoir du courant à travers les états alignés  $|g_1 \downarrow\rangle$  et  $|g_2 \uparrow\rangle$ , il faut que le spin de l'électron se retourne lors du passage tunnel entre les deux dopants (figure 2.11). Ce passage d'un dopant à l'autre implique l'interaction avec une autre particule pour respecter le principe de conservation du moment cinétique, et ne peut donc pas s'effectuer de façon élastique. On ne peut donc pas détecter cet état excité avec la spectroscopie à deux dopants.

Le problème ne se pose *a priori* pas pour les 6 premiers états excités des dopants dans le silicium. Ces 6 premiers états sont tous des états  $1s$ , qui portent le même moment cinétique. Il n'y a pas d'incompatibilité majeure pour observer le passage tunnel d'un électron entre ces états. Il se pourrait que l'on voie dans la spectroscopie précédente uniquement les états excités qui sont associés à un taux tunnel suffisamment grand. Cependant, la bonne correspondance

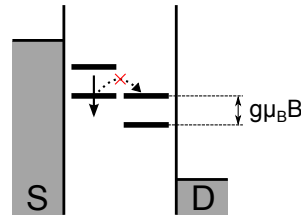


FIGURE 2.11 – La ligne de courant associé à l'état  $|g_2 \uparrow\rangle$  n'est pas visible car le retournement du spin lors d'un passage tunnel n'est pas possible.

entre les deux valeurs mesurées pour le premier état excité visible, et la valeur connue dans du silicium massif nous conforte dans l'idée que la première ligne observée est effectivement le premier état excité du dopant.

### 2.4.3 Sensibilité de la levée de dégénérescence de vallée à l'environnement

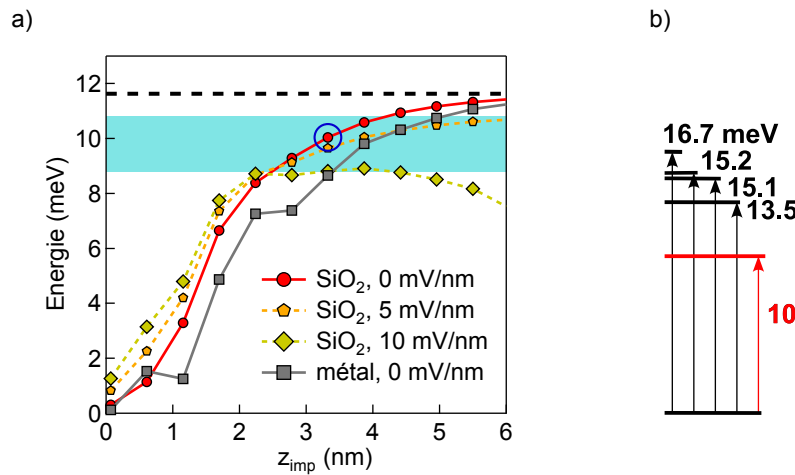


FIGURE 2.12 – a) Calcul de la séparation entre les deux premiers états d'un dopant phosphore en fonction de sa distance  $z_{\text{imp}}$  à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> (ou d'un métal), et du champ électrique. Le tireté indique l'écart en énergie pour un dopant phosphore isolé, dans du silicium massif. La région bleutée représente l'intervalle comprenant les valeurs mesurées dans notre système. b) Représentation schématique des six premiers niveaux d'un dopant phosphore situé à 3,5 nm de l'interface, sans champ électrique présent (point entouré de la figure a).

Nous avons vu dans le premier chapitre que la différence d'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité d'un dopant isolé provient de la levée de dégénérescence de la bande de conduction du silicium. Pour le phosphore, cet écart de 11,7 meV [46] est légèrement supérieur à la valeur mesurée précédemment, comprise entre 8,8 et 10,8 meV. Cet écart s'explique par la sensibilité de cette levée de dégénérescence de vallée à toute perturbation extérieure.

Pour étudier cet effet de façon plus qualitative Yann-Michel Niquet et Manuel Cobian du CEA/SPMM ont calculé numériquement le spectre d'un dopant phosphore en utilisant un modèle de liaisons fortes  $sp^3d^5s^*$  [68]. Le dopant est placé dans un film de silicium de 20 nm d'épaisseur qui est entouré par du SiO<sub>2</sub>. Un champ électrique vertical de différentes intensité a été simulé. La différence d'énergie entre les deux premiers états orbitaux du dopant est représenté en figure 2.12 en fonction de la distance du dopant à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>.

Cette simulation montre que la levée de dégénérescence de vallée d'un dopant est fortement réduite si la distance qui le sépare d'une interface avec un diélectrique est comparable à son rayon de Bohr ( $\approx 1,8$  nm, section 1.2.1.1). C'est l'effet du confinement quantique qui éloigne la fonction d'onde de l'interface. Le poids de la fonction d'onde de l'électron étant alors plus faible au niveau du noyau du dopant, la levée de dégénérescence de vallée diminue. L'ajout d'un champ électrique peut accentuer cet effet s'il repousse l'électron du noyau (il peut y avoir compétition entre le confinement électrique et la tension de substrat attractive). Dans notre cas, le champ électrique au niveau des dopants est mal connu, mais il est manifestement inférieur à 10 mV/nm, autrement nous ne pourrions pas mesurer un  $\Delta E$  aussi élevé.

Pour étudier l'effet de la présence de contacts de source et de drain sur la levée de dégénérescence de vallée, le calcul précédent a été effectué en remplaçant le Si/SiO<sub>2</sub> avoisinant par un métal ( $\varepsilon \sim \infty$ ). Dans ce cas, on observe aussi une réduction de la dégénérescence de vallée quand le dopant est proche de l'interface. Les taux tunnels relativement faibles des dopants aux électrodes, inférieurs au gigahertz (voir section 3.3.2.2), permettent d'estimer que la distance des contacts aux dopants est grande par rapport à leur rayon de Bohr. Si les dopants étaient très proches des contacts, ils seraient complètement hybridés à eux. Cela permet d'estimer que la réduction de la levée de dégénérescence de vallée due aux contacts est négligeable d'après les simulations (figure 2.12).

D'une façon générale, il est pratiquement inévitable d'avoir une réduction de l'écart en énergie entre les deux premiers niveaux orbitaux des dopants lorsque ceux-ci sont introduits dans une nanostructure. Nous mesurons un écart proche de 10 meV, ce qui suggère que les deux dopants sont séparés d'au moins 3 nm de l'interface avec l'oxyde enterré, et plongés dans un champ électrique d'une intensité inférieure à 10 mV/nm.

On représente en figure 2.12 les six premiers états d'un dopant phosphore situé à 3,5 nm de l'interface avec l'oxyde enterré, à champ électrique nul, qui donne un écart entre les deux premiers états compatible avec la valeur mesurée. Sur cet exemple, le second état orbital n'est pas dégénéré, contrairement au cas du dopant isolé dans un cristal massif. Si les états suivants ont la même largeur spectrale que le premier état excité, on comprend que l'on ne puisse plus les distinguer dans la mesure expérimentale.

#### 2.4.4 Effet du champ magnétique

Le champ magnétique a un effet notable sur la caractéristique à polarisation finie des deux dopants de l'échantillon GFF-P. Deux différences principales existent entre les caractéristiques avec et sans champ magnétique. À champ magnétique appliqué nul, la base des triangles est perturbée par des lignes de courant (figure 2.13). Ces lignes disparaissent dès que le champ magnétique dépasse 0,6 T. En certains endroits, ces deux lignes sont colinéaires à la base des triangles. À faible tension de polarisation  $V_d$  on ne voit que deux lignes parallèles, ce qui peut porter à confusion car on a l'impression que la base des triangles est en réalité un état excité. Ces lignes ne peuvent pas être expliquées par un modèle simple de deux niveaux en série. On constate que ces perturbations semblent former un anti-croisement, qui est caractéristique de deux niveaux couplés. On peut alors penser qu'il s'agit du couplage des deux dopants avec d'autres états dans l'environnement.

Le second effet du champ magnétique sur le système concerne le courant inélastique. Le niveau moyen de courant inélastique entre les deux premières résonances dépend fortement

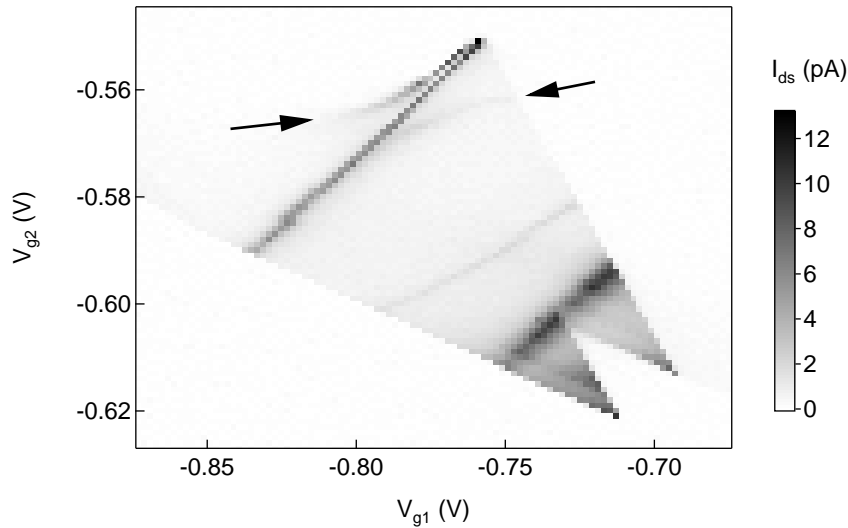


FIGURE 2.13 – Courant  $I_{ds}$  en fonction des deux grilles pour  $V_d = 14\text{ mV}$  ( $V_{bg} = 11,5\text{ V}$ ,  $T = 150\text{ mK}$ ). Le champ magnétique appliqué est nul. Un courant mesurable est présent proche de la base du triangle, sous la forme de deux lignes de courant (flèches) qui semblent appartenir à un même anti-croisement.

du champ magnétique : sans champ magnétique appliqué le courant inélastique est d'environ  $1\text{ pA}$ , et pour des champs supérieurs à  $0,6\text{ T}$ , il chute à environ  $0,1\text{ pA}$ . Cette dépendance en champ magnétique est encore mal comprise, mais elle semble être liée aux lignes parasites décrites précédemment car ces deux phénomènes évoluent simultanément en champ magnétique.

Il semble que le champ magnétique permet de modifier le couplage des états électronique des dopants. Dans ce manuscrit, le champ magnétique est utilisé comme un paramètre de contrôle supplémentaire sur le système, de la même façon que la tension de substrat par exemple. Il est difficile de préciser les couplages sur lesquels agit le champ magnétique, mais l'effet sur les caractéristiques que l'on mesure est sans ambiguïté. Ainsi, on a souvent mesuré l'échantillon GFF-P avec un champ magnétique non nul pour diminuer le courant inélastique et se débarrasser des lignes de courant parasites.

Avec l'échantillon GFF-As, la largeur de la base des triangles varie avec le champ magnétique, sans que l'on puisse en extraire une variation particulière. On s'est donc servi du champ magnétique pour obtenir la résonance la plus fine possible, afin de réaliser les mesures présentées dans le chapitre 4.

## 2.5 Transport quantique

### 2.5.1 Processus inélastiques

On distingue deux sortes de courants qui traversent la paire de dopant : le courant élastique et le courant inélastique. La spectroscopie des deux dopants repose essentiellement sur le courant élastique, c'est pourquoi il ne faut pas un courant inélastique trop élevé pour pouvoir

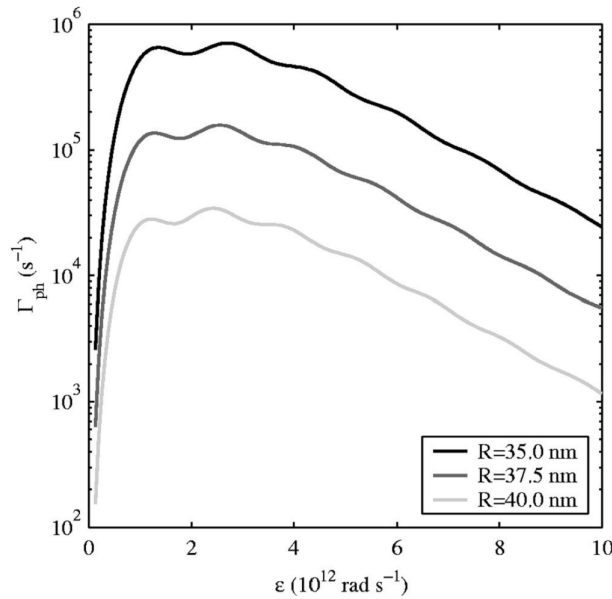


FIGURE 2.14 – Taux de passage inélastique d'un électron entre deux donneur, en fonction de l'écart en énergie  $\varepsilon$  des deux états électroniques ( $10^6$  Hz  $\cong$  0,16 pA,  $2 \cdot 10^{12}$  rad.s $^{-1}$   $\cong$  1,3 meV). L'énergie  $\varepsilon$  est relaxée grâce à l'émission d'un phonon. Le résultat ne dépend que de la distance inter-donneur R. Figure extraite de [70].

détecter les niveaux électroniques d'un dopant. Les mesures précédentes montrent que le courant inélastique moyen entre les deux premiers états des échantillons GFF-P et GFF-As est très faible, il n'est même pas visible pour l'échantillon GFF-As (figure 2.18).

Lors d'un processus inélastique l'électron tunnelle sur un niveau dont l'énergie est plus basse que son niveau d'origine. Il sera donc contraint de trouver un état dans l'environnement lui permettant de dissiper cette énergie excédentaire. Le niveau de courant inélastique est directement proportionnel à la densité d'états disponibles dans à cette énergie [69]. Les phonons apparaissent comme la principale source de relaxation dans le silicium. Le calcul du couplage d'un électron sur deux donneurs au bain de photons a été effectué par Barrett et Milburn (figure 2.14). Les maxima locaux du taux inélastique en fonction de  $\varepsilon$  proviennent du meilleur couplage de l'électron aux photons lorsque la longueur d'onde des phonons coïncide avec la distance entre les donneurs. Malheureusement nous n'observons pas cette périodicité dans nos données. L'échantillon GFF-P présente un courant inélastique de 0,1 pA à 1 pA. Ce courant est compatible avec la courbe de la figure 2.14, pour  $R \lesssim 35$  nm.

Les données expérimentales montrent que le courant inélastique croît avec  $\varepsilon$ . En effet, plus la différence en énergie  $\varepsilon$  est élevée, plus les possibilités de relaxation sont nombreuses. Par exemple, dès que  $\varepsilon$  dépasse l'énergie du premier état excité, les électrons peuvent passer par effet tunnel inélastique sur le niveau fondamental du second dopant, ou sur son état excité. On peut donc expliquer pourquoi le courant inélastique ne présente pas un maximum en  $\varepsilon$ , comme on le voit sur la figure 2.14.

Pour finir, nous revenons un instant sur la ligne courbe observée sur la figure 2.16. Nous avons vu qu'elle ne correspondait pas à la signature d'un état excité, qui donnerait alors une

ligne droite. Il est probable que cette ligne corresponde à une augmentation ponctuelle du courant inélastique due à la présence d'un élément de l'environnement qui offre une nouvelle voie pour relaxer l'énergie des électrons. On peut alors imaginer qu'il s'agisse d'un système à deux niveaux, comme par exemple un autre couple de dopants, qui ne serait pas couplés aux deux électrodes de source et de drain.

### 2.5.2 Corrections dues aux interactions électrostatiques

L'interaction entre le potentiel électrostatique induit par un donneur ionisé et les électrons de conduction des électrodes de source et drain peut, dans certaines conditions, donner lieu à une renormalisation des taux tunnels. Ce phénomène, connu sur le terme de *fermi edge singularity* se traduit par une augmentation du taux tunnel au voisinage du niveau de Fermi. Cet effet, qui a été observé et décrit théoriquement pour rendre compte d'un pic d'absorption des rayons X par les métaux [71], possède un équivalent en transport électronique à travers des impuretés [72]. L'évolution du taux tunnel d'un niveau suit une loi de puissance en fonction de l'écart en énergie  $\xi$  du niveau localisé avec le niveau de Fermi dans le contact. Cette loi de puissance est de la forme :

$$\Gamma(\xi) = \Gamma^0 \left( \frac{D}{\xi} \right)^\alpha,$$

où  $D$  et  $\alpha$  sont des constantes.

Il y a seulement quelques confirmations expérimentales de ce phénomène [73]. Nous présentons ici des données qui tendent à montrer que cet effet est visible avec l'échantillon GFF-P, pour une polarité de  $V_d$  négative (figure 2.15). Lorsque les niveaux des dopants sont alignés avec le niveau de Fermi dans le drain, on observe une augmentation du courant. Cet effet pourrait s'expliquer aussi par une réduction de la barrière tunnel de source lorsque  $\xi_s$  augmente. Le graphique c de la figure 2.15 tend à montrer que ce n'est pas le cas, car les augmentation de courant ne dépendent pas seulement de  $\xi_s$ .

Pour observer cet effet, il ne faut éviter d'avoir  $k_F d \gg 1$  [72], où  $d$  est la distance entre le niveau et l'électrode. Dans notre cas, l'utilisation de contacts en silicium fortement dopé est un avantage, car elle permet d'avoir une petite énergie de Fermi. Enfin, l'écrantage du potentiel électrostatique par la seconde électrode est néfaste à ce phénomène. Un système de deux niveaux en série à l'avantage de présenter une distance source-drain plus élevé que dans le cas d'un niveau unique.

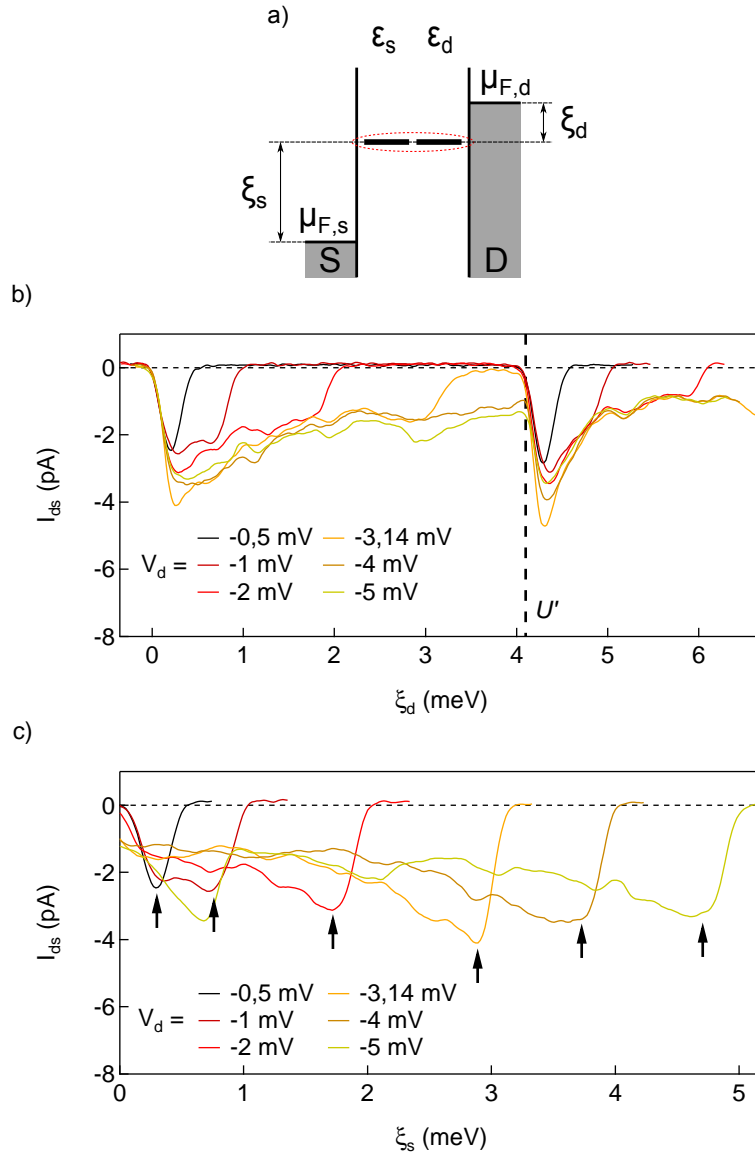


FIGURE 2.15 – a) Description de la mesure : les deux niveaux restent alignés, leur position est mesurée par rapport aux niveaux de Fermi dans les contacts. b) Courant à travers les niveaux alignés des deux dopants pour différentes tensions  $V_d$ . Le courant est représenté en fonction de  $\xi_d$ , l'écart entre les niveaux des dopants et le niveau de Fermi dans le drain. On observe un renforcement du courant à la proximité du niveau de Fermi dans le drain. c) Les mêmes données sont représentées par rapport à  $\xi_s$ , les augmentations du courant en  $\xi_d = 0$  sont indiquées par les flèches. Il n'y a aucune structure particulière en  $\xi_s = 0$ .

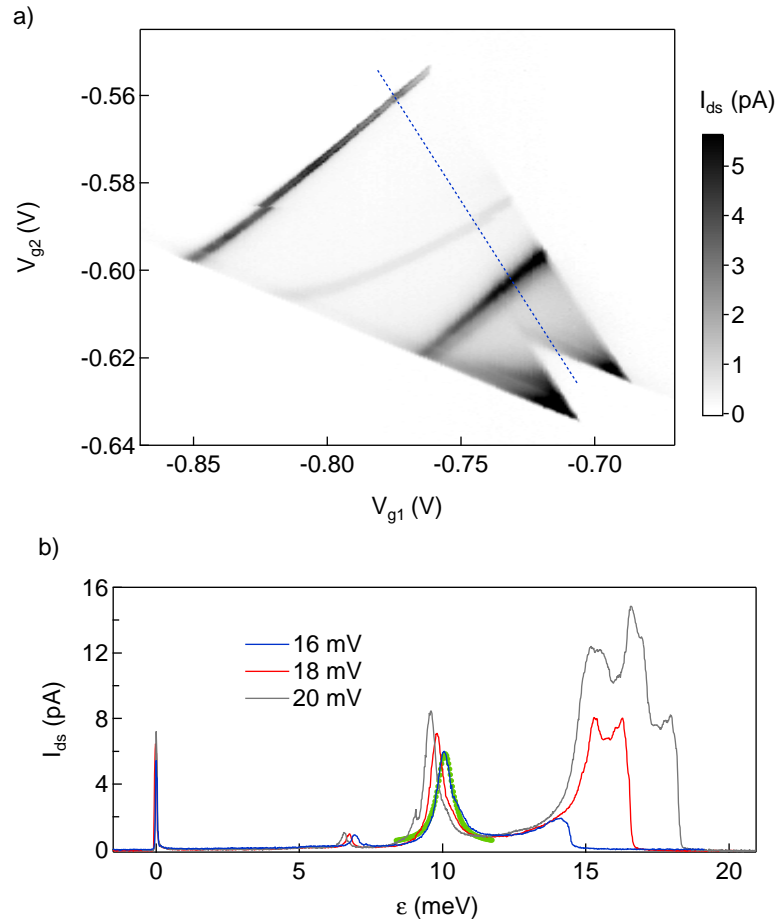


FIGURE 2.16 – a) Courant  $I_{ds}$  en fonction des deux grilles pour  $V_d = 16$  mV (Échantillon GFF-P,  $T = 150$  mK). Au-dessus de la base des triangles, une première ligne est visible mais n'est pas parallèle à la base des triangles. La seconde résonance visible, plus large, correspond au premier état excité. La base du triangle est artificiellement élargie par le signal d'une détection synchrone envoyé sur le drain. b) Coupes dans les triangles réalisées pour différentes polarités (celle à 16 mV est indiquée par la ligne en pointillés sur la figure a). Le premier état excité décrit précédemment est situé à  $\epsilon = 10$  meV  $\pm$  0,5 meV. La résonance associée est reproduite par une fonction lorentzienne (en vert).



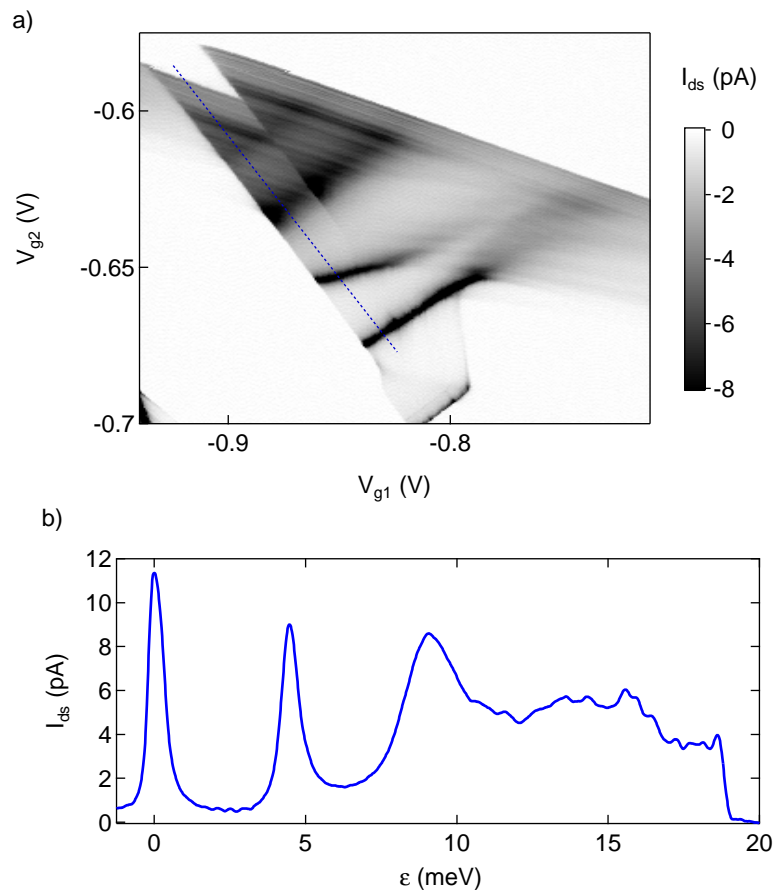


FIGURE 2.17 – a) Courant  $I_{ds}$  en fonction des deux grilles pour  $V_d = -20$  mV (échantillon GFF-P,  $T = 150$  mK). On attribue la résonance du premier état excité à la seconde ligne au-dessus de la base. b) Coupe extraite de la figure précédente (pointillés). Le premier état excité décrit précédemment est situé à  $\epsilon = 9$  meV.

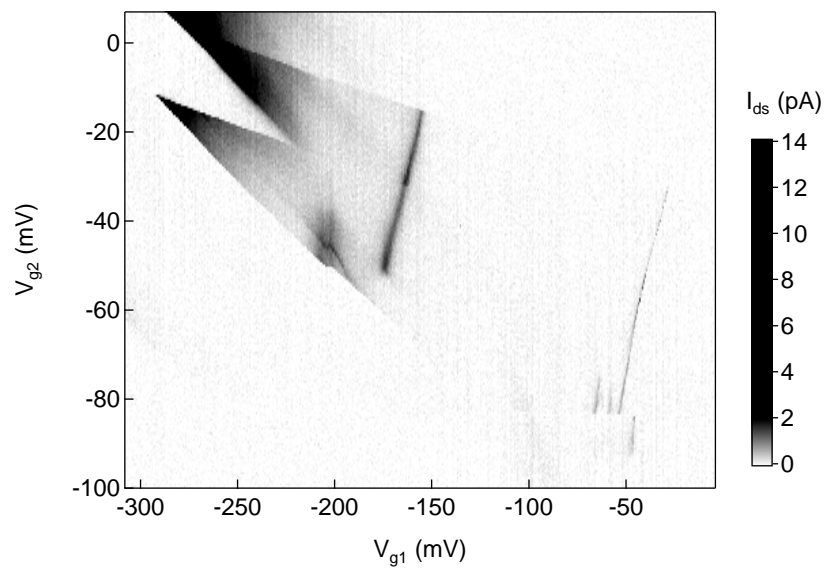


FIGURE 2.18 – Courant  $I_{ds}$  en fonction des deux grilles pour  $V_d = 15$  mV (échantillon GFF-As,  $T = 17$  mK). Le premier état excité correspond à  $\Delta E = 7,4$  meV  $\pm$  0,4 meV.

## Chapitre 3

# Dynamique d'un système à deux dopants

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Couplage tunnel de l'orbitale d'un dopant . . . . .</b>	<b>56</b>
3.1.1	Couplage tunnel des orbitales électroniques de deux dopants . . . . .	56
3.1.2	Couplage des niveaux électroniques des dopants aux électrodes . . . . .	59
<b>3.2</b>	<b>Modélisation de la dynamique du système . . . . .</b>	<b>60</b>
3.2.1	Pompage d'électrons . . . . .	60
3.2.2	Équation maîtresse . . . . .	61
3.2.3	Transition Landau-Zener . . . . .	63
<b>3.3</b>	<b>Étude du système en régime dynamique . . . . .</b>	<b>64</b>
3.3.1	Régime adiabatique . . . . .	64
3.3.2	Régime non-adiabatique . . . . .	65

---

Dans le chapitre précédent nous avons vu qu'il est possible de contacter deux dopants en série. La mesure en transport à tension source-drain finie permet d'obtenir des informations sur le couplage électrostatique et sur le spectre des dopants. Dans ce chapitre nous allons étudier ce même système, en se plaçant dans un régime dynamique. En faisant évoluer les tensions de grilles de façon périodique, on est en mesure de faire fonctionner le système comme une pompe à électrons, c'est-à-dire que l'on produit un courant continu lorsque la tension source-drain est nulle. En étudiant le courant généré, nous verrons que l'on peut sonder les différents couplages tunnel du système.

### 3.1 Couplage tunnel de l'orbitale d'un dopant

Dans le système à deux dopants présenté précédemment, on distingue deux types de couplages tunnel. Le couplage entre les orbitales de deux dopants adjacents est un couplage entre deux états discrets qui peut être calculé en connaissant les fonctions d'ondes de ces états. Le second couplage, entre l'orbitale d'un dopant et une électrode de contact, permet le passage d'un électron d'un continuum à un état discret.

#### 3.1.1 Couplage tunnel des orbitales électroniques de deux dopants

Lorsque les fonctions d'ondes de deux états discrets se recouvrent, les électrons ont la possibilité de passer d'un état à l'autre par effet tunnel. Ce couplage tunnel se traduit par une hybridation des états, qui permet à un électron d'être délocalisé sur les deux dopants. On appelle  $|L\rangle$  et  $|R\rangle$  les états des dopants gauche (*left*) et droite (*right*), ayant pour énergie  $E_L$  et  $E_R$ , qui sont états propres de l'hamiltonien sans couplage tunnel  $H_0$ . On note  $\varepsilon = E_L - E_R$  la différence d'énergie de ces deux niveaux. Le couplage entre ces deux états est caractérisé par l'amplitude tunnel  $\mathcal{T}$ , de telle sorte que l'hamiltonien effectif total  $H$  s'écrive [74] :

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon/2 & \mathcal{T} \\ \mathcal{T}^* & -\varepsilon/2 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Les états propres de  $H$ , notés  $|-\rangle$  et  $|+\rangle$ , sont représentés sur la figure 3.1 en fonction du paramètre  $x = \varepsilon/|\mathcal{T}|$ . Le couplage de  $|L\rangle$  et  $|R\rangle$  se traduit par un anti-croisement de ces niveaux. Pour un électron sur le niveau  $|-\rangle$ , sa probabilité de présence sur le dopant de gauche ( $P_L$ ) ou sur le dopant de droite ( $P_R$ ) dépend uniquement de  $x$ ,

$$P_{L,R} = \frac{1}{2 + \frac{1}{2}x(x \pm \sqrt{x^2 + 4})}.$$

Le maximum d'hybridation est atteint pour  $\varepsilon = 0$ , pour lequel la fonction d'onde de l'électron est également répartie sur les deux dopants.

L'énergie  $\Delta = 2|\mathcal{T}|$  du couplage tunnel entre deux dopants a été calculée par Miller et Abrahams [45] lorsqu'ils ont étudié le transport électronique dans un semiconducteur faiblement dopé (qui est assuré par les sauts successifs des électrons entre les dopants, ou *hopping*). Ce calcul est détaillé dans la référence [75], et repris dans les références [76, 77], qui cherchent à étudier la faisabilité d'un qubit de charge en silicium, faisant intervenir deux dopants couplés. Le calcul, similaire à la détermination des états électroniques de la molécule  $H_2$ , utilise

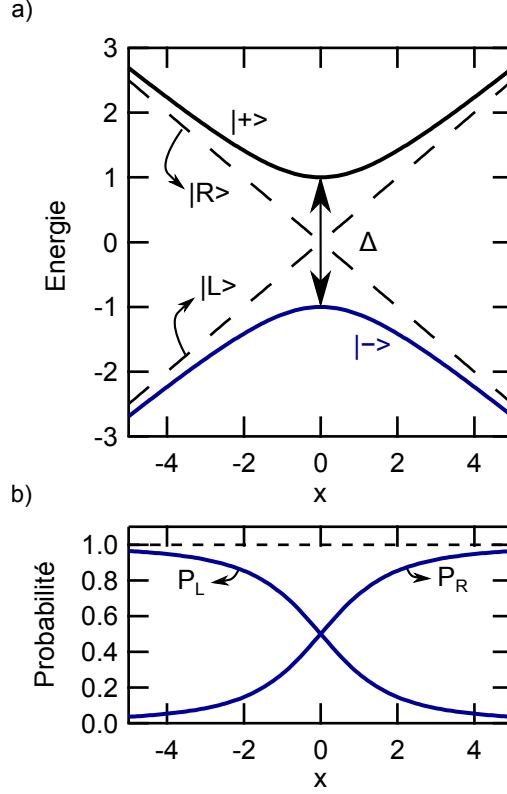


FIGURE 3.1 – Description des états d'un système de deux dopants couplés en fonction de  $x = \varepsilon/|\mathcal{T}|$ . a) Énergie des états  $|L\rangle$  et  $|R\rangle$ , et des états propres du système  $|-\rangle$  et  $|+\rangle$ . b) Évolution des probabilités de présence de l'électron sur le dopant gauche ( $P_L$ ), et droite ( $P_R$ ).

la méthode de « combinaison linéaire d'orbitales atomiques ». On considère  $H$  l'hamiltonien d'un électron au milieu de deux charges positives  $+e$ , et on cherche les états propres de l'hamiltonien comme une combinaison linéaire des états non couplés. Si on note  $\psi_L$  et  $\psi_R$  les fonctions d'ondes associées à  $|L\rangle$  et  $|R\rangle$ , alors l'hybridation des états dépend des quantités suivantes (avec  $i, j = L$  ou  $R$ ) :

$$J = \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle$$

$$L = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$$

$$S = \langle \psi_i | \psi_j \rangle$$

En supposant que les deux dopants se situent dans un environnement électromagnétique identique, et dans un cristal parfait, ces quantités ne dépendent pas du choix de  $i$  et de  $j$ . Pour une séparation suffisante entre les donneurs,  $J$  est l'énergie de ionisation du dopant corrigée de l'attraction coulombienne de l'autre donneur et  $S$  décrit le recouvrement des deux orbitales. Pour  $\varepsilon = 0$  les deux fonctions d'ondes résultantes  $\Psi_{\pm}$  sont les combinaisons symétriques et anti-symétriques de  $\psi_L$  et  $\psi_R$  (3.2).

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_L(\mathbf{r}) \pm \psi_R(\mathbf{r})}{\sqrt{2(1 \pm S)}} \quad (3.2)$$

La différence d'énergie entre ces deux états vaut  $\Delta_{S-AS} \approx 2(L - SJ)$ . En prenant la fonction d'onde donnée par l'approximation de masse effective de Kohn et Luttinger [43] (relations 1.7 et 1.8 vues au chapitre 1), les expressions qui suivent sont obtenues par Hu et collègues [76], et dépendent de la séparation  $\vec{R}$  entre les dopants, et de l'espèce chimique du dopant par le rayon de Bohr  $a_B^*$  de l'électron, et  $J$ .

$$\begin{cases} L \cong \frac{e^2}{4\pi a_B^* \varepsilon_0 \varepsilon_{Si}} \sum_{\mu=1}^6 |\alpha_{\mu}|^2 l_{\mu} e^{-i\mathbf{k}_{\mu} \cdot \mathbf{R}} \\ l_{\mu} = e^{-\mathcal{R}_{\mu}} (1 + \mathcal{R}_{\mu}) \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\begin{cases} S \cong \sum_{\mu=1}^6 |\alpha_{\mu}|^2 s_{\mu} e^{-i\mathbf{k}_{\mu} \cdot \mathbf{R}} \\ s_{\mu} = e^{-\mathcal{R}_{\mu}} (1 + \mathcal{R}_{\mu} + \mathcal{R}_{\mu}^2/3) \end{cases} \quad (3.4)$$

$$\text{avec } \mathcal{R}_{\mu} = (R_x/a, R_y/a, R_z/b)$$

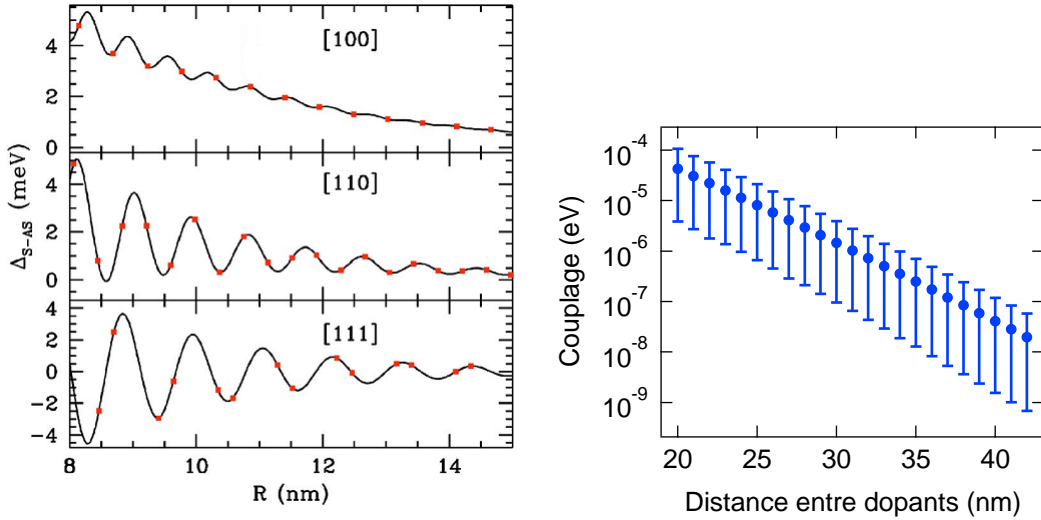


FIGURE 3.2 – Énergie du couplage tunnel des états électroniques de deux dopants phosphore. (gauche) Le couplage est représenté pour deux dopants situés sur un axe cristallographique particulier ([100], [110] et [111]), en fonction de la distance  $R$  qui les sépare. Les points rouges correspondent aux positions atomiques du cristal et le trait plein représente l'enveloppe de la fonction (extrait de la référence [76]). (droite) Le couplage est représenté indépendamment de l'orientation cristallographique. L'intervalle représenté contient 90% des valeurs de couplages pour une distance donnée. Le point indique leur moyenne.

L'énergie  $\Delta_{S-AS}$  peut avoir un signe positif ou négatif suivant la position relative des deux dopants (on notera alors  $\Delta$  sa valeur absolue). Si elle est positive l'état de plus basse énergie est  $\Psi_+$ , la combinaison linéaire symétrique de  $\psi_L$  et  $\psi_R$  (comme dans le cas de  $H_2$ ). Autrement, l'état fondamental sera la combinaison linéaire anti-symétrique  $\Psi_-$ . La figure 3.2 représente  $\Delta_{S-AS}$  en fonction de la position relative des dopants. Le caractère oscillant de

cette évolution provient de l'interférence entre les six fonctions de Bloch, associées aux six vallées du silicium, qui décrivent la fonction d'onde de l'électron lié au dopant.

Si on souhaitait placer des dopants de façon déterministe afin d'avoir un couplage contrôlé, il serait alors avantageux de les placer par exemple le long de l'axe [100], où  $\Delta_{S-AS}$  varie de façon quasi-monotone. Dans notre cas, nous mesurons le couplage de deux dopants placés de façon aléatoire, et nous souhaitons en déduire la distance entre les dopants. Pour un même couplage, l'écart entre les deux dopants peut varier de façon considérable. Même si l'on ne considère que les distances les plus probables, on a une incertitude sur l'écart entre les deux dopants d'environ 10 nm.

### 3.1.2 Couplage des niveaux électroniques des dopants aux électrodes

Le couplage tunnel entre le continuum d'états du réservoir et l'état localisé d'un dopant peut être décrit par l'approche de l'hamiltonien tunnel. On suppose pour cela que tous les états du réservoir sont couplés à l'état localisé par une même amplitude tunnel  $|M|$ . On distingue deux taux tunnel, le taux  $\Gamma_{d \leftarrow l}$  qui correspond à l'inverse du temps moyen nécessaire pour qu'un électron vienne occuper l'état localisé vacant, et  $\Gamma_{l \leftarrow d}$  qui décrit l'échappement d'un électron de l'état localisé. Ces taux tunnel s'expriment en fonction de  $|M|$ , de la densité d'états dans le contact  $\rho_l$ , de la dégénérescence  $d$  de l'état localisé, et de la fonction de Fermi de distribution des électrons dans le réservoir en équilibre thermodynamique à une température  $T$ . La règle d'or de Fermi nous dit qu'un électron peut passer d'un état dans l'électrode sur l'état localisé par effet tunnel, et inversement, si l'énergie de ces deux états coïncident, et donne les taux de passage suivants :

$$\Gamma_{d \leftarrow l} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \int d\varepsilon_l d \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_d) \rho_l(\varepsilon_l) f(\varepsilon_l) \quad (3.5)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 d \rho_l(\varepsilon_d) f(\varepsilon_d) \quad (3.6)$$

$$= d \Gamma f(\varepsilon_d) \quad (3.7)$$

$$\Gamma_{l \leftarrow d} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \int d\varepsilon_l \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_d) \rho_l(\varepsilon_l) f(\varepsilon_l) \quad (3.8)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho_l(\varepsilon_d) f(\varepsilon_d) \quad (3.9)$$

$$= \Gamma f(\varepsilon_d) \quad (3.10)$$

$$(3.11)$$

Dans la suite on parlera de  $\Gamma$  pour décrire le taux tunnel, que l'on prendra constant. Généralement la densité d'état dans les contacts  $\rho_l$  n'est pas parfaitement constante, comme nous l'avons vu à la section 1.2.2. Les deux taux  $\Gamma_{d \leftarrow l}$  et  $\Gamma_{l \leftarrow d}$  diffèrent d'un facteur  $d$ . En effet, un électron qui arrive sur l'état localisé a la possibilité d'occuper  $d$  états dégénérés, tandis que lorsqu'il s'échappe, il quitte un état bien défini. Par exemple, l'état de plus basse énergie d'un dopant est deux fois dégénéré avec le spin, il en résulte qu'un électron mettra deux fois moins de temps à arriver ce niveau (lorsqu'il en-dessous du niveau de Fermi dans l'électrode), que de le quitter (quand le niveau du dopant est au-dessus du niveau de Fermi de l'électrode).

## 3.2 Modélisation de la dynamique du système

On se propose d'étudier ces couplages tunnel en plaçant le système en régime dynamique. Pour cela, nous fixons la tension  $V_d$  à 0, et modulons les tensions de grilles avec des tensions sinusoïdales, déphasées l'une par rapport à l'autre, telles que  $V_{gi} = V_{gi}^{\text{DC}} + V_{gi}^{\text{AC}} \sin(\omega t \pm \varphi/2)$ ,  $i = 1, 2$ . Ce faisant, on module le niveau des dopants qui passe au cours d'un cycle au-dessus et en-dessous du niveau de Fermi des contacts. Il se produit alors une suite de chargements d'électrons sur les dopants, d'échanges entre les dopants et de déchargements dans les contacts. Il en résulte un courant électrique moyen fini : on a créé une pompe à électrons. On peut mesurer le courant induit par le dispositif en fonction des tensions de grilles  $V_{g1}^{\text{DC}}$  et  $V_{g2}^{\text{DC}}$ .

Les cartes de courant obtenues ne peuvent pas être interprétées simplement car elles sont le résultat de plusieurs processus ayant chacun un temps caractéristique différent. Pour comprendre et analyser les données obtenues, nous avons effectué des simulations numériques du courant délivré par le dispositif en utilisant un modèle intégrant seulement les paramètres les plus importants du système.

### 3.2.1 Pompes d'électrons

Ce système de deux niveaux en série, couplés, est similaire à l'un des premiers dispositifs utilisés pour réaliser une pompe à électrons quantifiée, c'est-à-dire une pompe à électrons dont le courant  $I = ef$  correspond au transfert un par un d'électrons à la fréquence  $f$ . Pothier et collègues [78] ont ouvert la voie au début des années 1990 en réalisant une pompe à électrons faite de deux transistors à un électron métalliques en série. Quelques années auparavant, la même équipe, en collaboration avec l'équipe néerlandaise de Mooij, avait déjà réalisé un tourniquet à électron [79], qui fournit lui aussi un courant quantifié d'électrons, à la seule différence qu'il nécessite une tension à ses bornes pour fonctionner. Les barrières tunnel étaient assurées par un oxyde métallique, elles étaient donc fixes. Parallèlement, Kouwenhoven et collègues [80] réalisèrent une pompe en GaAs, qui possède des barrières variables. De nombreux groupes ont développé par la suite d'autres pompes à électrons avec pour objectif de réaliser une source de courant précise, pilotée en fréquence. La quête d'un tel dispositif est toujours d'actualité en raison, notamment, de l'intention du Bureau International des Poids et Mesures de redéfinir certaines unités du système SI en imposant les valeurs de  $h$ ,  $e$ ,  $k_B$ , et  $\mathcal{N}_A$  [81]. L'intérêt d'une pompe à électrons serait de comparer la valeur de  $e$  donnée par ce dispositif avec celle obtenue en combinant les constantes de von Klitzing  $R_K$  et de Josephson  $K_J$  (obtenues en laboratoire avec une grande précision), pour vérifier les relations couramment admises :  $R_K = \frac{h}{e^2}$  et  $K_J = \frac{2e}{h}$ .

Jusqu'à récemment des pompes à électrons à barrières fixes étaient développées à la PTB en Allemagne, et au NIST aux États-Unis comme candidats potentiels pour réaliser une source de courant métrologique. Afin de limiter les processus indésirables, des parades ont été trouvées. Le NIST a fabriqué un dispositif à sept jonctions tunnel en série afin de limiter le co-tunneling des électrons [82]. À la PTB, des résistances ont été placées à l'entrée et à la sortie de la pompe pour améliorer la précision du dispositif [83]. L'ajout d'une résistance  $R > R_K$  permet de réduire considérablement le co-tunneling car il couple les électrons aux nombreux degrés de liberté internes du milieu dissipatif [84]. Pour le moment on ne considère pas qu'une pompe à électrons faite avec deux dopants puisse être un candidat sérieux pour être une pompe à électrons métrologique. Elle possède certains avantages, notamment grâce à ses



énergies de charge élevés qui limitent les processus de co-tunneling. Néanmoins, la principale difficulté réside actuellement dans l'impossibilité de régler les barrières tunnel à souhait.

Les pompes à barrières variables ont elles aussi continué à être développées. Citons notamment les travaux de la PTB [85], la réalisation de pompes à électrons en silicium par NTT au Japon [86], et plus récemment par *The University of New South Wales* en Australie [87]. Certaines de ces pompes à électrons présentent l'avantage de ne requérir qu'une seule tension périodique de commande. Ce détail technique permet d'éviter d'avoir à synchroniser les signaux de commande de la pompe à électrons au niveau de l'échantillon, dans le cryostat, ce qui pourrait faciliter l'utilisation de pompes à électrons en parallèle. Avec un seul paramètre de contrôle, la fréquence de fonctionnement de la pompe à électrons peut être augmentée en évitant cette difficulté. On parle alors de pompe à électrons non-adiabatique, car dans le régime adiabatique aucun courant ne peut être induit en variant uniquement un seul paramètre. De telles pompes ont été mises au point par NTT [88] et la PTB [89, 90]. Pour finir, notons qu'il existe des pompes à électrons prometteuses réalisées avec une architecture de type supraconducteur–normal–supraconducteur développées par l'équipe de Pekola [91].

Certaines pompes à électrons non-quantifiées suscitent aussi un intérêt pour la communauté scientifique. Il s'agit des pompes paramétriques, ou pompes quantiques, qui permettent de générer un courant en utilisant un système ouvert, c'est-à-dire sans barrières tunnel [92]. Contrairement aux autres pompes à électrons, l'énergie des électrons pompés n'est pas variée au cours du cycle. Giazotto et collègues pensent avoir réalisé une telle pompe à électrons [93].

### 3.2.2 Équation maîtresse

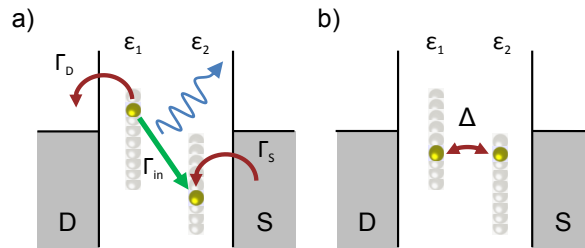


FIGURE 3.3 – Représentation schématique du modèle utilisé pour simuler le système. On sépare la modélisation du système en deux parties. a) Le couplage aux électrodes de source et de drain, ainsi que les processus inélastiques sont décrits par des taux  $\Gamma_S$ ,  $\Gamma_D$  et  $\Gamma_{in}$ , qui sont introduits dans l'équation maîtresse. b) Lorsque deux niveaux se croisent, on décrit l'évolution du système par une transition Landau-Zener, que l'on considère comme un évènement instantané.

Pour décrire l'évolution du système, nous représentons son état par le vecteur  $\mathbf{P}$  qui donne les probabilités de n'avoir aucun électron dans le système ( $P_0$ ), un électron sur le dopant 1 ( $P_1$ ) ou un électron sur le dopant 2 ( $P_2$ ),

$$\mathbf{P}(t) = \begin{pmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \\ P_2(t) \end{pmatrix}.$$

On se restreint au cas d'un seul électron dans le système,<sup>1</sup> et d'un niveau par dopant (dégénéré en spin). L'évolution du système est vue comme un processus stochastique, c'est-à-dire que l'on ne cherche à l'étudier que d'un point de vue statistique. L'évolution de  $\mathbf{P}$  est décrite par l'équation maîtresse

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}(t) = \mathbf{W}(t) \cdot \mathbf{P}(t).$$

Le modèle utilisé pour exprimer le noyau  $\mathbf{W}$  est représenté en figure 3.3. Les couplages tunnel des niveaux avec les électrodes sont décrits par les taux tunnel  $\Gamma_S$  et  $\Gamma_D$  constants, comme prévus par la règle d'or de Fermi (voir partie 3.1.2). On donne aussi la possibilité à l'électron de passer par un processus inélastique d'un dopant à l'autre. Le taux associé à ce type de processus n'est pas très bien connu (en théorie, il dépend de la séparation entre les donneurs, voir section 2.5.1), on choisit donc de le décrire par le modèle le plus simple possible : l'électron peut passer d'un niveau à l'autre seulement si ce passage s'accompagne d'une émission d'énergie (approximation correspondant à  $T = 0$ ), et  $\Gamma_{in}$ , le taux tunnel associé, est choisi indépendant de tout autre paramètre. En prenant tous ces éléments en considération, on obtient le noyau suivant :

$$\mathbf{W}(t) = \begin{pmatrix} -2\Gamma_D f(\varepsilon_1) - 2\Gamma_S f(\varepsilon_2) & \Gamma_D (1 - f(\varepsilon_1)) & -\Gamma_S (1 - f(\varepsilon_2)) \\ 2\Gamma_D f(\varepsilon_1) & -\Gamma_D (1 - f(\varepsilon_1)) & 0 \\ 2\Gamma_S f(\varepsilon_2) & 0 & -\Gamma_S (1 - f(\varepsilon_2)) \end{pmatrix} \\ + \Gamma_{in} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) & \Theta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \\ 0 & \Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) & -\Theta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \end{pmatrix},$$

où la fonction  $x \mapsto \Theta(x)$  vaut 0 si  $x < 0$  et 1 sinon. On vérifie bien que la somme de chaque colonne de cette matrice est nulle, ce qui traduit la conservation de la charge électrique dans le système. On remarque aussi le facteur 2 qui est placé en facteur des taux tunnel lorsqu'un électron entre dans le système, qui traduit la dégénérescence de spin des niveaux (voir section 3.1.2).

Autour du point triple « trou » (voir section 2.3.1), il suffit de modifier légèrement  $\mathbf{W}$  pour décrire la dynamique du système.  $\mathbf{P}$  ne décrit plus la probabilité de présence d'un électron, mais celle d'un « trou ». Pour traduire le fait qu'un électron qui entre sur un dopant est un trou qui s'y échappe (et inversement), on modifie le noyau de la façon suivante :

- On remplace  $f(\circ)$  par  $1 - f(\circ)$ . Cela revient à changer le signe de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$ .<sup>2</sup>
- On retire devant les taux tunnel le facteur 2 de la dégénérescence de spin (termes de peuplement d'un niveau), et on le met là où il n'est pas (échappement).

La séparation en deux points triples est valable tant que l'amplitude de variation des niveaux n'est pas assez forte pour changer le nombre total d'électron de plus d'une unité.

Pour effectuer la simulation, nous nous sommes placés dans la limite des basses températures ( $T = 0$ ), ce qui revient à prendre  $f = \Theta$ . Ce choix a permis d'améliorer la vitesse de la simulation car le noyau  $\mathbf{W}$  est alors constant par intervalles de temps  $\Delta t$ . La solution sur ces intervalles est calculable analytiquement.

1. Il en résulte  $P_0 = 1 - P_1 - P_2$ .

2. En effet, la fonction de Fermi-Dirac vérifie  $1 - f(x) = f(-x)$

### 3.2.3 Transition Landau-Zener

Le couplage  $\Delta$  entre les dopants échappe à l'équation maîtresse précédente. Ce couplage permet l'échange d'un électron lorsque les niveaux des dopants se croisent. Un tel processus est décrit par une transition Landau-Zener [94]. Pour rendre compte de ce processus, il faut considérer la cohérence du système, ce qui est possible en utilisant la matrice densité  $\rho$  (voir section 4.3.1). Nous n'avons pas choisi de décrire tout le système avec la matrice densité à ce niveau-là car cela aurait considérablement alourdi les calculs de la simulation numérique.

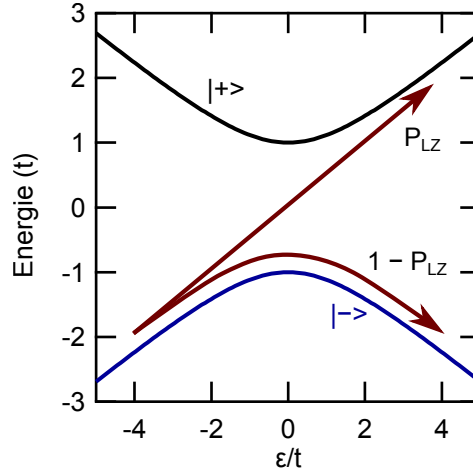


FIGURE 3.4 – Représentation schématisée d'une transition Landau-Zener. Le système est initialement sur l'état  $|-\rangle$ , et on le fait évoluer à travers l'anti-croisement. La formule de Landau-Zener donne alors la probabilité de finir dans l'un ou l'autre des états  $|-\rangle$  et  $|+\rangle$ .

En partant d'un état propre, et faisant évoluer le système à deux niveaux à travers son anti-croisement, l'état final dépend de la vitesse de cette évolution  $v = \frac{d\varepsilon}{dt}$ . Si l'évolution est suffisamment lente, le théorème adiabatique nous dit que le système restera à chaque instant sur cet état propre. Par contre si l'évolution est trop rapide, le système aura une probabilité non négligeable de subir une transition Landau-Zener, autrement dit de finir dans l'autre état. Plus généralement, la probabilité pour que le système subisse une transition Landau-Zener est donnée par la relation suivante :

$$P_{LZ} = \exp\left(-\frac{\pi \Delta^2}{2 \hbar v}\right). \quad (3.12)$$

Le modèle sous-jacent à cette formule utilise un système à deux niveaux couplés, parfaitement cohérents. L'énergie  $\varepsilon$  est variée de  $-\infty$  à  $+\infty$  à une vitesse constante. L'état final du système après un temps infini est une superposition cohérente des états  $|-\rangle$  et  $|+\rangle$ . Dans la réalité, le système sera projeté après un temps fini sur l'un de ses états propre à cause du couplage à l'environnement.

Dans notre modèle on suppose que cette transition se produit en un temps  $\delta t$  plus rapide que le temps caractéristique associé aux autres processus  $\Gamma_S^{-1}$ ,  $\Gamma_D^{-1}$  et  $\Gamma_{in}^{-1}$ . À cette condition, quand les niveaux se croisent, l'échange d'un électron entre les deux dopants avec la probabilité  $P_{LZ}$  modifie  $\mathbf{P}$  comme ceci :

$$P_1(t + \delta t) = P_{LZ} P_1(t) + (1 - P_{LZ}) P_2(t) \quad (3.13)$$

$$P_2(t + \delta t) = (1 - P_{LZ}) P_1(t) + P_{LZ} P_2(t). \quad (3.14)$$

On justifiera de la modélisation du système à l'aide d'une équation maîtresse et d'une transition Landau-Zener dans la section 3.3.2.3.

### 3.3 Étude du système en régime dynamique

Nous présentons dans cette partie les résultats expérimentaux obtenus. Toutes les données ont été mesurées avec l'échantillon GFF-P.

#### 3.3.1 Régime adiabatique

On se place pour commencer à fréquence faible pour rester dans un régime adiabatique. On est dans un tel régime quand on peut considérer que le système est dans un état d'équilibre à chaque instant. Le diagramme de stabilité qui, comme son nom l'indique, donne l'état d'équilibre du système, permet de connaître l'état de charge du système à chaque instant. Si maintenant on varie les tensions de grilles périodiquement, alors on montre simplement<sup>3</sup> que la pompe à électrons crée un courant quantifié lorsqu'un point triple est entouré par la trajectoire effectuée dans le plan  $(V_{g1}, V_{g2})$  [78].

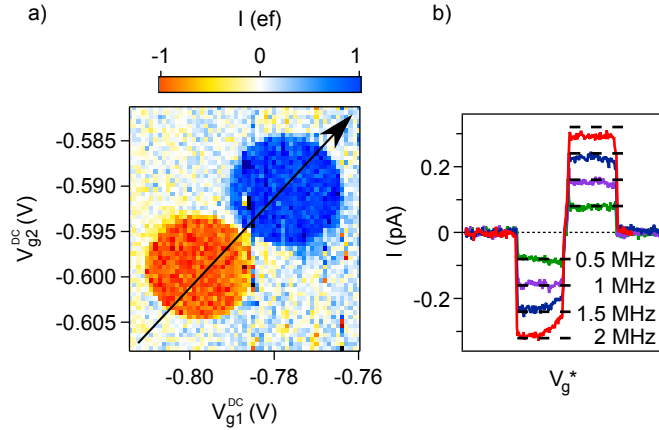


FIGURE 3.5 – a) Carte de courant obtenue à  $f = 1$  MHz et  $V_d = 0$ . b) Courant pompé à différentes fréquences. Les tensions de grilles ont été variées le long de la flèche indiquée sur la figure a). Les plateaux de courant  $I = ef$  sont indiqués par des tirets.

La figure 3.5 a) montre la carte de courant enregistrée pour l'échantillon GFF-P. On retrouve la forme du courant attendue en régime adiabatique. Dans ce régime, on obtient un courant  $I = \pm ef$  si un point triple est entouré par le chemin effectué, et pas de courant dans le cas contraire. Autrement dit, la forme de la tâche de courant correspond à la convolution

3. On néglige pour cela les processus de co-tunneling.

du chemin effectué dans le plan  $(V_{g1}, V_{g2})$  par le point triple supposé ponctuel. La température finie du système a pour effet d'adoucir les bords des motifs de courant, mais cet effet relativement faible ici. On vérifie finalement que le courant change de sens d'un point triple à l'autre.

La forme des tâches de courant correspond au résultat attendu, voyons maintenant ce qu'il en est pour le niveau de courant. En réalisant des coupes dans les cartes de courant pour quatre fréquences différentes (figure 3.5 b)), on constate que le courant coïncide très bien avec un courant quantifié  $I = ef$  pour les plus faibles fréquences. Pour des fréquences un peu plus élevées (à partir de 1,5 MHz), on remarque que les tâches de courant ne forment plus des plateaux de courant ; une partie du courant mesuré chute en-dessous de la valeur attendue. C'est le premier effet visible du caractère non-adiabatique de la manipulation du système.

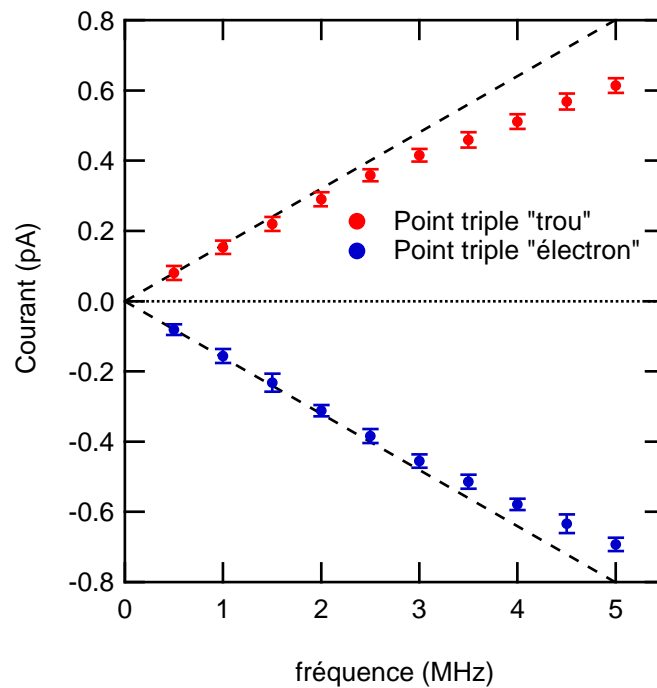


FIGURE 3.6 – Courant pompé sur les plateaux en fonction de la fréquence, pour les deux points triples. Les barres d'erreur ont été placées pour contenir la distribution des valeurs à  $3\sigma$ . Les tiretés correspondent aux courbes  $I = \pm ef$ .

Le caractère non adiabatique de cette pompe à électrons apparaît aussi lorsque l'on représente le courant mesuré sur les plateaux en fonction de la fréquence (figure 3.6). Aux alentours de 1 MHz, le courant pompé commence à s'éloigner de la relation attendue.

### 3.3.2 Régime non-adiabatique

#### 3.3.2.1 Déplacement d'un seul niveau

Afin de bien mettre en évidence le caractère non-adiabatique du transport, on montre ici que le système fournit un courant lorsque seul  $\varepsilon_2$  évolue avec le temps. Pour cela, on envoie sur

$V_{g1}$  un signal, et on compense l'évolution de  $\varepsilon_1$  avec un signal en opposition de phase sur  $V_{g2}$ . Le rapport d'amplitude de ces deux signaux est crucial pour annuler les contributions sur  $\varepsilon_1$  (ce qui revient à faire en sorte que le chemin parcouru dans le plan  $(V_{g1}, V_{g2})$  soit colinéaire au vecteur  $\overrightarrow{\Delta V^s}$  de la figure 2.7).

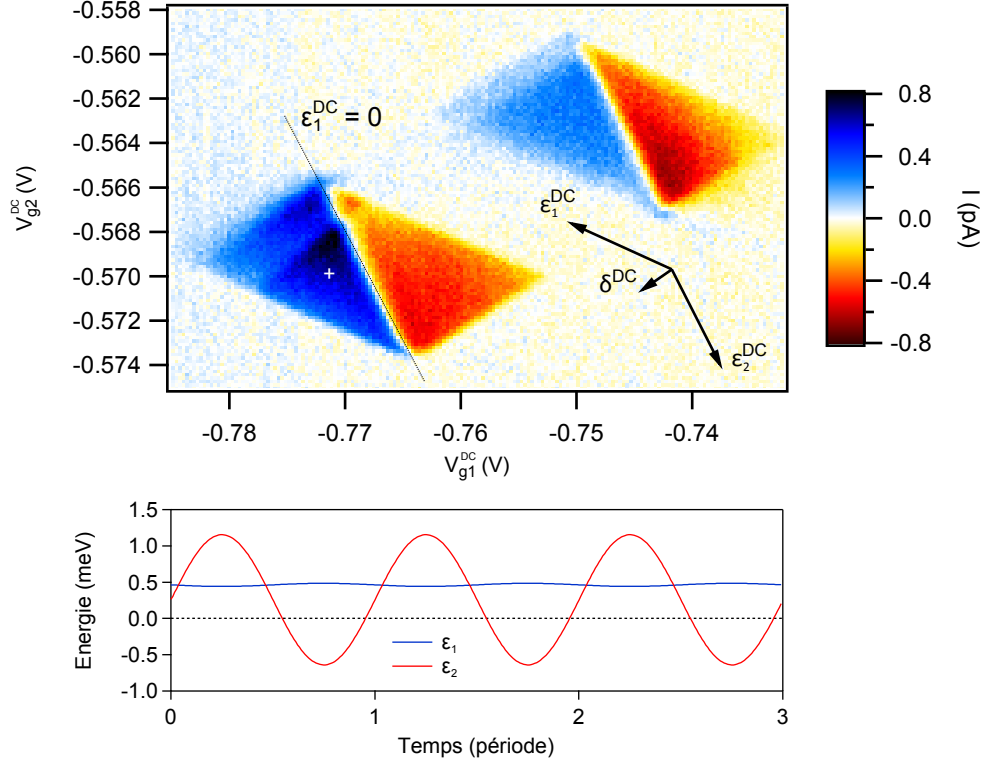


FIGURE 3.7 – (haut) Courant pompé lorsqu'un seul niveau est modulé ( $f=10$  MHz,  $T=150$  mK,  $B=0$ ). (bas) Évolution des deux niveaux dans le temps (le point de fonctionnement est indiqué par la croix blanche sur la figure précédente). Le niveau de Fermi des contacts est représenté en pointillés.

Le courant délivré par le système est représenté en haut de la figure 3.7. Les deux points triples sont inclus dans la figure, chacun produisant un courant en forme de losange qui présente un changement de signe le long de la diagonale. En utilisant la relation linéaire de conversion entre les tensions de grilles et l'énergie des niveaux, on est en mesure de reconstituer l'évolution des niveaux. On ne connaît pas parfaitement l'amplitude des signaux qui parviennent aux grilles, ni leur déphasage en bas du cryostat. On se sert principalement de la carte de courant pour déduire ces paramètres. Il en résulte l'évolution des niveaux représentée en bas de la figure 3.7. Cette évolution correspond à un point de fonctionnement particulier, représenté par la croix sur la carte de courant. Lorsque l'on change le point de fonctionnement dans cette carte de courant, l'énergie moyenne des niveaux change, mais ils gardent les mêmes amplitude et différence de phase.

Le signe du courant dépend ici uniquement de la position de  $\varepsilon_1$  par rapport au niveau de Fermi. S'il est au-dessus du niveau de Fermi, il ne pourra pas capturer d'électron du drain. Il peut cependant relâcher dans le drain un électron provenant de  $\varepsilon_2$ . Dans ce cas les électrons peuvent circuler uniquement de la source au drain. Inversement, si  $\varepsilon_1$  est en-dessous du niveau

de Fermi, les électrons ne peuvent circuler que du drain à la source. Le changement de signe du courant intervient donc pour  $\varepsilon_1 = 0$ .

Cette mesure nous donne déjà une première indication sur les barrières tunnel. Nous allons détailler succinctement le transport d'un électron au cours d'un cycle, en prenant pour exemple le point de fonctionnement décrit en figure 3.7. On suppose que dans l'état initial il n'y a pas d'électrons dans le système. On part avec  $\varepsilon_2 < 0$ .

- Pendant l'intervalle de temps où  $\varepsilon_2$  est sous le niveau de Fermi, il faut qu'un électron entre sur ce niveau. Le taux de passage entre ce niveau et l'électrode de rattachement doit être assez grand pour que la probabilité d'un tel évènement ne soit pas négligeable<sup>4</sup> :  $2\Gamma_S \gtrsim 5f$ .
- $\varepsilon_2$  est ensuite élevé au-dessus du niveau de Fermi. Il faut attendre que  $\varepsilon_2$  passe au-dessus de  $\varepsilon_1$  pour que l'échange de l'électron entre les deux niveaux soit possible. Pendant cet intervalle de temps, l'électron attrapé a la possibilité de retourner dans l'électrode d'où il vient. Le taux tunnel doit être assez faible pour obtenir au final un courant raisonnable :  $\Gamma_S \lesssim 5f$ .
- Au croisement des deux niveaux, l'électron a la possibilité de passer sur  $\varepsilon_1$  par une transition Landau-Zener adiabatique. S'il n'est pas passé, il a encore la possibilité de passer d'un niveau à l'autre grâce à un processus inélastique.
- Une fois qu'il est sur  $\varepsilon_1$ , l'électron doit s'échapper dans son électrode de rattachement avant de retourner sur  $\varepsilon_2$  au prochain croisement, ou par un processus inélastique lorsque  $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$ .

On a donc vu qu'il y a deux contraintes en compétition sur  $\Gamma_S$ . Pourtant le rendement du pompage en ce point est relativement bon, puisqu'il est de 0,4 (le courant mesuré en ce point est 0,64 pA, contre 1,6 pA attendu si un électron par cycle était pompé). On en déduit que les deux contraintes ne sont pas loin d'être satisfaites, d'où  $\Gamma_S \approx 5f = 50$  MHz. On ne tentera pas d'être plus quantitatif à ce stade car il nous faut plus d'information sur  $\Gamma_D$ ,  $\Gamma_{in}$  et  $\Delta$  pour être plus précis sur la valeur de  $\Gamma_S$ .

L'analyse précédente est confirmée par la mesure du rendement du pompage en fonction de la fréquence (figure 3.8). Le maximum de rendement est obtenu autour de  $f = 10$  MHz, et décroît pour des fréquences plus faibles ou plus élevées. Cette dépendance en fréquence devrait être mesurée pour un même point de fonctionnement, avec des amplitudes en tension équivalentes et une différence de phase de  $\pi$ . Ces éléments rendent la prise de données délicate. En outre, l'atténuation des lignes de transmission en fonction de la fréquence n'a pas été prise en compte pour enregistrer cette courbe, alors qu'elle est loin d'être négligeable à 100 MHz.

On notera la présence d'une anomalie dans le courant pompé, située sur la figure 3.7 dans la partie à faible  $\varepsilon_2^{DC}$ , dans les losanges. Elle se traduit aussi par un creux sur la courbe de la figure 3.8 (le point de fonctionnement n'étant pas exactement le même à toutes les fréquences). Le modèle que l'on utilise ne permet pas de reproduire cette signature. On se heurte à cette difficulté pour déterminer les taux tunnel. Cette anomalie provient peut-être de l'environnement, comme par exemple la présence d'une charge fluctuante.

---

4.  $(5f)^{-1}$  correspond approximativement à l'intervalle de temps considéré.

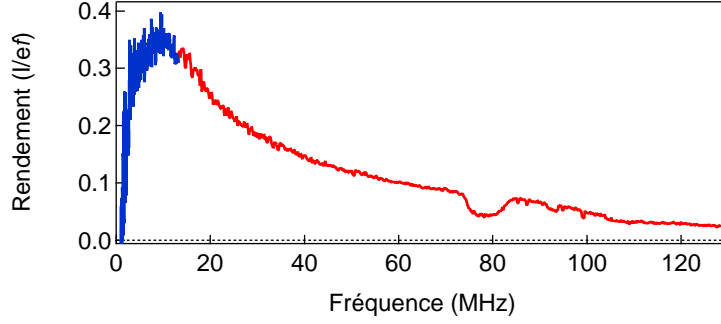


FIGURE 3.8 – Évolution du courant pompé en fonction de la fréquence lorsqu'un seul niveau est modulé ( $T = 150$  mK,  $B = 0$ ). Les données sont issues de deux séries de mesures (bleu et rouge).

### 3.3.2.2 Déplacement des deux niveaux

Pour se placer dans un cadre un peu plus général, on fait maintenant varier les deux niveaux. Les figures de pompage, choisies pour deux déphasages différents, sont représentées en figure 3.9.  $V_{g1}^{DC}$  et  $V_{g2}^{DC}$  ont été ajustées pour que les amplitudes de variation de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  soient comparables. On a choisi des amplitudes de variation grandes pour pouvoir mesurer des motifs détaillés, en évitant toutefois que les motifs de pompage associés aux deux points triples se chevauchent.

Ces figures expérimentales sont comparées aux simulations fournies par le modèle décrit précédemment. Contrairement au cas précédent où l'on ne varie qu'un seul des niveaux, les motifs de pompages sont maintenant composés de plusieurs régions, qui mettent chacune en jeu des mécanismes différents. La forme et la taille de ces régions dépendent uniquement du couplage électrostatique des dopants aux grilles (section 2.3.2), et des amplitudes  $V_{g1}^{DC}$  et  $V_{g2}^{DC}$ . On détaillera dans la suite ces différents régimes. En étudiant simultanément les différents régimes, on est en mesure de distinguer les contributions de  $\Gamma_S$ ,  $\Gamma_D$ ,  $\Gamma_{in}$  et  $\Delta$ .

On s'aide de l'informatique pour essayer un grand nombre de jeux de paramètres et ne garder que ceux qui reproduisent au mieux le courant en des points bien choisis. L'algorithme que l'on a utilisé consiste à essayer différentes combinaisons de paramètres au hasard, et à les raffiner en variant un peu ces paramètres (de façon similaire à l'algorithme de *recuit simulé*). La vitesse d'exécution du programme est cruciale pour faire fonctionner cet algorithme en un temps raisonnable. Le jeu de paramètres trouvé de cette façon, qui a été utilisé pour effectuer la simulation de la figure 3.9, est donné dans le tableau 3.1.

Pour reproduire fidèlement le courant pompé il semble inévitable de choisir deux jeux de paramètres différents pour chacun des points triples. Les simulations ne permettaient pas d'obtenir les bons niveaux de courant en utilisant les mêmes paramètres. Il se peut en effet que les taux tunnel soient dépendants de l'état de charge du dopant voisin, ou des tensions de grilles. On remarque cependant que l'échange d'un électron entre les dopants ne peut se faire que s'il y a un unique électron dans le système. On ne peut donc pas expliquer comment le couplage tunnel  $\Delta$  est modifié par l'état de charge des deux dopants.

Nous allons maintenant détailler le pompage d'électrons pour 3 points de fonctionnement choisis dans la figure 3.9 d), qui sont indiqués par les symboles +, o et x. On trace pour chacun



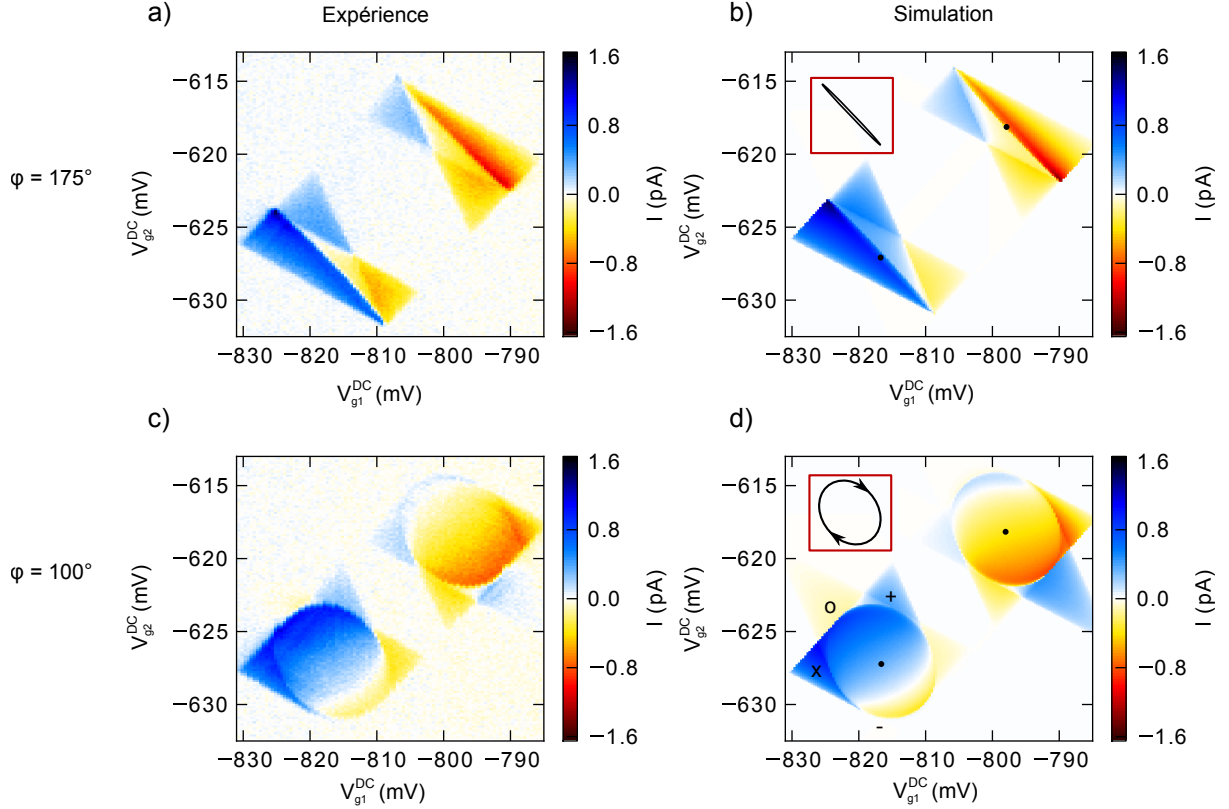


FIGURE 3.9 – Comparaison du courant pompé lorsque les deux niveaux sont modulés (a,c), avec les simulations correspondantes (b,d). Les deux valeurs de  $\varphi$  utilisées conduisent aux trajectoires dans le plan  $(V_{g1}, V_{g2})$  indiquées en haut à gauche des simulations. Les points triples sont indiqués par un point.  $f = 10$  MHz,  $T = 150$  mK et  $B = 0$ .

de ces points l'évolution des niveaux  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  dans le temps, et leurs probabilités d'occupation en régime permanent. Ces données sont issues des simulations qui ont permis de calculer les cartes de courant de la figure 3.9. On verra ainsi que ces régimes ne sont pas sensibles de la même façon aux paramètres de la simulation. Chacun de ces points permet de sonder un paramètre particulier.

**Point x : le couplage aux électrodes (figure 3.10).** Le rendement du pompage en ce point de fonctionnement est d'environ 55%, alors qu'il serait nul si le système était varié de façon adiabatique. C'est principalement dû à  $\Gamma_S$  qui est comparable à la fréquence de fonctionnement  $f$ .

	$\Gamma_S$ (MHz)	$\Gamma_D$ (MHz)	$\Gamma_{in}$ (MHz)	$\Delta/h$ (GHz)
Point triple « électron »	18	670	14	1,2
Point triple « trou »	32	670	37	1,2

TABLE 3.1 – Récapitulatif des taux tunnel et amplitudes tunnel utilisés pour simuler les cartes de courant de la figure 3.9.

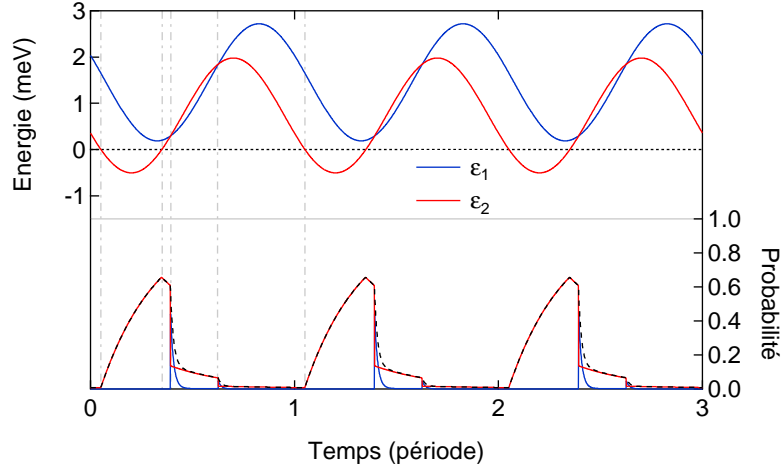


FIGURE 3.10 – Évolution de l'énergie et des probabilités d'occupation de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  en régime permanent, extraits de la simulation de la figure 3.9. Le tireté noir représente  $P_1 + P_2$ . Le point de fonctionnement est désigné par le symbole x sur la figure 3.9 d).

On constate que  $\varepsilon_1$  ne passe jamais sous le niveau de Fermi au cours d'une période. Il peut relâcher son électron dans le drain, mais il n'a pas la possibilité d'en prendre un. De plus, comme le taux tunnel qui le couple au drain est élevé par rapport à la fréquence de fonctionnement, la majorité des électrons qui arrive sur  $\varepsilon_1$  s'échappe rapidement dans le drain. On s'intéresse maintenant à  $\varepsilon_2$ , qui a un taux tunnel comparable à la fréquence de fonctionnement. Il acquiert un électron de la source pendant qu'il est sous le niveau de Fermi. Peu de temps après être passé au-dessus du niveau de Fermi, il échange avec une forte probabilité son électron avec  $\varepsilon_1$  lorsqu'ils se croisent, ce qui ne lui a pas laissé suffisamment de temps pour relâcher son électron dans la source.

On note que le mécanisme similaire, où les rôles de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  sont inversés, ne fournit expérimentalement aucun courant. La région correspondant à cette configuration est indiquée par le symbole -

**Point + : l'échange entre les dopants (figure 3.11).** En ce point, on ne s'attend pas à avoir un courant pompé si  $P_{LZ} = 0$ . On le montre facilement en supposant que l'on a un électron sur  $\varepsilon_2$  au temps 0 de la figure 3.11. Après le premier croisement, l'électron change de niveau et se retrouve sur  $\varepsilon_1$ . Il revient sur  $\varepsilon_2$  au second croisement. Durant tout ce cycle, l'électron reste sur le niveau de plus basse énergie, qui se trouve en permanence en-dessous du niveau de Fermi. Ainsi, l'électron est bloqué dans le système et ne peut pas s'échapper.

Expérimentalement on constate que l'on a du courant en ce point, ce qui prouve que l'électron ne reste pas sur l'état de plus basse énergie au cours du cycle. Pour retrouver le courant en ce point en utilisant notre modèle, on doit choisir un  $\Delta$  tel que  $P_{LZ} > 0$ . On voit donc que le courant en ce point est très dépendant du paramètre  $\Delta$ , mais comme il dépend aussi des autres taux  $\Gamma_S$ ,  $\Gamma_D$  et  $\Gamma_{in}$ , on ne peut pas simplement trouver la valeur de  $\Delta$  connaissant le courant dans cette région. On calcule<sup>5</sup> que  $v = 43,5 \text{ keV.s}^{-1}$ , donnant  $P_{LZ} =$

5.  $v$  est sensiblement le même pour les deux croisements du cycle.

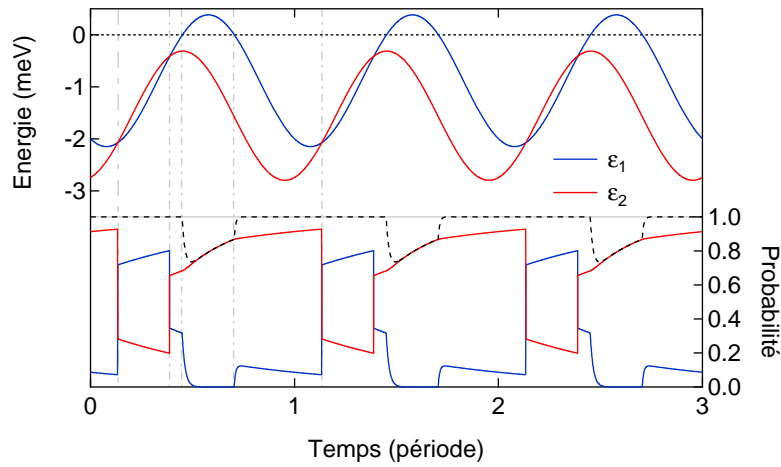


FIGURE 3.11 – Évolution de l'énergie et des probabilités d'occupation de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  au point de fonctionnement est désigné par le symbole + sur la figure 3.9 d).

0,26 avec la valeur de  $\Delta$  fournie dans le tableau 3.1.

Le mécanisme similaire, où les rôles de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  sont inversés, donne lui aussi du courant. Il s'agit du triangle de courant de signe opposé faisant face à celui qui contient le point +.

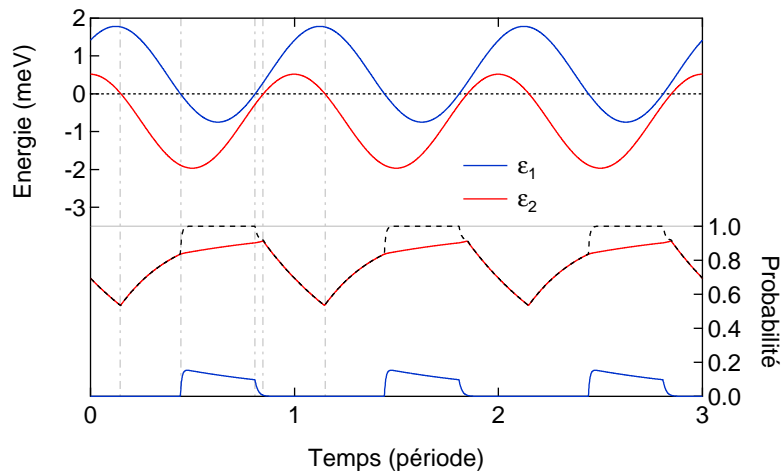


FIGURE 3.12 – Évolution de l'énergie et des probabilités d'occupation de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  au point de fonctionnement est désigné par le symbole o sur la figure 3.9 d).

**Point o : la contribution inélastique (figure 3.12).** À ce point de fonctionnement les deux niveaux ne se croisent jamais. L'échange de l'électron entre les niveaux ne peut pas être assuré par une transition Landau-Zener, c'est le terme inélastique  $\Gamma_{in}$  qui est responsable du courant. L'échange ne peut se faire que de  $\varepsilon_1$  vers  $\varepsilon_2$ , ce qui impose le sens du courant.

Dans cette configuration un courant s'établit car la probabilité d'occupation de  $\varepsilon_2$  n'est pas 1 lorsque  $\varepsilon_1$  passe sous le niveau de Fermi. À ce moment, les électrons entrent préféren-

tiellement sur  $\varepsilon_1$  grâce au rapport très asymétrique entre  $\Gamma_S$  et  $\Gamma_D$ .

Une région similaire existe à l'opposé du point triple, où les rôles de  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  sont échangés. Pourtant on ne détecte aucun courant dans cette région, à cause de la grande différence entre  $\Gamma_S$  et  $\Gamma_D$ . À la fréquence de fonctionnement,  $\Gamma_D$  assure un chargement rapide de  $\varepsilon_1$  une fois que celui-ci passe sous le niveau de Fermi.

### 3.3.2.3 Limites du modèle

Le modèle utilisé précédemment ne contient que les ingrédients essentiels pour simuler le pompage avec deux dopants. Les taux  $\Gamma_S$ ,  $\Gamma_D$  et  $\Gamma_{in}$  sont pris constants, et le croisement de deux niveaux est décrit par le modèle Landau-Zener idéal. Malgré cette simplicité, on est capable de reproduire relativement bien les figures expérimentales. Quelques différences sont néanmoins visibles. La plus importante est peut-être l'intensité du courant dans le triangle « jaune », que l'on a associé précédemment à *l'échange entre les dopants* (celui qui fait face au point +). Dans la simulation, l'intensité du courant dans cette région est plusieurs fois plus faible que dans la mesure expérimentale.

Pour améliorer le modèle, on pourrait considérer que les taux tunnel varient avec  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$ . On a vu dans la première partie que le taux de passage d'un électron depuis/vers les contacts est sensible à la densité d'état dans les contacts (section 1.2.2), et peut aussi être sensible à des effets d'interactions comme le *Fermi Edge Singularity* (section 2.5.2). Le taux de passage inélastique ne semble pas non plus être constant en fonction de  $\varepsilon$  d'après la caractérisation à tension de polarisation finie (section 2.5.1).

La transition Landau-Zener est, quant à elle, un processus quantique qui nécessite que le système reste cohérent pendant la durée du croisement des deux niveaux. Pour avoir une idée de la durée que prend ce croisement, on suppose qu'il faut varier  $\varepsilon/\Delta$  de -5 à 5 pour assurer une bonne transition Landau-Zener. Compte-tenu de la vitesse de variation de  $\varepsilon$ , calculée à  $v = 43,5 \text{ keV.s}^{-1}$  dans l'exemple précédent, et si l'on prend la valeur de  $\Delta$  donnée dans la table 3.1 (en supposant qu'elle soit correcte), on estime que la transition Landau-Zener dure :  $10 \Delta/v \approx 1.1 \text{ ns}$ . Bien qu'étant brève, cette durée est comparable au temps de cohérence mesuré dans des qubits de charge [95, 96]. Nous étudierons plus en détail l'effet de la décohérence sur la transition Landau-Zener de deux niveaux dans le chapitre 4 consacré à la cohérence du système (section 4.3.1). On note que cette durée est néanmoins très courte par rapport à la durée d'une période, ce qui nous permet de justifier la modélisation du croisement entre les niveaux par un évènement ponctuel.

Pour finir, on remarque que la température finie joue un rôle important lors de cette transition. En effet, à la température de l'échantillon  $T = 150 \text{ mK}$ , l'énergie thermique est supérieure à la séparation entre les deux états hybridés du système ( $k_B T \approx 25 \mu\text{eV}$ , contre  $\Delta \approx 5 \mu\text{eV}$ ). Pendant le bref moment où le système passe l'anti-croisement ( $-k_B T \lesssim \varepsilon \lesssim k_B T$ ), la tendance du système à aller vers l'équilibre thermique peut perturber la transition Landau-Zener.

### 3.3.2.4 Phénomène de rectification du courant

Idéalement on aimerait que les électrodes du dispositif ne soient couplées qu'aux deux dopants. Dans la réalité nous ne pouvons pas les isoler les unes des autres parfaitement, ce

qui se traduit par un couplage capacitif entre toutes les électrodes. Supposons maintenant que deux électrodes soient couplées par une capacité  $C$ , quand on envoie un signal à haute fréquence sur l'une des électrodes, on induit un courant alternatif dans l'autre électrode pour charger cette capacité. Si l'on modélise la ligne d'accès de l'électrode par une résistance  $R$  on se retrouve avec un circuit RC classique. Pour des fréquences comparables et supérieures à  $(RC)^{-1}$ , l'envoi d'un signal sur la première grille induira une variation de potentiel de l'autre grille.

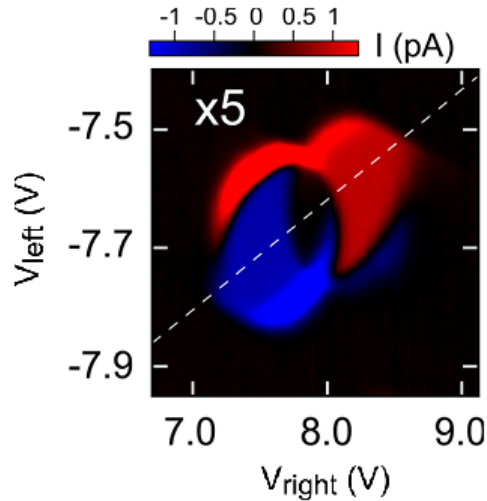


FIGURE 3.13 – Pompe à électrons réalisée avec un nanotube de carbone (figure extraite de la référence [65]). Deux boîtes quantiques sont créées au sein du nanotube. Le système fonctionne à 6 MHz, en régime adiabatique. Le courant pompé excède dans certaines régions le courant correspondant à un électron par cycle. Selon les auteurs, il s'agit de la rectification du courant induit par une tension source-drain oscillante.

Quand on étudie le pompage d'électrons dans un système, le courant pompé peut être fortement perturbé si la variation d'une tension de grille induit une variation de la tension de l'électrode de source ou de drain. Cet effet, dit de rectification du courant, est illustré en figure 3.13 (extrait de la référence [65]), qui est l'équivalent de notre figure 3.5. On reconnaît les deux régions de pompage associées aux deux points triples, mais on note la présence de deux tâches de courant supplémentaires, associées à un courant d'intensité supérieur à  $ef$ .

Notre système est moins sensible au problème de rectification que l'exemple précédent. Deux éléments sont en effet en notre faveur : i) les grilles sont très bien couplées aux dopants, ce qui permet de faire fonctionner le système avec des plus faibles variations des tensions de grilles ; ii) la géométrie de l'échantillon suggère que chaque grille est également couplée aux deux contacts. Si la variation de potentiel dans la source et le drain induite par une grille est la même, la tension source-drain reste nulle. Les auteurs de la référence précédente invoquent aussi le substrat conducteur, qui peut en effet poser problème s'il est laissé flottant.



## Chapitre 4

# Évolution cohérente d'un électron partagé entre deux dopants

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Position du problème</b>	<b>76</b>
4.1.1	Les qubits	76
4.1.2	Équations du transport	77
4.1.3	Cas général	79
4.1.4	Décohérence	79
<b>4.2</b>	<b>Régime stationnaire</b>	<b>80</b>
4.2.1	Équation du transport	80
4.2.2	Estimation des paramètres	81
4.2.3	Courant inélastique	83
4.2.4	Évolution en température	85
<b>4.3</b>	<b>Évolution cohérente en régime dynamique</b>	<b>85</b>
4.3.1	Transition Landau-Zener	86
4.3.2	Transport photo-assisté	88
4.3.3	Interférences de Landau-Zener-Stückelberg	90

---

Nous avons décrit dans le chapitre précédent la dynamique du système de deux dopants en associant à chaque barrière tunnel un taux phénoménologique. On a ainsi pu reproduire le courant fourni par le dispositif lorsque celui-ci est utilisé en pompe à électrons, à l'aide de trois taux tunnel :  $\Gamma_S$ ,  $\Gamma_D$  et  $\Gamma_{in}$ . Les événements tunnel auxquels sont associés ces trois taux sont des processus incohérents, car ils impliquent un continuum d'états, que ce soit les états électroniques dans les contacts, ou les phonons du cristal.

Dans le chapitre précédent nous avons utilisé la relation de Landau-Zener pour décrire le passage du système à deux niveaux à travers son anti-croisement. Cette relation, qui décrit un processus cohérent, a été utilisée dans sa forme originale, qui suppose qu'il n'y a pas de décohérence.

Dans ce chapitre nous allons nous focaliser sur la cohérence d'un électron partagé entre les deux dopants. Ce système correspond à un qubit de charge, qui est couplé aux deux électrodes, et sujet à la décohérence. Nous commencerons par présenter les équations qui régissent l'évolution du système, qui nous serviront de point de départ pour décrire le transport à travers les deux dopants en régime stationnaire, et en régime dynamique.

## 4.1 Position du problème

### 4.1.1 Les qubits

En 1998, Loss et DiVincenzo émirent l'idée qu'il est possible de réaliser un ordinateur quantique en utilisant des boîtes quantiques [97]. Cette proposition suscita un vif intérêt pour les boîtes quantiques. Au même moment, Kane propose quant à lui une architecture qui permet de réaliser un ordinateur quantique en utilisant des dopants phosphore dans du silicium [98]. Le premier pas vers la réalisation d'un ordinateur quantique consiste à réaliser un bit quantique, ou qubit. La fabrication de qubits en utilisant des boîtes quantiques a été effectuée par de nombreux groupes dans le monde. Des efforts de recherche tentent de nos jours d'améliorer leurs performances, et d'étudier le couplage de plusieurs qubits. Les qubits à base de dopants dans du silicium n'ont pas encore atteint le niveau de développement de celui des boîtes quantiques. Nous allons maintenant détailler les deux principales sortes de qubit que l'on peut réaliser : les qubits de spin, et les qubits de charge.

On utilise les matrices de Pauli pour décrire l'hamiltonien des qubits. Les états  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$  des qubit sont définis comme les états propres de l'opérateur  $\hat{\sigma}_z$ . L'opérateur  $\mathcal{T}\hat{\sigma}_x$  a pour rôle de coupler ces deux états.

#### 4.1.1.1 Qubit de spin

Dans un qubit de spin, l'information est enregistrée par spin de l'électron. Pour pouvoir distinguer les deux états de spin, il faut appliquer un champ magnétique  $\vec{B}_0$ . L'hamiltonien du qubit est alors  $\hat{H}_0 = \frac{1}{2}g\mu_B B_0 \hat{\sigma}_z$ . On peut coupler les deux états du spin en appliquant un champ magnétique oscillant dans le plan perpendiculaire à  $\vec{B}_0$ , l'hamiltonien s'exprime alors par :  $\hat{H} = \frac{1}{2}g\mu_B B_0 \hat{\sigma}_z + \mathcal{T}\hat{\sigma}_x$ . Le couplage peut être facilement activé ou désactivé en créant, ou non, le champ magnétique oscillant.



Les qubits de spin faits à partir de dopants possèdent l'avantage considérable de présenter des temps de cohérence très long. Si on utilise le spin nucléaire du dopant pour enregistrer l'information quantique (ce qui correspond à la proposition de Kane [98]), le temps de cohérence peut dépasser la seconde dans du silicium purifié en isotope 28. Le temps de cohérence du spin de l'électron (proposé comme support de l'information quantique par Vrijen et collègues [99]), quant à lui, est de l'ordre de la milliseconde. Les mesures des temps de relaxation [20] et de cohérence<sup>1</sup> du spin d'un électron localisé sur un dopant ont été effectuées par Morello et collègues.

#### 4.1.1.2 Qubit de charge

Les qubits charge sont plus facile à mettre en place que les qubits de spin. Dans les qubits de charge, l'information est enregistrée par la position d'un électron. Typiquement, l'électron a la possibilité d'être sur deux sites : deux boîtes quantiques, ou deux dopants par exemple. La séparation en énergie  $\varepsilon$  entre ces deux états est contrôlée par les tensions de grilles. Le couplage entre les deux états de charge est assuré par la barrière tunnel entre les deux sites. Contrairement au qubit de spin, l'état du qubit de charge peut-être lu plus directement en plaçant un détecteur de charge à proximité. Cependant, ce qubit présente deux désavantages majeurs : d'une part on ne peut pas changer le couplage  $\mathcal{T}$  entre les deux états, et d'autre part le temps de cohérence est généralement faible à cause du bruit électrostatique de l'environnement (présence de pièges de charge et d'électrodes au voisinage du qubit).

Les qubits de charge ont été principalement, entre autres, dans des hétérostructures en GaAs. Dans ce système, la cohérence de la charge d'un électron est de l'ordre de la nanoseconde [95], ce qui rend difficile la manipulation du qubit.

La réalisation d'un ordinateur quantique basé sur des qubits de charge a été proposée par Hollenberg et collègues [100]. Cependant, il n'y a pas encore de réalisations pratiques d'un qubit de charge avec des dopants. Dans la suite, on s'intéressera à ce type de qubit formé par deux dopants. Le premier pas pour étudier ce qubit est de montrer que la cohérence de l'électron peut-être conservée lors du passage d'un dopant à l'autre, et d'en déduire le temps de cohérence associée.

### 4.1.2 Équations du transport

Dans tout ce chapitre on décrira les deux états fondamentaux des deux dopants, lorsque ceux-ci sont placés dans la fenêtre de polarisation (figure 4.1). La tension source-drain appliquée est suffisante pour négliger la distribution de Fermi dans les contacts. Comme dans le chapitre 3, le système peut être dans trois états : un électron est présent sur le dopant de gauche (état  $|L\rangle$ ), sur celui de droite (état  $|R\rangle$ ), ou bien aucun électron n'est présent dans le système (état  $|0\rangle$ ). Dans ce chapitre, on considère que le système peut être dans une superposition cohérente, et une superposition statistique, de ces états. On décrit donc le système à l'aide de la matrice densité  $\rho$ . Les équations qui permettent de décrire l'évolution de cette matrice pour le système qui nous intéresse ont été formulées par Stoof et Nazarov [101].

Dans les équations de Stoof et Nazarov, le couplage tunnel avec l'électrode de droite est l'unique source de décohérence du système (il s'agit du terme  $\Gamma_R/2$  dans l'équation (4.1c)).

---

1. Publication à paraître.

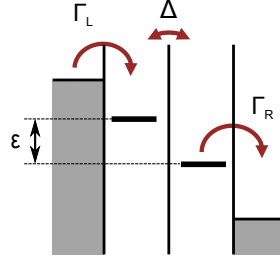


FIGURE 4.1 – Modèle utilisé pour décrire le transport à travers les deux niveaux, qui sont placés dans la fenêtre de polarisation. Trois couplages tunnel sont pris en compte : les deux couplages aux électrodes de droite et de gauche  $\Gamma_L$  et  $\Gamma_R$ , et le couplage  $\Delta$  entre les deux niveaux. Le décalage en énergie des deux niveaux est noté  $\varepsilon$ .

Les deux couplages aux électrodes ne jouent pas des rôles symétriques : l'électrode de droite permet à l'électron de s'échapper du système, alors que le couplage à l'électrode de gauche permet de préparer l'électron dans son état initial, pour qu'il puisse évoluer. Dans le premier cas la cohérence de l'électron est perdue, mais pas dans le second. Le couplage à l'électrode de droite est une source de décohérence inévitable, mais n'est pas la seule qui puisse exister. Afin de rendre compte des autres sources de décohérence (qui seront examinées plus en détail dans les parties suivantes), on a introduit dans les équations (4.1) un terme de décohérence  $\Gamma'_2$  supplémentaire (égal à l'inverse du temps de cohérence associé  $T'_2$ ). Dans la suite, on utilisera le temps de décohérence total  $T_{2,R} = \Gamma_{2,R}^{-1}$ , donné par (4.2) (l'indice  $R$  permet de rappeler que  $\Gamma_R$  contribue à ce temps de décohérence).

$$\partial\rho_L/\partial t = \Gamma_L\rho_L + i\frac{\mathcal{T}}{\hbar}(\rho_{LR} - \rho_{RL}) \quad (4.1a)$$

$$\partial\rho_R/\partial t = -\Gamma_R\rho_R - i\frac{\mathcal{T}}{\hbar}(\rho_{LR} - \rho_{RL}) \quad (4.1b)$$

$$\partial\rho_{LR}/\partial t = -\frac{1}{2}\Gamma_R\rho_R + i\frac{\varepsilon(t)}{\hbar}\rho_{LR} + i\frac{\mathcal{T}}{\hbar}(\rho_L - \rho_R) - \Gamma'_2\rho_{LR} \quad (4.1c)$$

$$\Gamma_{2,R} = \frac{1}{2}\Gamma_R + \Gamma'_2 \quad (4.2)$$

Pour simplifier les calculs, on prendra  $\mathcal{T}$  réel, et on utilisera  $\Delta = 2|\mathcal{T}|$ , la différence d'énergie entre les deux états du système lorsque  $\varepsilon = 0$ , pour exprimer les résultats. Les trois termes  $\rho_L$ ,  $\rho_R$  et  $\rho_{LR}$  sont suffisants pour décrire toute la matrice densité, qui s'écrit alors :

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_L & \rho_{LR} & 0 \\ \rho_{RL} & \rho_R & 0 \\ 0 & 0 & \rho_0 \end{pmatrix}.$$

avec  $\rho_{RL} = \rho_{LR}^*$ , et  $\rho_0 = 1 - \rho_L - \rho_R$  est la probabilité de  $|0\rangle$ . Les termes de cohérence associés à  $|0\rangle$  sont nuls car cet état représente en pratique la multitude d'états depuis (resp. vers) lesquels l'électron peut arriver (resp. s'échapper) [74]. Pour finir, afin d'exploiter ces équations, il faut pouvoir exprimer le courant en fonction de la matrice densité. Il est exprimé par (4.3) dans l'article de Stoof et Nazarov, qui donne le courant entre les deux niveaux.

On préférera écrire  $I_{ds} = e\Gamma_R\rho_R$ , qui correspond au courant entre le niveau et l'électrode de droite.

$$\langle I \rangle / e = -i \frac{\mathcal{T}}{\hbar} (\rho_R - \rho_L) \quad (4.3)$$

### 4.1.3 Cas général

Les équations précédentes décrivent le système lorsqu'il y a 0 ou 1 électron, ce qui correspond au triangle « électron ». Lorsque l'on veut décrire le triangle « trou », il ne faut plus considérer un électron, mais un trou qui se déplace de droite à gauche. En effet, l'évènement tunnel qui va construire l'état résonant décrit par les équations (4.1) est la sortie d'un électron à droite. On conserve les équations (4.1), où  $\rho$  ne décrit plus l'électron mais le trou, et on effectue les changements suivants<sup>2</sup> :  $\Gamma_R \rightsquigarrow \Gamma_L, \Gamma_L \rightsquigarrow \Gamma_R$ .

De la même façon, il faut modifier les équations lorsque l'on inverse la polarité de  $V_d$ . Pour ce faire, il faut échanger les rôles de  $\Gamma_L$  et  $\Gamma_R$  et corriger d'un facteur 2 les taux tunnel, pour rendre compte de la dégénérescence de spin. Le changement consiste à effectuer :  $\Gamma_R \rightsquigarrow \Gamma_L/2, \Gamma_L \rightsquigarrow 2\Gamma_R$ .

### 4.1.4 Décohérence

Le taux de décohérence  $\Gamma'_2$  que l'on a introduit est purement phénoménologique. Il peut être le résultat de la relaxation du système par émission d'énergie ; nous avons déjà évoqué l'émission de phonons dans la section 2.5.1, dont l'effet sur la décohérence est détaillée dans les références [70, 102, 103]. Il peut décrire aussi des variations aléatoires de la phase de l'électron, à cause du caractère aléatoire des paramètres extérieurs. Pour un qubit de charge, le paramètre ayant le plus d'effet sur la phase de l'électron est le potentiel électrostatique, qui induit une variation de  $\varepsilon$ , et donc de l'écart entre niveaux  $E = \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2}$ .

Dans un dispositif réel, le bruit électrostatique peut avoir deux origines. Il peut s'agir des fluctuations de charge dans l'environnement du qubit. La configuration des électrons localisés par des pièges change aléatoirement dans le temps, ce qui produit un champ électrostatique qui fluctue. Il peut résulter du signal envoyé sur les grilles de contrôle du dispositif, qui contient des composantes parasites. Le bruit Johnson-Nyquist, qui est généré par toute résistance non nulle placée à température finie, est une source de bruit inévitable. Il est cependant possible de réduire le bruit Johnson-Nyquist en filtrant ou en atténuant les signaux envoyés sur les grilles avec des composants de basse impédance, refroidis à basse température. Expérimentalement, nous avons mesuré les échantillons présentés dans ce manuscrit dans des cryostats équipés de câbles coaxiaux à perte, de filtres commerciaux et d'atténuateurs situés à la température de la boîte de mélange.

L'effet du bruit Johnson-Nyquist généré par l'électronique à température ambiante sur la cohérence du système a été étudié par Nakamura et collègues [104]. Son effet est double. La variation aléatoire de  $\varepsilon$  modifie l'évolution de la phase de l'électron. Il s'agit d'un effet sur la décohérence pure, qui correspond au terme  $\Gamma'_2$  de nos équations. Ce taux de relaxation ne dépend que de la densité spectrale de  $E$ ,  $S_E(\omega)$ , il est exprimé dans la référence [104]. Pour

---

2. Le symbole  $\rightsquigarrow$  signifie « devient ».

un même bruit  $S_\varepsilon(\omega)$ , l'effet sur  $S_E(\omega)$  dépend de  $E$  à travers la pente  $\frac{dE}{d\varepsilon}$ . En  $\varepsilon = 0$ , cette pente est nulle, autrement dit une variation de  $\varepsilon$  n'a pas d'effet sur  $E$  au premier ordre. Le déphasage pur induit par le bruit électromagnétique de l'environnement sera donc minimal en  $\varepsilon = 0$ .

Dans le spectre du bruit, la composante dont la fréquence correspond à l'écart entre les deux niveaux du système  $E/\hbar$ , va provoquer une transition inélastique. Le taux associé à un tel processus est donné dans les références [104] et [70] (équation (9)). Pour un bruit Johnson-Nyquist, ce taux inélastique est maximal en  $\varepsilon = 0$ .

Pour résumer, le temps de cohérence dépend de  $\varepsilon$ . Les différents taux ont des comportements différents suivant le mécanisme de décohérence considéré. Les travaux théoriques effectués dans ce domaine donnent des relations précises qui donnent les taux de décohérence en fonction de  $\varepsilon$ , mais il intègre de nombreux paramètres du système que nous ne connaissons pas (distance entre les deux dopants, couplage tunnel entre les niveaux, spectre du bruit). Nous avons donc choisi de prendre un taux de décohérence constant dans notre modèle.

## 4.2 Régime stationnaire

### 4.2.1 Équation du transport

On se place en régime stationnaire, c'est-à-dire pour  $\varepsilon(t) = \varepsilon_0$ . On obtient l'état du système en cherchant  $\rho$  constante (équations 4.4).

$$\partial\rho_L/\partial t = 0 \quad (4.4a)$$

$$\partial\rho_R/\partial t = 0 \quad (4.4b)$$

$$\partial\rho_{LR}/\partial t = 0 \quad (4.4c)$$

La solution exacte de ce problème est donnée par (4.5), le courant est alors une fonction lorentzienne de  $\varepsilon_0$ .<sup>3</sup>

$$I = \frac{e}{2} \cdot \frac{\Delta^2\Gamma_{2,R}}{\Delta^2\Gamma_{2,R}\left(\frac{1}{\Gamma_R} + \frac{1}{2\Gamma_L}\right) + (\hbar\Gamma_{2,R})^2 + \varepsilon_0^2} \quad (4.5)$$

Nous allons simplifier cette relation pour deux cas particulier.

#### 4.2.1.1 $\Delta$ faible

Lorsque  $\min(2\Gamma_L, \Gamma_R) \times \Gamma_{2,R} \gg (\Delta/\hbar)^2$ , alors la relation 4.5 se simplifie :

$$I \approx \frac{e}{2} \cdot \frac{\Delta^2\Gamma_{2,R}}{(\hbar\Gamma_{2,R})^2 + \varepsilon_0^2}$$

L'intégrale du courant en  $\varepsilon_0$  est indépendante de  $\Gamma_{2,R}$ , et vaut  $\pi\Delta^2/2\hbar$ . Dans ce cas l'effet de la décohérence est d'élargir la résonance, mais son aire est conservée (ce qui n'est pas vrai dans le cas général).

---

3. Une fonction lorentzienne centrée en  $x_0$ , qui possède une largeur à mi-hauteur  $\tilde{\Gamma}$ , est définie par  $L(x) = \frac{C}{(\frac{1}{2}\tilde{\Gamma})^2 + (x-x_0)^2}$ . Son aire vaut  $\int_{-\infty}^{+\infty} L(x)dx = \frac{2\pi}{\tilde{\Gamma}}C$ .

Si l'on a  $\Gamma_R \gg \Gamma'_2$ , alors  $\Gamma_{2,R} \approx \frac{1}{2}\Gamma_R$ . Pour un couplage tunnel  $\Gamma_R$  donné, c'est la configuration qui permet d'avoir la largeur de la résonance en courant la plus faible, avec une largeur à mi-hauteur  $\delta E \approx \hbar\Gamma_R$ . La durée du vie de l'électron dans le système  $\delta t$  sera au moins égale au temps qu'il faut à l'électron pour sortir du système grâce au couplage à l'électrode droite, donc  $\delta t > \Gamma_R^{-1}$ . Dans ce cas limite, on vérifie effectivement que la relation d'incertitude de Heisenberg est vérifiée :  $\delta E \delta t > \frac{\hbar}{2}$ .

#### 4.2.1.2 $\Delta$ élevé

Lorsque  $\Delta$  est élevé, le terme  $\Delta^2\Gamma_{2,R}(\frac{1}{\Gamma_R} + \frac{1}{2\Gamma_L})$  domine la partie constante du dénominateur de (4.5). Pour simplifier encore un peu, on va de plus considérer que l'un des taux ( $\Gamma_R$  ou  $\Gamma_L$ ) est bien plus faible que l'autre (ce qui est compatible avec les résultats de pompage du chapitre 3). Pour  $\Delta^2 \gg \hbar^2\Gamma_{2,R}\Gamma_X$ , où  $\Gamma_X$  est le taux le plus faible, la relation 4.5 se simplifie alors :

$$I \approx \frac{e}{2} \cdot \frac{\Delta^2\Gamma_{2,R}}{\frac{\Delta^2\Gamma_{2,R}}{2\Gamma_L} + \varepsilon_0^2}, \quad \text{si } \Gamma_R \gg \Gamma_L \quad (4.6)$$

$$I \approx \frac{e}{2} \cdot \frac{\Delta^2\Gamma_{2,R}}{\frac{\Delta^2\Gamma_{2,R}}{\Gamma_R} + \varepsilon_0^2}, \quad \text{si } \Gamma_L \gg \Gamma_R \quad (4.7)$$

Le courant maximal (en  $\varepsilon_0 = 0$ ) n'est pas le même si le taux limitant est  $\Gamma_R$  ou  $\Gamma_L$  : il y a un facteur 2 entre les deux. On peut l'expliquer de la façon suivante : si  $\Gamma_L$  limite le passage des électrons, dès qu'un électron tunnelle dans le système, il passera sur l'autre niveau, puis dans l'électrode de droite, en un temps négligeable. Le courant maximum sera limité par le temps qu'il lui faut pour entrer dans le système, et sera donc  $I = e\Gamma_L$ . Par contre, si  $\Gamma_R$  est le paramètre limitant, dès qu'un électron entre sur le système il se trouvera sur les deux niveaux en un temps court ( $\langle \rho_L \rangle = \langle \rho_R \rangle = 0,5$ ), car  $\Delta$  est élevé. Le courant sera limité par le temps qu'il faut aux électrons pour s'échapper,  $I = e\Gamma_R\rho_R = \frac{1}{2}e\Gamma_R$ .

### 4.2.2 Estimation des paramètres

On va utiliser la relation 4.5 pour analyser les résonances mesurées expérimentalement (qui correspondent à une coupe dans la base des triangles qui ont été présentés dans le chapitre 2). Le courant donné par cette relation ne dépend ni de la tension de polarisation  $V_d$  appliquée, ni de la position le long de la base d'un triangle où est mesurée la résonance. La relation 4.5 suppose néanmoins que les niveaux sont suffisamment éloignés des niveaux de Fermi dans les contacts. C'est en effet nécessaire pour que, d'une part, ils ne soient pas sensibles à la distribution de Fermi-Dirac des électrons dans les électrodes (de largeur caractéristique  $k_B T$ ), et, que d'autre part, chaque niveau, de largeur spectrale  $\tilde{\Gamma}$  finie, soit entièrement contenu dans la fenêtre de polarisation.

En pratique, plusieurs phénomènes vont être responsables de la variation de la résonance le long de la base d'un triangle, i) la fluctuation d'états dans les contacts rendent les taux tunnel  $\Gamma_R$  et  $\Gamma_L$  dépendant de la position des niveaux, ii) les taux tunnel peuvent être sensibles aux champs électriques qu'il y a entre les dopants et les électrodes, qui varient le long de la base des triangles, iii) un traitement théorique plus complet du problème fait apparaître des effets

(tel que le *Fermi Edge Singularity* présenté à la section 2.15), qui impliquent que les taux tunnel  $\Gamma_R$  et  $\Gamma_L$  ne sont pas constants. Lorsque l'on s'est intéressé au *Fermi Edge Singularity*, on a ainsi pu mesurer des variations d'un facteur 5 du courant le long de la base d'un triangle. En ce concerne l'échantillon GFF-As, la variation le long de la base d'un triangle est encore plus grande, comme on le verra par exemple sur la figure 4.9. Néanmoins, on constate que pour l'échantillon GFF-P, lorsque l'on reste à polarité  $V_d$  positive, le courant ne subit pas de variations de plus de 50% (figure 4.2). Pour cet échantillon, l'étude de la résonance en fonction de la valeur de  $V_d$ , et la comparaison des résonances pour les deux triangles, sont possibles.

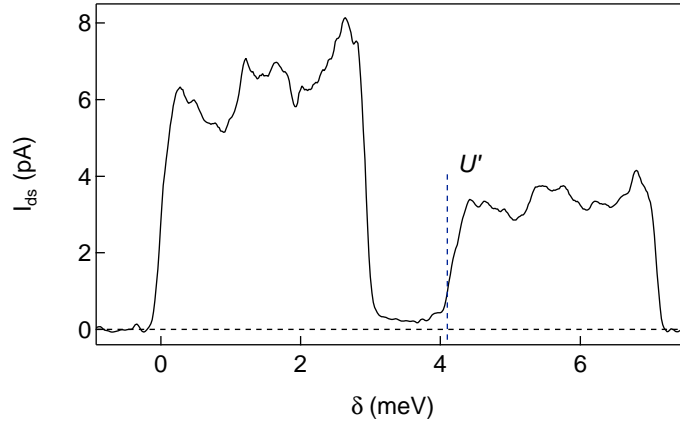


FIGURE 4.2 – Coupe le long de la base des deux triangles, au sommet de la résonance (extrait de la figure 2.8 a). L'abscisse correspond à l'énergie moyenne des niveaux du triangle « électron », comptés à partir du niveau de Fermi le plus bas (côté drain). Échantillon GFF-P,  $T = 150$  mK,  $B = 2$  T.

La figure 4.3 représente des coupes de la base d'un triangle de GFF-P pour des tensions  $V_d$  positives. Elle montre que la résonance dépend assez peu de la tension  $V_d$  appliquée, qui varie pourtant d'un facteur 32. On peut ensuite comparer les résonances associées aux triangles « électron » et « trou ». Le courant maximal au niveau de la résonance est environ deux fois plus élevé pour le triangle « électron », que pour le triangle « trou » (figure 4.2). Ceci nous laisse à penser que nous sommes dans le régime «  $\Delta$  élevé » décrit dans la section 4.2.1, avec des taux  $\Gamma_R$  et  $\Gamma_L$  très dissymétriques (ce que nous savons déjà d'après les mesures effectuées dans le chapitre 3). L'explication est décrite juste après.

Dans ce régime, le courant au sommet de la résonance ne dépend que du taux le plus faible. Le courant varie d'un facteur 2 en fonction du rôle de ce couplage tunnel (soit il permet aux électrons de rentrer dans le système, soit de les faire sortir). Or, on a vu que l'on peut changer virtuellement le rôle d'un couplage tunnel, simplement en considérant le triangle « électron » ou « trou » (section 4.1.3). Ceci explique le facteur 2 de différence entre le courant maximal des deux triangles.

En reprenant la convention des chapitres précédents pour l'échantillon GFF-P (voir figure 2.7, et figure 3.3), cela signifie que le taux tunnel limitant est  $\Gamma_S$ . On détermine alors le taux tunnel associé : le courant maximal à la résonance du triangle « électron » est d'environ 7,7 pA, ce qui donne  $\Gamma_L = 48$  MHz. Pour faire une comparaison avec les valeurs obtenues dans le chapitre 3, il faut noter que, par convention, on a exclu la dégénérescence de spin dans  $\Gamma_L$ ,

mais pas dans  $\Gamma_S$ . On trouve  $\Gamma_S = \frac{1}{2}\Gamma_L = 24$  MHz. Cette valeur est en bon accord avec les valeurs déterminées par les mesures de pompage, puisque l'on trouvait que  $\Gamma_S$  était compris entre 18 MHz et 32 MHz (voir tableau 3.1).

On représente les résonances des deux triangles de l'échantillon GFF-P sur la figure 4.4. Ces données ont été extraites de la carte de courant de la figure 2.8. On constate que les largeurs des deux résonances sont très similaires. Cette largeur à mi-hauteur vaut  $\Delta\sqrt{2\Gamma_{2,D}/\Gamma_S}$  pour le triangle « électron » et  $\Delta\sqrt{2\Gamma_{2,S}/\Gamma_S}$  pour le triangle « trou ». Pour expliquer que  $\Gamma_{2,S} \approx \Gamma_{2,D}$  alors que les taux  $\Gamma_S$  et  $\Gamma_D$  sont très différents, il faut avoir  $\Gamma'_2 \gg \Gamma_L, \Gamma_R$ . Si cette condition est vérifiée, les courants pour le triangle « électron »  $I_{e^-}$  et pour le triangle « trou »  $I_{h^+}$  sont donnés par :

$$I_i \approx \frac{e}{2} \cdot \frac{\Delta^2 \Gamma'_2}{\frac{\Delta^2 \Gamma'_2}{\beta_i (2\Gamma_S)} + \varepsilon_0^2}, \quad \text{où } \beta_{e^-} = 2 \text{ ou } \beta_{h^+} = 1$$

On superpose aux mesures les résonances lorentziennes fournies par la relation 4.5, à la lumière des éléments précédents (figure 4.4). On reprend les valeurs de  $\Gamma_D$  et  $\Delta$  obtenues au chapitre 3, et on ajoute le terme de décohérence  $\Gamma'_2$ . La quantité déterminante pour reproduire les données est  $\frac{\Delta^2}{\hbar^2} \Gamma'_2$ , que l'on trouve environ égale à  $(1,85 \text{ GHz})^3$ . Les valeurs précises de  $\Gamma_D$ ,  $\Delta$  et  $\Gamma'_2$  n'ont qu'un effet limité sur la forme des résonances. Elles ne peuvent donc pas être déterminées précisément par cette mesure.

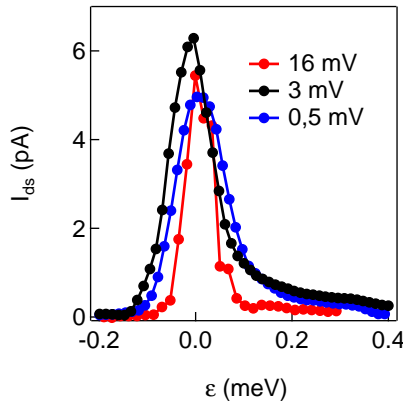


FIGURE 4.3 – Résonances (base d'un triangle) pour différentes valeurs de  $V_d$  (échantillon GFF-P,  $T = 150$  mK,  $B = 2$  T). Les résonances sont peu dépendantes de la tension  $V_d$  appliquée.

### 4.2.3 Courant inélastique

L'analyse de l'échantillon GFF-As est plus compliquée car, contrairement à l'échantillon GFF-P, la base des triangles n'est pas constante. Un paramètre du système est manifestement très sensible aux tensions de grilles. Par exemple, nous avons vu que l'amplitude tunnel  $\mathcal{T}$  peut varier très fortement lorsque l'on modifie légèrement la position relative des deux donneurs (section 3.1.1). Le caractère oscillant de  $\mathcal{T}$ , dû à un phénomène d'interférence entre les vallées du silicium, peut aussi s'exprimer en variant les tensions de grilles. Nous nous concentrerons dans cette partie sur une unique coupe effectuée dans un triangle (figure 4.5). Cette trace,

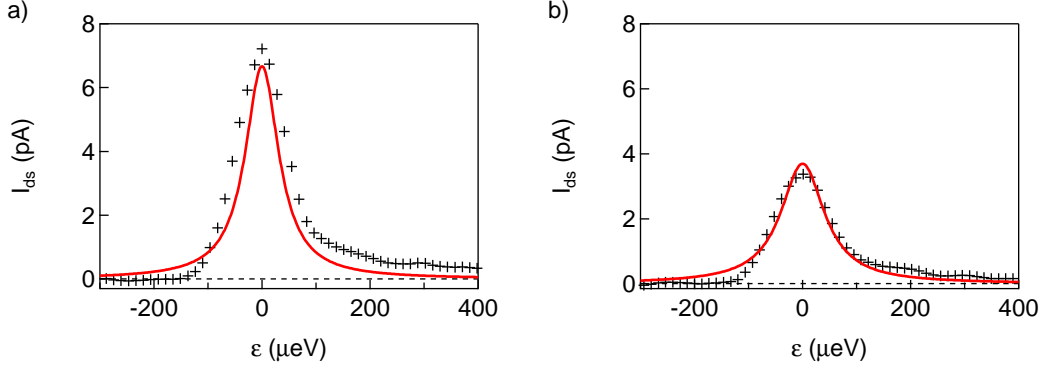


FIGURE 4.4 – Les résonances de l'échantillon GFF-P, pour les triangles « électron » (a) et « trou » (b), sont représentées par les croix ( $T = 150$  mK,  $B = 2$  T). Elles sont comparées au courant donné par la relation 4.5, en utilisant les valeurs suivantes :  $\Gamma_S = 24$  MHz,  $\Gamma_D = 670$  MHz,  $\Gamma'_2 = 4,5$  GHz et  $\Delta/h = 1,2$  GHz.

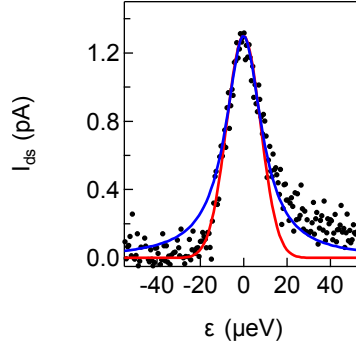


FIGURE 4.5 – Échantillon GFF-As. Résonance due à l'alignement des deux niveaux des dopants ( $V_d = 5$  mV,  $T = 17$  mK). La courbe rouge correspond à l'ajustement paramétrique d'une gaussienne, avec  $\sigma = 7,8$   $\mu$ eV. La courbe bleue est l'ajustement d'une lorentzienne à la courbe, avec  $\Gamma = 20$   $\mu$ eV.

enregistrée avec une meilleure résolution que précédemment, permet d'analyser la forme de la résonance.

Nous constatons que cette résonance est asymétrique, il y a un épaulement du côté  $\epsilon > 0$ . La forme du courant ressemble beaucoup à ce qui a été mesuré dans des boîtes quantiques double en GaAs [105], et plus tard dans un nanofil de InAs [106]. Dans ces références, les auteurs montrent que l'épaulement provient du courant inélastique dû à l'émission de phonons. Néanmoins, dans le silicium le problème est différent car, contrairement aux semiconducteurs III-V, il n'y a pas de couplage piezo-électrique possible entre les électrons et les phonons, ce qui modifie la forme du courant inélastique attendu [67].

L'étude théorique du couplage d'un système de deux donneurs aux phonons du silicium a été effectué par différents groupes [70, 107, 102, 103]. Le courant inélastique calculé a été présenté dans la section 2.5.1. D'après ce calcul, le courant inélastique n'est pas monotone : il croît à partir de  $\epsilon = 0$ , et atteint un maximum lorsque  $\epsilon$  est de l'ordre du milliélectron-volt. Il semble donc que le modèle développé ne permette pas de rendre compte des mesures



présentées ici. Dans notre système, il est possible que la taille finie du fil de silicium modifie le spectre des phonons, et leur couplage aux électrons. De plus, il existe d'autres moyens de relaxation de l'énergie qui pourraient participer au courant inélastique, tel que le couplage au champ électromagnétique. Ceux-ci n'ont pas été pris en compte dans les études théoriques.

En examinant maintenant le côté de la résonance qui correspond à  $\varepsilon < 0$ , on constate que la résonance est mieux décrite par une fonction gaussienne, que par une fonction lorentzienne (ce qui est visible aussi sur la figure 4.4). Or, le modèle développé dans ce chapitre conduit inévitablement à une lorentzienne. On a vu dans la section 4.1.4 que le temps de décohérence  $T_2'$  n'est généralement pas un paramètre constant, tel que l'on a introduit dans l'équation 4.12. On prenant un modèle un peu plus réaliste, mais qui contient plus de paramètres libres, on pourrait sûrement reproduire mieux la forme des résonances.

#### 4.2.4 Évolution en température

La résonance d'un système de deux niveaux en série possède la particularité de ne pas être sensible à la distribution des électrons dans les électrodes de source et de drain. Dans le cas d'un unique niveau (une boîte quantique entre une source et un drain), on obtient une résonance à  $V_d$  faible qui dépend de la température, lorsque la température dépasse l'élargissement intrinsèque du niveau. Elle est caractérisée par une largeur à mi-hauteur qui est égale à  $3,5 k_B T$ .

Nous avons mesuré la largeur de la résonance de notre système en fonction de la température, pour l'échantillon GFF-P (figure 4.6). À la température de base du cryostat, nous avons vu que la décohérence est en partie responsable de la largeur de la résonance (section 4.2.2). Avec l'augmentation de la température, on s'attend naturellement à avoir un temps de décohérence plus élevé (à travers le couplage aux phonons, notamment). L'élargissement de la résonance avec la température que nous observons est donc attribué à la diminution du temps de cohérence avec la température, plutôt qu'à la modification des couplages avec la température.

Nous avons comparé la largeur à mi-hauteur de la résonance de notre système (exprimée par rapport à  $\varepsilon$ ) à la largeur à mi-hauteur théorique d'un niveau thermiquement élargi. Le résultat, donné en haut à droite de la figure 4.6, montre que l'élargissement de notre résonance est plus réduit que celle d'un unique niveau. Cette caractéristique pourrait être intéressante dans la perspective d'utiliser la résonance de ce système pour détecter des variations de charge. Il serait alors possible d'avoir une sensibilité meilleure que les transistors à un électrons utilisés couramment en tant que détecteurs de charge.

### 4.3 Évolution cohérente en régime dynamique

Nous avons déjà étudié le régime dynamique du système de deux dopants en série au chapitre 3. Pour simuler le courant pompé par le système, nous avons décrit le croisement des deux niveaux par une transition Landau-Zener, qui elle est un processus cohérent. Le courant global dans l'expérience de pompe à électrons est le résultat de processus incohérents (les passages tunnel dans les contacts), et d'un processus cohérent (la transition Landau-Zener). Il est cependant difficile de dégager l'effet de l'un ou de l'autre des mécanismes, ce qui ne permet pas d'étudier la cohérence de la transition Landau-Zener.

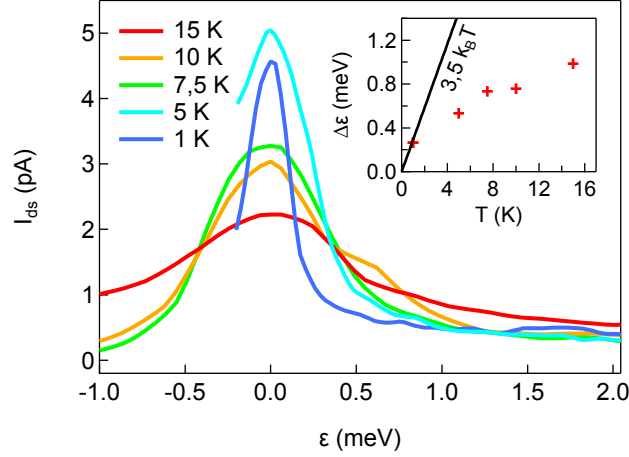


FIGURE 4.6 – Évolution de la base du triangle en fonction de la température (échantillon GFF-P). La largeur à mi-hauteur des résonances est indiquée en insert, et comparée à une dépendant en  $3,5 k_B T$  caractéristique du transport par effet tunnel résonant à travers un seul niveau.

Dans cette partie nous allons nous concentrer sur l'évolution cohérente du système. Les équations 4.1 décrivent cette évolution, et intègrent en plus un terme de décohérence. Nous étudierons la solution de ces équations dans deux cas particuliers. Dans un premier temps nous regarderons la transition Landau-Zener et principalement l'effet de la décohérence sur celle-ci. Enfin nous étudierons son homologue lorsque l'on multiplie les passages de l'anti-croisement, qui est connue sur le nom d'interférométrie de Landau-Zener-Stückelberg.

### 4.3.1 Transition Landau-Zener

On revient sur la transition Landau-Zener que l'on a utilisée dans le modèle du chapitre 3. Les équations 4.1 contiennent toute la physique nécessaire pour décrire une telle transition. Dans le modèle théorique, il n'y a pas les couplages  $\Gamma_S$ ,  $\Gamma_D$ , ni le temps de décohérence  $\Gamma'_2$ . À l'instant initial, un électron est localisé sur l'un des deux niveaux ( $\rho_L = 1$ , par exemple). On fait ensuite varier  $\varepsilon$  de  $-\infty$  à  $+\infty$  à une vitesse constante  $v$ . La probabilité de la transition Landau-Zener sera donnée par la probabilité  $\rho_R$  à  $t = +\infty$ .

On propose de résoudre numériquement ce problème. Pour ce faire, on choisit les bornes de variation de  $\varepsilon$ , et un intervalle de temps infinitésimal  $dt$ . En pratique, on a fait varier  $\varepsilon$  de  $-10 \Delta$  à  $10 \Delta$ , en plaçant le système dans un état propre à l'instant initial. De plus on prend les taux  $\Gamma_L$  et  $\Gamma_R$  nuls (ce qui est le cas lorsque les deux niveaux se croisent sous les niveaux de Fermi des contacts). Un exemple du résultat de ce calcul est donnée en figure 4.7, où l'on peut voir l'évolution des probabilités  $\rho_L$  et  $\rho_R$  en fonction du temps (le temps 0 est choisit pour coïncider avec le moment où  $\varepsilon = 0$ ). Les oscillations de ces deux probabilités traduisent le caractère cohérent de la transition.

On représente sur la figure 4.8 la probabilité pour l'électron de rester sur le même dopant après le passage de l'anti-croisement, en fonction du couplage des états et de la vitesse de variation de  $\varepsilon$  (points violets). On vérifie bien que l'on retrouve la dépendance exponentielle prévue par l'équation de Landau-Zener (équation 3.12) lorsque l'on prend un temps de

cohérence infini, à quelques déviations près.

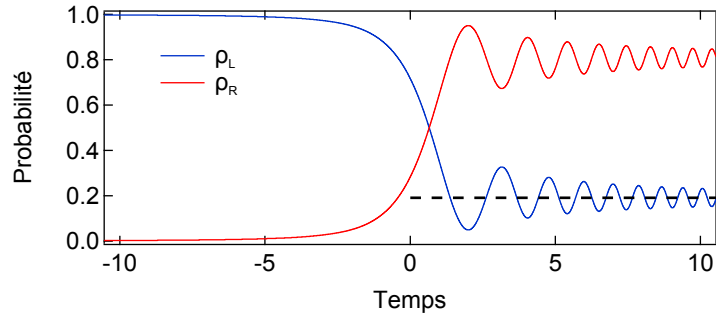


FIGURE 4.7 – Simulation de l'évolution des probabilités de présence de l'électron sur le niveau de gauche ( $\rho_L$ ) et de droite ( $\rho_R$ ) lors du croisement des deux niveaux. On a choisi les paramètres suivants :  $\frac{\Delta^2}{\hbar v} = 1,04$  et  $\Gamma'_2 = 0$ . Le temps est exprimé en unité de  $(\frac{\hbar}{\Delta})$ . La valeur donnée par la formule théorique pour une transition Landau-Zener idéale est indiquée par le tireté.

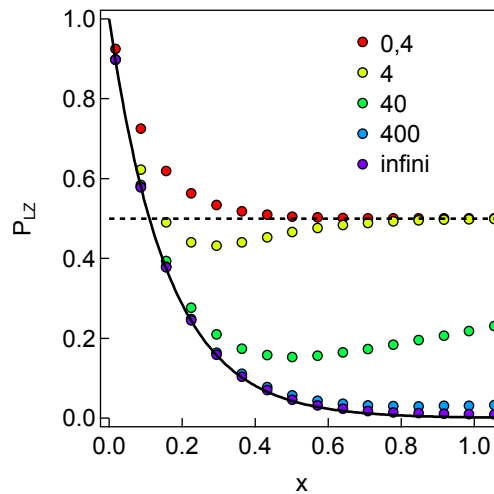


FIGURE 4.8 – Simulation de la probabilité de la transition Landau-Zener en fonction du paramètre  $x = \frac{\Delta^2}{\hbar v}$ . Le calcul a été effectué pour différentes valeurs du rapport  $\frac{\Delta}{2\Gamma'_2\hbar}$  (indiqué en légende). La courbe en trait plein représente le résultat théorique dans le cas idéal. La probabilité de transition 0,5 est indiquée par le trait pointillé.

L'écart au résultat théorique a deux origines. Il s'agit tout d'abord des erreurs liées à la résolution numérique du problème, qui dépendent principalement du choix de  $dt$ . D'autre part, on fait varier  $\varepsilon$  sur un intervalle fini, et non pas infini comme prévu par le modèle. Ce dernier point a été étudié en détail par Rubbmark et collègues [108]. Ils montrent que le choix d'un intervalle fini ne permet pas de reproduire correctement la transition lorsque  $P_{LZ}$  est proche de 1.

La décohérence modifie considérablement la transition Landau-Zener lorsque la condition  $\Gamma'_2 \gg \frac{\Delta}{\hbar}$  n'est pas vérifiée (figure 4.8). On constate que si la variation de  $\varepsilon$  est trop lente, le passage de l'anticroisement est perturbé, et le système se retrouve au final dans un mélange statistique des deux états de charge, avec une probabilité pour chacun des états qui tend vers

0,5 lorsque le temps de cohérence tend vers 0.

Pour évaluer les ordres de grandeurs pour notre système, supposons que l'on souhaite avoir  $\Gamma'_2 = \frac{\Delta}{100\hbar}$  pour que le croisement des deux niveaux soit correctement décrit par une transition Landau-Zener. Pour un couplage  $\frac{\Delta}{\hbar}$  de l'ordre du gigahertz (proche de la valeur que l'on obtiendra à la section 4.3.3.3), cela nécessite un temps de cohérence d'une centaine de nanosecondes. On connaît mal le temps de cohérence du notre système lorsque les deux niveaux sont isolés ( $\Gamma_L = \Gamma_R = 0$ ), mais avec des qubits de charge étudié en GaAs, la cohérence du système était de quelques nanosecondes (voir section 4.1.1). La décohérence du système est donc la principale limitation de modèle développé au chapitre 3.

### 4.3.2 Transport photo-assisté

On s'intéresse maintenant au transport photo-assisté, qui consiste à favoriser le passage des électrons entre les deux niveaux en utilisant l'énergie de photons uniques. En pratique, ces photons viennent de la modulation des tensions de grilles avec un signal à haute fréquence, de l'ordre du gigahertz. La fréquence  $f$  utilisée doit être de telle sorte que le quantum d'énergie  $hf$  soit supérieur à la résolution en énergie de la mesure. Les résonances les plus fines obtenues sont de l'ordre de  $20 \mu\text{eV}$  (figure 4.5), ce qui nécessite de travailler avec des fréquences supérieures à quelques gigahertz.

#### 4.3.2.1 Expérience

On a réalisé cette expérience de transport photo-assisté sur l'échantillon GFF-As, qui a été placé pour cela dans un cryostat à dilution à une température de base de 17 mK, et équipé de lignes coaxiales qui permettent de transmettre des signaux à haute fréquence. Le signal à haute fréquence est une sinusoïde qui est envoyée uniquement sur l'une des deux grilles, superposée à la tension continue  $V_{gi}$ .

On commence par mesurer le système de deux dopants à polarisation finie  $V_d = 5 \text{ mV}$ , sans modulation à haute fréquence (régime que l'on a déjà étudié au chapitre 2). Le résultat de la mesure est donnée en figure 4.9. On voit nettement la base des triangles, et quelques perturbations extérieures dont l'origine est incertaine. Étant donné que l'énergie de polarisation  $|e|V_d$  est seulement légèrement supérieure à l'énergie de répulsion coulombienne des deux dopants (qui a été mesurée à  $4,5 \text{ meV}$ , voir section 2.3.3), les deux triangles se recouvrent sur une faible portion (ce qui est difficile à voir sur la figure 4.9).

On se concentre ensuite sur le courant le long de la ligne en pointillés, qui coupe la base du triangle en un point où elle possède la plus faible largeur. En ce point, on travaille avec le triangle « trou », en étant suffisamment loin du triangle « électron ». On met ensuite en marche la source hautes fréquences, que l'on fixe à la fréquence de 15 GHz. Le courant le long de la ligne est enregistré en fonction de l'amplitude de la modulation sinusoïdale qui est envoyée sur l'une des grilles (le choix de la grille n'a pas d'effet visible sur la mesure). Le résultat de cette mesure est donné en figure 4.10.

Pour une faible amplitude de modulation, on retrouve la résonance correspondant à la base du triangle. En augmentant progressivement l'amplitude de la modulation, on voit d'abord apparaître deux résonances supplémentaires, puis deux autres, et ainsi de suite. Au final on obtient un motif symétrique par rapport à la droite définie par  $\varepsilon = 0$ . Des résonances

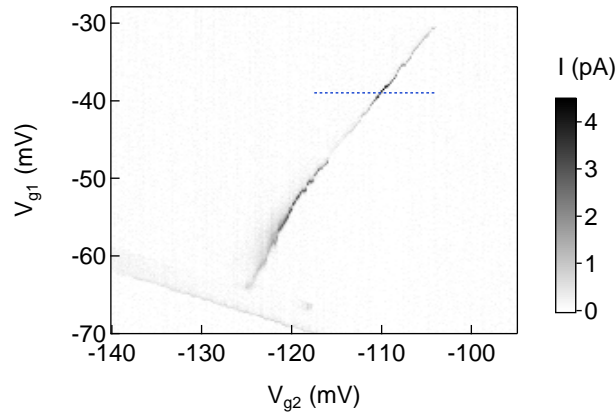


FIGURE 4.9 – Caractérisation de l'échantillon GFF-As ( $V_d = 5$  mV,  $T = 17$  mK). Les mesures de transport photo-assisté ont été effectuées le long de la ligne pointillée, où la résonance est à la fois fine et intense.

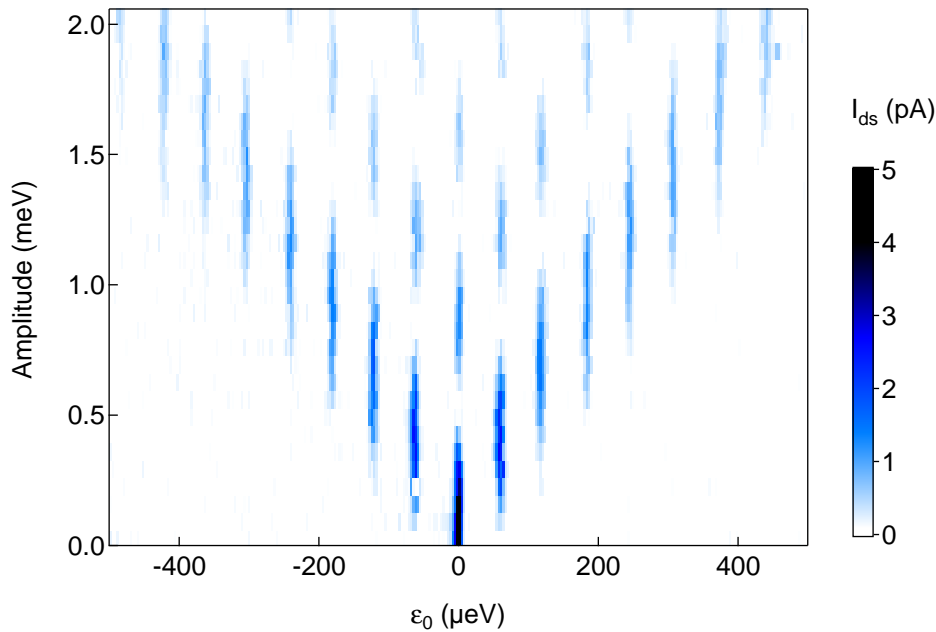


FIGURE 4.10 – Résonance correspondant à l'alignement des niveaux des dopants lorsque le système est irradié avec un signal à 15 GHz (la coupe effectuée dans le plan  $(V_{g1}, V_{g2})$  sans irradiation est représentée sur la figure 4.9). Les abscisses représentent le décalage en énergie moyen des deux niveaux  $\varepsilon_0$ , que l'on déduit des tensions de grilles et de la caractérisation du système en régime statique (voir section 2.3.3). Les ordonnées représentent l'amplitude de modulation  $\tilde{\varepsilon}$ , dont la valeur est déduite de l'ajustement à la courbe présentée en figure 4.12.

apparaissent à intervalles réguliers. Pour caractériser l'écart entre les résonances, on trace l'énergie à laquelle apparaît chaque résonance, pour trois fréquences différentes (figure 4.11). On constate que l'énergie des résonances est linéaire avec la fréquence, et le coefficient de

proportionnalité obtenu en réalisant la figure 4.11 est  $4,06 \mu\text{eV}/\text{GHz}$ , proche de la valeur de la constante de Planck attendue ( $h = 4,14 \mu\text{eV}/\text{GHz}$ ). On confirme ainsi que les résonances supplémentaires qui apparaissent correspondent effectivement à une transition entre les deux niveaux des dopants, car le facteur de conversion entre les tensions de grilles et le décalage des niveaux a été calculé à partir des triangles de la mesure de transport en régime statique (section 2.3.3).

La première explication simple de ces différentes résonances est la suivante. Lorsqu'il y a un décalage en énergie fini entre les deux niveaux, un électron ne peut pas passer de façon élastique d'un niveau à l'autre. Si on envoie un signal à haute fréquence dont l'énergie associée  $hf$  correspond exactement à l'écart entre les niveaux, un photon à cette énergie peut soit donner l'énergie nécessaire à l'électron pour passer d'un niveau à l'autre, ou stimuler l'émission d'un photon qui permettra à l'électron de dissiper l'énergie supplémentaire qu'il avait. Cette façon de décrire les mesures ne permet pas d'expliquer la modulation du courant le long d'une résonance, à une énergie  $\varepsilon$  fixe. En décrivant l'évolution du système à l'aide des équations 4.1, nous allons voir qu'il est possible de retrouver cette modulation.

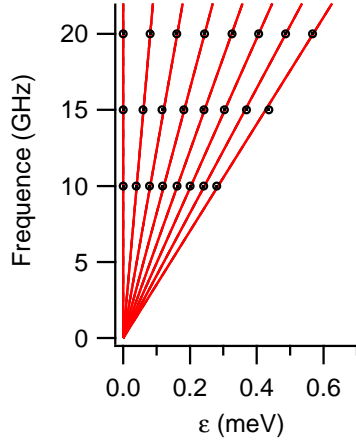


FIGURE 4.11 – Positions moyennes des résonances de transport photo-assisté en fonction de la fréquence d'excitation (cercle noir). Les données sont ajustées par une relation linéaire (droites rouges), dont le rapport de proportionnalité vaut  $4,06 \mu\text{eV}/\text{GHz}$ .

### 4.3.3 Interférences de Landau-Zener-Stückelberg

#### 4.3.3.1 L'effet Tien-Gordon

La figure obtenue précédemment rappelle l'effet Tien-Gordon, qui décrit la caractéristique d'un dispositif à deux contacts (tels qu'une source et un drain), polarisé à la fois avec une tension continue et une tension sinusoïdale [109, 74]. La caractéristique  $I_{ac}(V)$  du dispositif soumis à l'excitation haute fréquence se déduit alors simplement de sa caractéristique à tension continue  $I(V)$ . Pour une excitation sinusoïdale, la caractéristique obtenue est donnée par l'équation 4.8, où  $\tilde{V}$  est l'amplitude de la modulation, et les  $J_n$  sont les fonctions de Bessel du premier type.

$$I_{ac}(V) = \sum_n J_n^2(e\tilde{V}/hf)I(V + hfn/e) \quad (4.8)$$

La différence majeure entre notre système et le modèle Tien-Gordon réside dans le fait que l'on applique le signal à haute fréquence à une grille et non à une électrode de contact. Cependant, la dépendance en  $J_n^2$  des résonances pour chaque ordre  $n$  est quasiment retrouvée.

#### 4.3.3.2 Expressions pour le courant

En s'inspirant du travail de Tien et Gordon, Stoof et Nazarov ont calculé le courant attendu dans le cas précis de deux niveaux discrets en série entre une source et un drain [101]. Leur modèle intègre le couplage des deux niveaux aux électrodes ( $\Gamma_S$  et  $\Gamma_D$ ), et il suppose que la tension source-drain est suffisamment grande pour que les deux niveaux soient toujours dans la fenêtre de polarisation. Ils partent des équations 4.1 (sans le terme de décohérence  $\Gamma'_2$ ), et traduisent l'effet du signal haute fréquence par l'évolution sinusoïdale de  $\varepsilon$  :  $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + \tilde{\varepsilon}\cos(2\pi ft)$ . Le résultat de leur calcul donne le courant  $I_{ds}$  en fonction de  $\varepsilon_0$  et de  $\tilde{\varepsilon}$  (équation 4.9). On remarque que le couplage  $\Gamma_L$  n'a pas survécu aux quelques approximations faites au cours des calculs, et n'apparaît pas dans le résultat final. Les approximations réalisées consistent à considérer  $\Delta \ll \Gamma_R, \Gamma_L$ , c'est-à-dire que le processus qui limite le courant est le passage des électrons du niveau de gauche à celui de droite.

$$I_{ds} = \frac{e}{4}\Gamma_R \sum_n \frac{\Delta^2 J_n^2(\frac{\tilde{\varepsilon}}{hf})}{\frac{1}{4}(\hbar\Gamma_R)^2 + (nhf - \varepsilon_0)^2} \quad (4.9)$$

Un calcul similaire a aussi été effectué par Oliver et collègues [110] et Shevchenko et collègues [111] en considérant plus généralement un système à deux niveaux couplés, incluant un terme de relaxation (caractérisé par un temps  $T_1$ ), et de décohérence (associé à un temps caractéristique  $T_2$ ). Leurs travaux ont été motivés par les expériences réalisées à l'aide de circuits supraconducteurs qui se comportent comme des systèmes à deux niveaux [110]. En s'inspirant de leurs calculs, on exprime la probabilité d'occupation du niveau  $|R\rangle$  en incluant le terme de décohérence  $T'_2$ . Pour cela, on se place dans le cas  $\Gamma_L \sim +\infty$ , où  $\Gamma_R^{-1}$  joue le même rôle que  $T_1$ . On en déduit le courant  $I_{ds}$  (équation 4.10).

$$I_{ds} = e\Gamma_R\rho_R = \frac{e}{2} \sum_n \frac{\Delta^2 J_n^2(\frac{\tilde{\varepsilon}}{hf})}{\frac{\hbar^2\Gamma_R}{T_{2,R}} + \Gamma_R T_{2,R}(nhf - \varepsilon_0)^2 + \Delta^2 J_n^2(\frac{\tilde{\varepsilon}}{hf})} \quad (4.10)$$

En partant de cette relation, on vérifie que l'on retrouve le courant donnée par la relation 4.9 en réalisant deux manipulations. D'une part on prend  $T'_2 = \frac{2}{\Gamma_R}$ , c'est-à-dire qu'on considère que la seule source de décohérence est le couplage à l'électrode de droite. Ensuite on néglige le terme en  $\Delta^2$  au dénominateur.

Pour finir, on introduit dans la formule du courant un taux tunnel  $\Gamma_L$  fini. L'effet du taux tunnel  $\Gamma_L$  est de ralentir le passage des électrons : lorsqu'un électron quitte le système en partant dans l'électrode de droite, il faut attendre qu'un nouvel électron entre par l'électrode de gauche pour recommencer un cycle. De façon approchée, on va alors considérer que le temps moyen qu'il faut à un électron pour passer de la source au drain est la somme de la durée dont

il a besoin pour i) entrer dans le système par l'électrode de gauche, ii) passer sur l'autre niveau et s'échapper dans l'électrode de droite (dont le temps moyen est donné par la relation 4.10). On exprime alors le courant par la relation 4.11. Pour des fréquences suffisamment élevées, les résonances sont bien séparées les unes des autres, on peut donc supposer que le courant est donné par au plus un seul terme de la somme sur  $n$  de  $\rho_R$ . Le courant  $I_{ds}^{(n)}$  associé à l'ordre  $n$  est donné par la relation 4.12.

$$I_{ds} = e \cdot \frac{1}{(\Gamma_R \rho_R)^{-1} + \Gamma_L^{-1}} \quad (4.11)$$

$$I_{ds}^{(n)} = \frac{e}{2} \frac{\Delta^2 J_n^2\left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\hbar f}\right)}{\frac{\hbar^2}{T_{2,R}} + T_{2,R}(n\hbar f - \varepsilon_0)^2 + \left(\frac{1}{\Gamma_R} + \frac{1}{2\Gamma_L}\right)\Delta^2 J_n^2\left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\hbar f}\right)} \quad (4.12)$$

On vérifie que la relation 4.12 donne bien exactement le même courant que la solution exacte (4.5) lorsque  $\tilde{\varepsilon} = 0$  (étant donné que  $J_0(0) = 1$ ).

#### 4.3.3.3 Comparaison à l'expérience

Pour comparer le résultat de l'expérience (figure 4.10) avec les relations précédentes, on choisit de représenter l'aire des résonances en intégrant le courant sur  $\varepsilon_0$ . Cette représentation apporte deux avantages : i) on obtient ainsi un meilleur rapport signal sur bruit car le calcul de l'aire prend en compte plusieurs points de mesure, ii) le calcul de l'aire fait disparaître le terme de décohérence  $T_{2,R}$ , qui peut alors être étudié indépendamment. Le calcul de l'aire des résonances à partir de l'expression du courant par Stoof et Nazarov (4.9) et par l'expression 4.12 est donnée respectivement par les relations 4.13 et 4.14.

$$A = \frac{\pi e \Delta^2}{2\hbar} J_n^2\left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\hbar f}\right) \quad (4.13)$$

$$A^{(n)} = \frac{\pi e \Delta^2}{2\sqrt{\eta \Delta^2 J_n^2\left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\hbar f}\right) + \hbar^2}} J_n^2\left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\hbar f}\right) \quad (4.14)$$

Le paramètre  $\eta$  est défini par  $\eta = T_{2,R} \left(\frac{1}{\Gamma_R} + \frac{1}{2\Gamma_L}\right)$ .

En réalisant l'ajustement de ces deux relations aux données expérimentales, on constate que la relation de Stoof et Nazarov ne permet pas de décrire suffisamment bien les données (figure 4.12). Il faut utiliser la relation 4.14 pour décrire précisément les données, particulièrement pour l'ordre 0, où la différence est la plus grande. L'ajustement donne les valeurs suivantes :  $\eta = 4 \text{ ns}^2 \pm 1 \text{ ns}^2$  et  $\Delta = 0,5 \mu\text{eV} \pm 0,05 \mu\text{eV}$  (exprimée en fréquence :  $\Delta/h \approx 120 \text{ MHz}$ ). On voit donc que le paramètre  $\eta \Delta^2$  ne peut pas être négligé par rapport à  $\hbar^2$ .

Pour déterminer le temps de cohérence  $T_{2,R}$ , on se sert de la largeur de la résonance donnée par (4.14) à  $\tilde{\varepsilon} = 0$  :

$$\tilde{\Gamma} = \frac{2}{T_{2,R}} \sqrt{\hbar^2 + \eta \Delta^2}$$



On trouve  $T_{2,R} = 0,12$  ns. Ce temps de décohérence intègre à la fois le couplage  $\Gamma_R$  à l'électrode de droite, et le temps de décohérence  $T'_2$  dû à l'environnement (relation 4.2). Il n'est pas possible de séparer les deux, car on ne connaît ni l'un, ni l'autre. Par définition du paramètre  $\eta$ , on en déduit que  $\Gamma_R$  et  $\Gamma_L$  sont supérieurs à 30 MHz. Si  $\Gamma_R$  était responsable de la décohérence, on aurait  $\Gamma_R \approx 2\Gamma_D \approx 16,5$  GHz, qui représente la limite supérieure de  $\Gamma_R$ .

Contrairement aux mesures en régime statique, et les mesures effectuées en régime dynamique présentées au chapitre 3, on a été en mesure de sonder directement la cohérence du système grâce à cette mesure de transport photo-assisté. Il est possible d'extraire certaines quantités de cette mesure, et plus particulièrement le couplage entre les deux niveaux. Comme nous l'avons vu, les paramètres du système peuvent changer avec les tensions de grilles. L'avantage de l'analyse précédente est de pouvoir être effectuée en un point unique de la résonance.

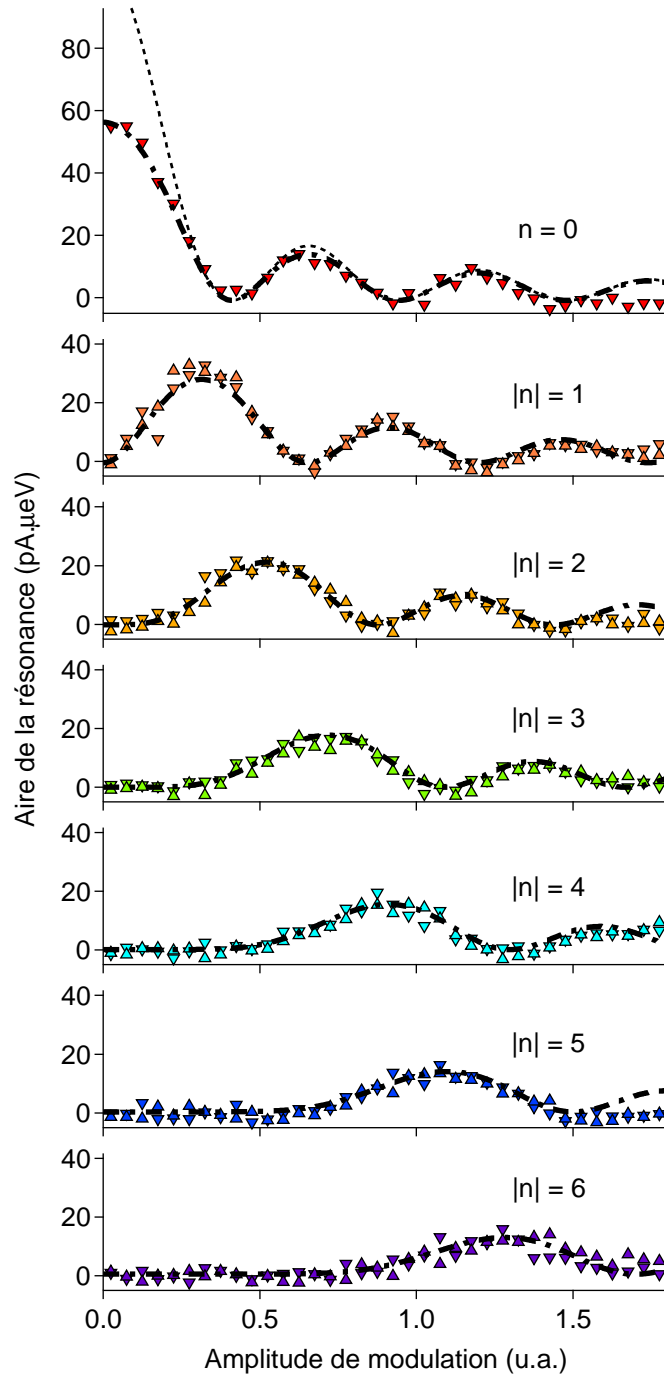


FIGURE 4.12 – Représentation de l’aire des pics de résonance de la figure 4.10 en fonction de l’amplitude du signal haute fréquence (unité arbitraire). Ces aires ont été calculées indépendamment pour chaque ordre  $n$ . On a regroupé les ordres possédant la même valeur absolue (un ordre négatif correspond à un triangle orienté vers le bas, un ordre positif à un triangle orienté vers le haut). L’ajustement aux données de la relation 4.14 est indiqué par le trait mixte, il permet de déterminer le facteur de conversion entre l’amplitude du signal envoyé, et  $\tilde{\varepsilon}$ . On représente aussi l’ajustement de l’ordre 0 par la relation 4.13 en trait pointillé.

# Conclusion

Nous avons étudié des dispositifs en silicium fabriqués par un procédé industriel. Cette technologie mûre, grâce à laquelle nous avons pu utiliser des électrodes métalliques afin de contrôler un petit volume de silicium, nous a permis d'étudier des dopants uniques. Grâce à notre dispositif, nous avons été capables de faire circuler des électrons à travers deux dopants en série, en ayant un contrôle indépendant sur les deux dopants.

Les dopants permettent de localiser un électron dans une matrice de silicium comme s'il s'agissait de boîtes quantiques. Mais ils possèdent de nombreux avantages sur ces dernières. Tout d'abord, le potentiel créé par un dopant est bien connu théoriquement. Il a fait l'objet de plusieurs expériences lorsqu'il est isolé dans un cristal de silicium massif. Ces expériences ont permis de déterminer son spectre en énergie. Lorsqu'un dopant est placé dans une nanostructure, ses caractéristiques sont modifiées, mais il est possible de les déterminer par simulation numérique. Contrairement aux boîtes quantiques, le potentiel attractif du dopant est créé sans avoir à combiner la croissance de matériaux différents. Il n'est pas non plus nécessaire d'avoir recours à des étapes de lithographie, qui possèdent un certain degré de variabilité. Le dopant crée un potentiel attractif à l'échelle atomique, qui permet de confiner les électrons avec des énergies élevées.

Le silicium présente une bande de conduction 6 fois dégénérée. La séparation en énergie des premiers états d'une boîte quantique est souvent faible à cause de cette dégénérescence de vallée. Les dopants, quant à eux, lèvent naturellement cette dégénérescence grâce à leur potentiel de confinement, dont la taille est comparable à la maille atomique du cristal hôte. Dans le silicium massif, l'écart entre les deux premiers niveaux du phosphore vaut environ 11,7 milliélectron-volt, et chute lorsque qu'il est inséré dans une nanostructure. Pour mesurer le spectre d'un dopant, nous avons utilisé une méthode originale qui consiste à se servir de l'état fondamental de l'un des dopants comme d'un filtre en énergie pour les électrons, afin de sonder les niveaux de l'autre dopant. Contrairement à la spectroscopie d'un dopant unique, cette méthode permet de séparer les effets de fluctuation de densité d'états dans les contacts, et la présence d'états excités. Nous avons aussi mesuré un écart entre les premiers états d'environ 10 milliélectron-volt. Ceci représente la valeur la plus élevée jamais obtenue par mesure de transport.

Les possibilités offertes par un dispositif à deux dopants sont bien plus nombreuses que celles accessibles avec un dopant unique. En particulier, nous avons utilisé ce dispositif pour réaliser une pompe à électron. Dans cette expérience, un courant électrique est produit par le dispositif grâce à une variation périodique de l'énergie des états des dopants à l'aide des tensions de grille. Nous avons effectué cette expérience à différentes fréquences. À faible fréquence, nous mesurons un courant quantifié qui correspond au passage d'un électron par cycle.

À plus haute fréquence, le courant dépend de la tension de grille moyenne. Les mesures ont été décrites avec une bonne fidélité en utilisant un modèle qui ne prend en compte que les trois couplages tunnel les plus importants du problème, et un taux de relaxation inélastique. On a ainsi observé l'évolution entre les régimes adiabatique et non-adiabatiques de la pompe à électron.

Un électron qui est partagé entre les deux dopants forme un bit quantique de charge. Nous avons sondé la cohérence de ce système en l'irradiant avec des signaux à des fréquences supérieures au gigahertz. Des mesures de transport photo-assisté mettent en évidence le passage d'électrons entre les dopants par absorption ou émission de photons. Cette expérience, qui correspond à la réalisation d'interférences de Landau-Zener-Stückelberg, montre qu'il est possible d'échanger un électron entre deux dopants de façon cohérente. Les ajustements aux données permettent de plus d'extraire le couplage entre les deux dopants, qui n'a pas pu être obtenu autrement.

De façon générale, nous constatons qu'un système de deux dopants permet d'obtenir une signature plus claire de phénomènes physiques qu'avec des boîtes quantiques usuelles, car les énergies mises en jeu sont plus grandes. En effet, lors de l'expérience de pompe à électron, les données ont pu être décrites en prenant un modèle à température nulle, car l'amplitude de variation de l'énergie des niveaux est bien plus grande que l'énergie d'excitation thermique. Dans le cas du transport photo-assisté, il a été possible d'atteindre des amplitudes de modulation de quelques milliélectron-volts, qui permettent d'observer clairement un motif d'interférence, mettant en jeu jusqu'à 7 photons.

L'étude des dopants uniques est en plein développement. La réalisation récente la plus notable consiste à placer des dopants à l'aide d'un STM dans une matrice de silicium avec une résolution spatiale atomique. Lorsqu'elle sera parfaitement au point, cette technique permettra de réaliser des architectures à dopants uniques plus complexes. En attendant, les paires de dopants n'ont pas encore dévoilées toutes leurs capacités. Il serait intéressant de contrôler de façon plus précise l'état de charge d'un électron partagé entre deux dopants, en mesurant par exemple les oscillations de Rabi de la position de l'électron. De même, le spin de l'électron dans ce système reste encore à étudier. Pour finir, nous avons constaté que les couplages tunnel de ce système sont sensibles aux tensions de grille. La prochaine étape consiste peut-être à obtenir un meilleur contrôle de ces couplages. On peut imaginer, pour cela, concentrer plus de grilles au voisinage des dopants.

## Annexe A

# Techniques expérimentales

### Mesures électriques

Les échantillons que nous avons mesurés sont relativement impédants, de  $1\text{ k}\Omega$  pour les moins résistifs, à des résistances supérieures au  $\text{G}\Omega$  (limite de la mesure). C'est pourquoi nous les avons polarisés en tension. Nous avons effectué une mesure de courant en deux fils, en négligeant généralement la résistance des lignes, qui est de l'ordre de la centaine d'Ohm. Nous avons utilisé un amplificateur de courant fabriqué au laboratoire (dont le schéma simplifié est représenté sur la figure A.1), fonctionnant sur batterie, ce qui permet d'éliminer les boucles de masse et d'éviter ainsi les signaux parasites à 50 Hz. Des sources de tension opto-isolées, dont la conception et la fabrication ont été effectuées au laboratoire, ont été utilisés pour contrôler les tensions de grille, et la tension source-drain.

L'électronique à température ambiante a été enfermée dans des boîtiers métalliques afin de la blinder des champs électriques parasites. Toutes les liaisons électriques entre l'électronique et le cryostat sont assurées par des câbles blindés (lignes coaxiales) jusqu'à l'échantillon situé dans le cryostat. Leur masses sont reliées à la terre en un seul point. L'échantillon est enfermé dans une enceinte métallique et connecté par des lignes de transmission de type « micro-coax » (voir figure A.1), qui assurent un filtrage des hautes fréquences (supérieures aux GHz).

### Mesures à haute fréquence

Les mesures à fréquence finie de l'échantillon GFF-P (pompage d'électrons) ont été effectuées en combinant les signaux à haute fréquence aux tensions continues grâce à un « Bias Tee » (Mini-Circuit ZFBT-4RZGW+) situé à température ambiante. Les signaux ont été transmis à travers les « micro-coax », dont l'atténuation croît avec la fréquence, mais permet néanmoins de travailler jusqu'à environ 1 GHz. Les signaux ont été générés par deux sources de tensions sinusoïdales (Agilent MXG N5181A) synchronisées par une horloge de référence commune. Le déphasage de ces deux sources a été calibré à température ambiante à chaque changement de fréquence de fonctionnement.

Les mesures de l'échantillon GFF-As ont été effectuées dans un autre cryostat équipé de deux lignes coaxiales afin de transmettre des signaux jusqu'à 20 GHz avec un niveau de

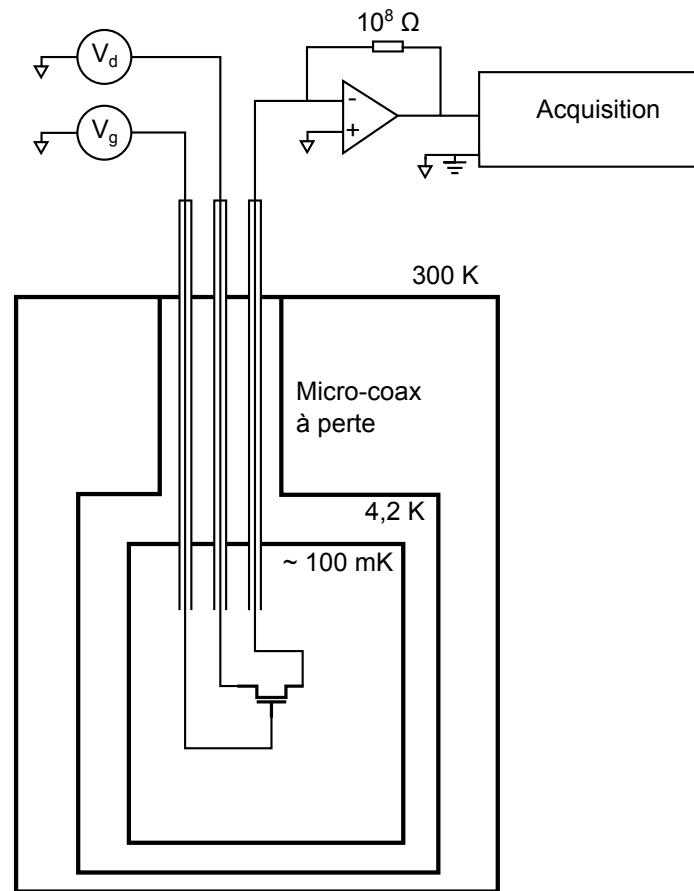


FIGURE A.1 – Schéma du montage expérimental. L'échantillon (représenté ici par un transistor simple à une seule grille) est placé dans une enceinte métallique, à l'intérieur d'un cryostat à dilution.

pertes acceptable. Des atténuateurs ont été répartis le long de ces lignes afin de filtrer le bruit provenant des appareils à température ambiante. Les signaux à haute fréquence et basse fréquence ont été combinés à quelques centimètres de l'échantillon grâce à un « Bias Tee » réalisé au laboratoire. Toute la mise en place de cette expérience a été effectuée par Eva Dupont-Ferrier.

## Annexe B

# Caractérisation des échantillons à température ambiante

### Fabrication des lots d'échantillons

Les échantillons sont fabriqués par un procédé industriel sur des plaques de silicium de 200 mm de diamètre. Les technologies de fabrication sont similaires à celles des puces électroniques qui sont capables d'atteindre des densités d'environ un milliard de transistors par  $\text{cm}^2$ . La densité d'échantillons sur nos plaques est bien moindre car une place considérable est requise afin de réaliser les plots de contacts (figure B.1), qui vont permettre de venir mesurer un dispositif spécifique isolé. On peut estimer qu'un dispositif nécessite au total une surface de  $50000 \mu\text{m}^2$ , ce qui permet de placer théoriquement plus de 500 millions de dispositifs sur une plaque. En pratique, cela poserait deux problèmes techniques pour réaliser un si grand nombre d'échantillons. Il faudrait d'une part réaliser des masques UV pour la réalisation de l'encapsulation, dédié à ce travail, ce qui représente un coût considérable. D'autre part, l'insolation de la résine avec un faisceau d'électron prendrait beaucoup de temps. En pratique nous utilisons des masques UV commun avec de nombreuses équipes du LETI, dans lequel des places vides permettent de dessiner nos dispositifs à l'aide d'une lithographie électronique. Le temps d'insolation e-beam a été limité à une heure par plaque afin de partager équitablement l'appareil qui effectue cette opération avec les autres utilisateurs du LETI. Il en résulte que sur chaque plaque, 12 puces, soit environ un tiers des puces disponibles, ont été insolé en e-beam. Au final, une puce comporte environ 200 échantillons différents (figure B.2), soit 2500 dispositifs par plaque. Un lot d'échantillons, qui comporte généralement 20 plaques, correspond alors à 50000 dispositifs.

Avec cette capacité à réaliser un grand nombre d'échantillons, il est possible de faire varier de nombreux paramètres pour étudier les effets de chacun d'eux. Au sein d'une puce, tous les dispositifs sont dessinés avec une géométrie différente. Les paramètres géométriques qui changent sont la morphologie de l'échantillon, qui peut comporter une, deux, trois, voire quatre grilles, la disposition des grilles qui peuvent être en série ou face à face, et enfin les dimensions du dispositifs : longueur de grille, largeur du fil de silicium ou distance entre les grilles (l'influence de ces paramètres sur les mécanismes de transport ont été étudié lors de la thèse de Mathieu Pierre [57]). Les puces sont répétées douze fois à l'identique sur chaque plaque, ces douze copies sont les seules qui permettent d'avoir des échantillons nominalement

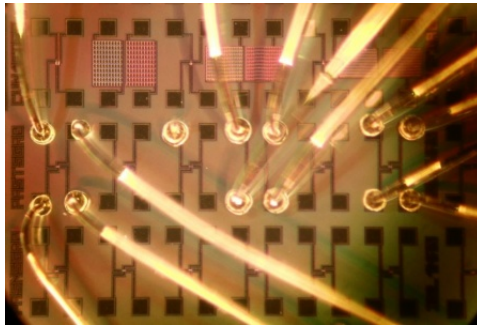


FIGURE B.1 – Vue au microscope optique de trois barrettes, qui contiennent chacune 6 échantillons. Des fils d’or sont utilisés afin de connecter les plots de mesure pour les études à basse température.

identiques au sein d’un même lot (figure B.3). Les différentes plaques, quant-à elles, ont toutes des procédés de fabrication différentes. Les paramètres de fabrication qui varient entre chaque plaque sont les suivants :

- La hauteur du fil de silicium : 8 nm, 10 nm, 12 nm, 20 nm ou 25 nm.
- La taille des espaceurs : 15 nm, 10 nm + 15 nm (voir chapitre 1), 40 nm ou 45 nm.
- Le dopage du canal. On a utilisé des dopants phosphore, arsenic, sélénium et bore, à des concentration allant de  $1.10^{17} \text{ cm}^{-3}$  à  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L’orientation du dopage : standard ou avec un angle de  $55^\circ$ .
- Le *trimming* éventuel des structures. Il s’agit d’une opération qui consiste à réduire la taille d’une structure après l’étape de lithographie.
- La siliciuration éventuelle des contacts, qui consiste à modifier les électrodes de source et de drain en transformant le silicium en un alliage métallique : le NiSi.

## Mesures automatiques

Le LETI dispose d’un système expérimental complet pour effectuer des mesures automatiques sur une plaque. Ce système comprend un support motorisé permettant à la fois un déplacement horizontal et vertical de la plaque. Ce déplacement est effectué avec une précision de quelques micromètres seulement. Ce support permet de mettre en contact les 24 plots de mesure d’une barrette avec une carte comportant 24 pointes adaptées aux barrettes. Ces pointes sont reliées à un appareil de caractérisation de dispositifs de la microélectronique à travers un multiplexeur. Pour fonctionner, ce système a besoin d’être programmé pour venir mesurer automatiquement chaque dispositif présent sur la plaque. La mesure d’une plaque consiste alors à venir placer manuellement la plaque sur le support, puis les pointes doivent être positionnées précisément et alignées par rapport aux barrettes. Le programme peut ensuite être exécuté, s’ensuit alors la mesure un à un des dispositifs grâce au déplacement automatique du support. La mesure d’une plaque entière nécessite une dizaine d’heures. À l’issue du programme, chaque mesure effectuée sur un échantillon est enregistrée sous forme textuelle dans un fichier. La caractérisation complète d’un lot d’échantillon correspond alors à plus de 100 000 mesures. L’aspect inhabituel des échantillons et des mesures requises par rapport aux travaux effectués en micro-électronique a nécessité de développer nous même les





présenté en détail dans le chapitre 1. Cette mesure à température ambiante nous indique que cet échantillon est potentiellement intéressant à basse température. En effet, il ne présente pas de défaut de fabrication. On trouve parmi les défauts de fabrication les plus courants :

- Une fuite de grille, c'est-à-dire qu'un courant peut traverser l'oxyde de grille pour des tensions de fonctionnement normales. Le courant de grille n'est pas représenté sur la figure B.4, mais il est inférieur à la sensibilité de la mesure.
- Un mauvais alignement de la lithographie des grilles par rapport au fil de silicium. Dans cet exemple, les deux grilles ne présentent pas un effet de champ identique. Il arrive qu'une grille n'a pas du tout d'effet de champ, cela signifie qu'elle ne recouvre plus le fil de silicium.
- Si le corps du transistor a reçu une trop forte dose de dopants lors de l'implantation, alors le rapport de courant entre l'état passant et l'état fermé du dispositif chute considérablement. Il est préférable d'éviter de mesurer un tel échantillon si l'on souhaite faire passer un courant à travers deux dopants isolés. Le processus de dopage est très bien contrôlé grâce à l'expertise du LETI dans ce domaine, mais la géométrie particulière des échantillons réalisés pour ce travail (notamment les deux grilles face à face) est un élément inhabituel qui rajoute une incertitude sur le profil de dopage du fil de silicium.

Les mesures semi-automatique à température ambiante permettent ainsi de mesurer les caractéristiques principales des échantillons, qui ont un comportement de transistors à température ambiante : tension de seuil, pente sous le seuil, résistance d'accès. Les mesures mettent en évidence que le rendement de la fabrication dépend de la plaque, et bien qu'étant plus faible que le rendement de la fabrication des transistors pour la microélectronique, les meilleurs plaques présentent un nombre de dispositifs fonctionnels à température ambiante d'environ 90 %. Ces mesures ont été utile pour déterminer les procédés technologiques, ainsi que les dimensions optimales pour obtenir un dispositif permettant de mesurer deux dopants en série (voir chapitre 1).

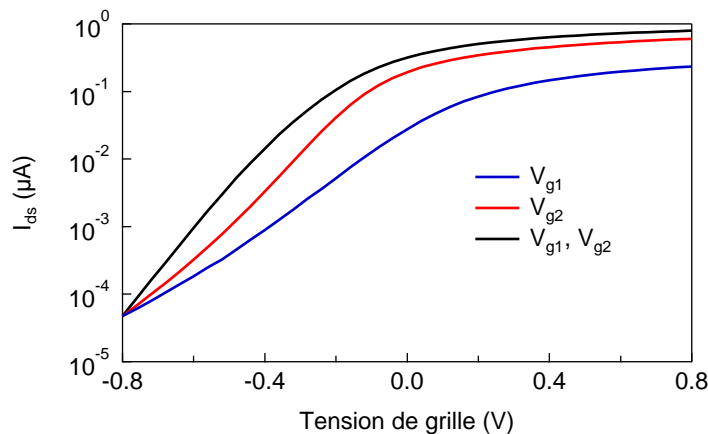


FIGURE B.4 – Caractéristiques de l'échantillon GFF-P mesuré à température ambiante. La mesure à été effectuée avec une tension  $V_d = 10$  mV. La ou les grilles dont la tension est variée sont indiquées dans la légende. Lorsqu'une seule tension de grille est variée, la seconde est maintenue à une tension de  $-0.8$  V, ce qui permet de mesurer l'effet de champ de chaque grille indépendamment de l'autre.

# Liste des publications associées

- *A gigahertz hybrid metal/semiconductor electron pump with a few part-per-million relative uncertainty and offset charge control.*  
X. Jehl, P. Clapera, S. Ray, B. Roche, B. Voisin, M. Sanquer, T. Charron, S. Djordjevic, L. Devoille, R. Wacquez, et M. Vinet.  
Soumis pour publication dans Phys. Rev. X
- *Coupling and coherent electrical control of two dopants in a silicon nanowire.*  
E. Dupont-Ferrier, B. Roche, B. Voisin, X. Jehl, R. Wacquez, M. Vinet, M. Sanquer, et S. De Franceschi.  
Phys. Rev. Lett. **110**, 136802 (2013)
- *A two-atom electron pump.*  
B. Roche, R.P. Riwar, B. Voisin, E. Dupont-Ferrier, M. Vinet, R. Wacquez, J. Spletts-toesser, M. Sanquer, X. Jehl.  
Nat. Commun. **4**, 1581 doi : 10.1038/ncomms2544 (2013)
- *Detection of a Large Valley-Orbit Splitting in Silicon with Two-Donor Spectroscopy.*  
B. Roche, E. Dupont-Ferrier, B. Voisin, M. Cobian, X. Jehl, R. Wacquez, M. Vinet, Y.-M. Niquet, et M. Sanquer.  
Phys. Rev. Lett. **108**, 206812 (2012)
- *Few electron limit of n-type metal oxide semiconductor single electron transistors.*  
Enrico Prati, Marco De Michielis, Matteo Belli, Simone Cocco, Marco Fanciulli, Dharm-raj Kotekar-Patil, Matthias Ruoff, Dieter P Kern, David A Wharam, Jan Verduijn, Giuseppe C Tettamanzi, Sven Rogge, Benoit Roche, Romain Wacquez, Xavier Jehl, Maud Vinet et Marc Sanquer.  
Nanotechnology **23**, 215204 (2012)
- *A tunable, dual mode field-effect or single electron transistor.*  
B. Roche, B. Voisin, X. Jehl, R. Wacquez, M. Sanquer, M. Vinet, V. Deshpande et B. Previtali.  
Appl. Phys. Lett. **100**, 032107 (2012)
- *Single-dopant resonance in a single-electron transistor.*  
V. N. Golovach, X. Jehl, M. Houzet, M. Pierre, B. Roche, M. Sanquer, et L. I. Glazman.  
Phys. Rev. B **83**, 075401 (2011)
- *Intrinsic and doped coupled quantum dots created by local modulation of implantation in a silicon nanowire.*  
M. Pierre, B. Roche, W. Wacquez, X. Jehl, M. Sanquer, et M. Vinet.  
J. Appl. Phys. **109**, 084346-6 (2011)

- *Patterning Strategy for Monoelectronic Device Platform in a Complementary Metal Oxide Semiconductor Technology.*  
S. Pauliac-Vaujour, R. Wacquez, C. Vizioz, T. Chevolleau, M. Pierre, B. Previtali, C. Comboroure, N. Bove, B. Roche, M. Vinet, X. Jehl, M. Sanquer, et P. Sixt.  
Jpn. J. Appl. Phys. **50** (2011) 06GF15
- *Compact silicon double and triple dots realized with only two gates.*  
M. Pierre, R. Wacquez, B. Roche, X. Jehl, M. Sanquer, M. Vinet, E. Prati, M. Belli, et M. Fanciulli.  
Appl. Phys. Lett. **95**, 242107-3 (2009)

# Références

- [1] C. W. J. BEENAKKER : Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot. Phys. Rev. B, 44(4):1646–, juillet 1991.
- [2] Edgar BONET, Mandar M. DESHMUKH et D. C. RALPH : Solving rate equations for electron tunneling via discrete quantum states. Phys. Rev. B, 65(4):045317–, janvier 2002.
- [3] M. A. KASTNER : The single-electron transistor. Rev. Mod. Phys., 64(3):849–858, juillet 1992.
- [4] S. TARUCHA, D. G. AUSTING, T. HONDA, R. J. van der HAGE et L. P. KOUWENHOVEN : Shell Filling and Spin Effects in a Few Electron Quantum Dot. Phys. Rev. Lett., 77(17):3613–3616, octobre 1996.
- [5] G. KATSAROS, P. SPATHIS, M. STOFFEL, F. FOURNEL, M. MONGILLO, V. BOUCHIAT, F. LEFLOCH, A. RASTELLI, O. G. SCHMIDT et S. DE FRANCESCHI : Hybrid superconductor-semiconductor devices made from self-assembled SiGe nanocrystals on silicon. Nat Nano, 5(6):458–464, juin 2010.
- [6] Chen YANG, Zhaohui ZHONG et Charles M. LIEBER : Encoding Electronic Properties by Synthesis of Axial Modulation-Doped Silicon Nanowires. Science, 310(5752):1304–1307, novembre 2005.
- [7] Lincoln J. LAUHON, Mark S. GUDIJKSEN, Deli WANG et Charles M. LIEBER : Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures. Nature, 420(6911):57–61, novembre 2002.
- [8] Wei LU, Jie XIANG, Brian P. TIMKO, Yue WU et Charles M. LIEBER : One-dimensional hole gas in germanium/silicon nanowire heterostructures. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 102(29):10046–10051, 2005.
- [9] Yongjie HU, Hugh O. H. CHURCHILL, David J. REILLY, Jie XIANG, Charles M. LIEBER et Charles M. MARCUS : A Ge/Si heterostructure nanowire-based double quantum dot with integrated charge sensor. Nat Nano, 2(10):622–625, octobre 2007.
- [10] W. M. WEBER, L. GEELHAAR, A. P. GRAHAM, E. UNGER, G. S. DUESBERG, M. LIEBAU, W. PAMLER, C. CHEZE, H. RIECHERT, P. LUGLI et F. KREUPL : Silicon-nanowire transistors with intruded nickel-silicide contacts. Nano Letters, 6(12):2660–2666, décembre 2006.
- [11] Massimo MONGILLO, Panayotis SPATHIS, Georgios KATSAROS, Pascal GENTILE, Marc SANQUER et Silvano DE FRANCESCHI : Joule-Assisted Silicidation for Short-Channel Silicon Nanowire Devices. ACS Nano, 5(9):7117–7123, août 2011.

- [12] F. A. ZWANENBURG, A. A. van LOON, G. A. STEELE, C. E. W. M. van RIJMENAM, T. BALDER, Y. FANG, C. M. LIEBER et L. P. KOUWENHOVEN : Ultrasmall silicon quantum dots. *J. Appl. Phys.*, 105(12):124314–5, juin 2009.
- [13] Floris A. ZWANENBURG, Cathalijn E. W. M. van RIJMENAM, Ying FANG, Charles M. LIEBER et Leo P. KOUWENHOVEN : Spin States of the First Four Holes in a Silicon Nanowire Quantum Dot. *Nano Letters*, 9(3):1071–1079, mars 2009.
- [14] Zhaohui ZHONG, Ying FANG, Wei LU et Charles M. LIEBER : Coherent Single Charge Transport in Molecular-Scale Silicon Nanowires. *Nano Lett.*, 5(6):1143–1146, mai 2005.
- [15] Hideyuki MATSUOKA et Shin'ichiro KIMURA : Transport properties of a silicon single-electron transistor at 4.2 K. *Appl. Phys. Lett.*, 66(5):613–615, janvier 1995.
- [16] E. P. NORDBERG, G. A. Ten EYCK, H. L. STALFORD, R. P. MULLER, R. W. YOUNG, K. ENG, L. A. TRACY, K. D. CHILDS, J. R. WENDT, R. K. GRUBBS, J. STEVENS, M. P. LILLY, M. A. ERIKSSON et M. S. CARROLL : Enhancement-mode double-top-gated metal-oxide-semiconductor nanostructures with tunable lateral geometry. *Phys. Rev. B*, 80(11):115331–, septembre 2009.
- [17] M. XIAO, M. G. HOUSE et H. W. JIANG : Parallel spin filling and energy spectroscopy in few-electron Si metal-on-semiconductor-based quantum dots. *Appl. Phys. Lett.*, 97(3):032103–3, juillet 2010.
- [18] Susan J. ANGUS, Andrew J. FERGUSON, Andrew S. DZURAK et Robert G. CLARK : Gate-Defined Quantum Dots in Intrinsic Silicon. *Nano Letters*, 7(7):2051–2055, juillet 2007.
- [19] N. S. LAI, W. H. LIM, C. H. YANG, F. A. ZWANENBURG, W. A. COISH, F. QASSEMI, A. MORELLO et A. S. DZURAK : Pauli Spin Blockade in a Highly Tunable Silicon Double Quantum Dot. *Sci. Rep.*, 1:–, octobre 2011.
- [20] Andrea MORELLO, Jarryd J. PLA, Floris A. ZWANENBURG, Kok W. CHAN, Kuan Y. TAN, Hans HUEBL, Mikko MOTTONEN, Christopher D. NUGROHO, Changyi YANG, Jessica A. van DONKELAAR, Andrew D. C. ALVES, David N. JAMIESON, Christopher C. ESCOTT, Lloyd C. L. HOLLENBERG, Robert G. CLARK et Andrew S. DZURAK : Single-shot readout of an electron spin in silicon. *Nature*, 467(7316):687–691, octobre 2010.
- [21] S V KRAVCHENKO et M P SARACHIK : Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems. *Reports on Progress in Physics*, 67(1):1–, 2004.
- [22] T. M. LU, D. C. TSUI, C. H. LEE et C. W. LIU : Observation of two-dimensional electron gas in a Si quantum well with mobility of  $1.6 \times 10^6$  cm<sup>2</sup>/Vs. *Applied Physics Letters*, 94(18):182102, mai 2009.
- [23] C. B. SIMMONS, Teck Seng KOH, Nakul SHAJI, Madhu THALAKULAM, L. J. KLEIN, Hua QIN, H. LUO, D. E. SAVAGE, M. G. LAGALLY, A. J. RIMBERG, Robert JOYNT, Robert BLICK, Mark FRIESEN, S. N. COPPERSMITH et M. A. ERIKSSON : Pauli spin blockade and lifetime-enhanced transport in a Si/SiGe double quantum dot. *Phys. Rev. B*, 82(24):245312–, décembre 2010.
- [24] M. G. BORSELLI, K. ENG, E. T. CROKE, B. M. MAUNE, B. HUANG, R. S. ROSS, A. A. KISELEV, P. W. DEELMAN, I. ALVARADO-RODRIGUEZ, A. E. SCHMITZ, M. SOKOLICH, K. S. HOLABIRD, T. M. HAZARD, M. F. GYURE et A. T. HUNTER : Pauli spin blockade in undoped Si/SiGe two-electron double quantum dots. *Appl. Phys. Lett.*, 99(6):063109–3, août 2011.

- [25] B. M. MAUNE, M. G. BORSELLI, B. HUANG, T. D. LADD, P. W. DEELMAN, K. S. HOLABIRD, A. A. KISELEV, I. ALVARADO-RODRIGUEZ, R. S. ROSS, A. E. SCHMITZ, M. SOKOLICH, C. A. WATSON, M. F. GYURE et A. T. HUNTER : Coherent singlet-triplet oscillations in a silicon-based double quantum dot. *Nature*, 481(7381):344–347, janvier 2012.
- [26] Max HOFHEINZ : Coulomb blockade in silicon nanowire MOSFETs. Thèse de doctorat, Université Grenoble I – Joseph Fourier, 2006.
- [27] Hongwu LIU, Toshimasa FUJISAWA, Hiroshi INOKAWA, Yukinori ONO, Akira FUJIWARA et Yoshiro HIRAYAMA : A gate-defined silicon quantum dot molecule. *Appl. Phys. Lett.*, 92(22):222104–3, juin 2008.
- [28] Martin FUECHSLE, MAHAPATRAS., ZwanenburgF. A., Mark FRIESEN, ErikssonM. A. et Michelle Y. SIMMONS : Spectroscopy of few-electron single-crystal silicon quantum dots. *Nat Nano*, advance online publication:–, mai 2010.
- [29] Martin FUECHSLE, Jill A. MIWA, Suddhasatta MAHAPATRA, Hoon RYU, Sunhee LEE, Oliver WARSCHKOW, Lloyd C. L. HOLLENBERG, Gerhard KLIMECK et Michelle Y. SIMMONS : A single-atom transistor. *Nat Nano*, 7(4):242–246, avril 2012.
- [30] A.A. PRAGER, H.C. GEORGE, A.O. ORLOV et G.L. SNIDER : Experimental demonstration of hybrid CMOS-single electron transistor circuits. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 29(4):041004–, 2011.
- [31] S. J. SHIN, C. S. JUNG, B. J. PARK, T. K. YOON, J. J. LEE, S. J. KIM, J. B. CHOI, Y. TAKAHASHI et D. G. HASKO : Si-based ultrasmall multistitching single-electron transistor operating at room-temperature. *Appl. Phys. Lett.*, 97(10):103101–, 2010.
- [32] Jim CHELIKOWSKY : Silicon in All its Forms. *MRS Bulletin*, 27(12):951–960, 2002.
- [33] WH LIM, CH YANG, FA ZWANENBURG et AS DZURAK : Spin filling of valley-orbit states in a silicon quantum dot. *Nanotechnology*, 22(33):335704, 2011.
- [34] Tsuneya ANDO, Alan B. FOWLER et Frank STERN : Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54(2):437–672, avril 1982.
- [35] H. KÖHLER et M. ROOS : Quantitative determination of the valley splitting in n-type inverted silicon (100) MOSFET surfaces. *phys. stat. sol. (b)*, 91(1):233–241, 1979.
- [36] T OUISE, D.K MAUDE, S HORIGUCHI, Y ONO, Y TAKAHASHI, K MURASE et S CRISTOLOVEANU : Subband structure and anomalous valley splitting in ultra-thin silicon-on-insulator MOSFET's. *Physica B: Condensed Matter*, 249-251(0):731–734, juin 1998.
- [37] K. TAKASHINA, A. FUJIWARA, S. HORIGUCHI, Y. TAKAHASHI et Y. HIRAYAMA : Valley splitting control in SiO<sub>2</sub>/Si/SiO<sub>2</sub> quantum wells in the quantum Hall regime. *Phys. Rev. B*, 69(16):161304–, avril 2004.
- [38] K. TAKASHINA, Y. ONO, A. FUJIWARA, Y. TAKAHASHI et Y. HIRAYAMA : Valley Polarization in Si(100) at Zero Magnetic Field. *Phys. Rev. Lett.*, 96(23):236801–, juin 2006.
- [39] A. L. SARAIVA, Belita KOILLER et Mark FRIESEN : Extended interface states enhance valley splitting in Si/SiO<sub>2</sub>. *Phys. Rev. B*, 82(24):245314–, décembre 2010.
- [40] Srijit GOSWAMI, K. A. SLINKER, Mark FRIESEN, L. M. MCGUIRE, J. L. TRUITT, Charles TAHAN, L. J. KLEIN, J. O. CHU, P. M. MOONEY, D. W. van der WEIDE, Robert JOYNT, S. N. COPPERSMITH et Mark A. ERIKSSON : Controllable valley splitting in silicon quantum devices. *Nat Phys*, 3(1):41–45, janvier 2007.

- [41] Dimitrie CULCER, A. L. SARAIVA, Belita KOILLER, Xuedong HU et S. DAS SARMA : Valley-Based Noise-Resistant Quantum Computation Using Si Quantum Dots. Phys. Rev. Lett., 108(12):126804–, mars 2012.
- [42] M. PIERRE, R. WACQUEZ, X. JEHL, M. SANQUER, M. VINET et O. CUETO : Single donor ionization energies in a nanoscale CMOS channel. Nat Nano, 5:133, décembre 2010.
- [43] W. KOHN et J. M. LUTTINGER : Theory of Donor States in Silicon. Phys. Rev., 98(4):915–922, mai 1955.
- [44] R. A. FAULKNER : Higher Donor Excited States for Prolate-Spheroid Conduction Bands: A Reevaluation of Silicon and Germanium. Phys. Rev., 184(3):713–721, août 1969.
- [45] Allen MILLER et Elihu ABRAHAMS : Impurity Conduction at Low Concentrations. Phys. Rev., 120(3):745–755, novembre 1960.
- [46] A K RAMDAS et S RODRIGUEZ : Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom: donors and acceptors in semiconductors. Reports on Progress in Physics, 44(12):1297, 1981.
- [47] Mamadou DIARRA, Yann-Michel NIQUET, Christophe DELERUE et Guy ALLAN : Ionization energy of donor and acceptor impurities in semiconductor nanowires: Importance of dielectric confinement. Phys. Rev. B, 75(4):045301–, janvier 2007.
- [48] G. P. LANSBERGEN, R. RAHMAN, C. J. WELLARD, I. WOO, J. CARO, N. COLLAERT, S. BIESEMANS, G. KLIMECK, L. C. L. HOLLENBERG et S. ROGGE : Gate-induced quantum-confinement transition of a single dopant atom in a silicon FinFET. Nat Phys, 4(8):656–661, août 2008.
- [49] Kuan Yen TAN, Kok Wai CHAN, Mikko MÖTTÖNEN, Andrea MORELLO, Changyi YANG, Jessica van DONKELAAR, Andrew ALVES, Juha-Matti PIKKALAINEN, David N. JAMIESON, Robert G. CLARK et Andrew S. DZURAK : Transport Spectroscopy of Single Phosphorus Donors in a Silicon Nanoscale Transistor. Nano Lett., 10(1):11–15, décembre 2009.
- [50] H. SELLIER, G. P. LANSBERGEN, J. CARO, S. ROGGE, N. COLLAERT, I. FERAIN, M. JURCZAK et S. BIESEMANS : Transport Spectroscopy of a Single Dopant in a Gated Silicon Nanowire. Phys. Rev. Lett., 97(20):206805–, novembre 2006.
- [51] J. KÖNEMANN, P. KÖNIG, T. SCHMIDT, E. MCCANN, Vladimir I. FAL’KO et R. J. HAUG : Correlation-function spectroscopy of inelastic lifetime in heavily doped GaAs heterostructures. Phys. Rev. B, 64(15):155314–, septembre 2001.
- [52] V. N. GOLOVACH, X. JEHL, M. HOUZET, M. PIERRE, B. ROCHE, M. SANQUER et L. I. GLAZMAN : Single-dopant resonance in a single-electron transistor. Phys. Rev. B, 83(7):075401–, février 2011.
- [53] S. R. SCHOFIELD, N. J. CURSON, M. Y. SIMMONS, F. J. RUESS, T. HALLAM, L. OBERBECK et R. G. CLARK : Atomically Precise Placement of Single Dopants in Si. Phys. Rev. Lett., 91(13):136104–, septembre 2003.
- [54] D. N. JAMIESON, C. YANG, T. HOPF, S. M. HEARNE, C. I. PAKES, S. PRAWER, M. MITIC, E. GAUJA, S. E. ANDRESEN, F. E. HUDSON, A. S. DZURAK et R. G. CLARK : Controlled shallow single-ion implantation in silicon using an active substrate for sub-20-keV ions. Appl. Phys. Lett., 86(20):202101–3, mai 2005.



- [55] Takahiro SHINADA, Shintaro OKAMOTO, Takahiro KOBAYASHI et Iwao OHDOMARI : Enhancing semiconductor device performance using ordered dopant arrays. Nature, 437(7062):1128–1131, octobre 2005.
- [56] Projet AFSiD. <http://www.afsid.eu>.
- [57] Mathieu PIERRE : Transport mono-électronique et détection de dopants uniques dans des transistors silicium. Thèse de doctorat, Université Grenoble I – Joseph Fourier, 2010.
- [58] M. BOEHM, M. HOFHEINZ, X. JEHL, M. SANQUER, M. VINET, B. PREVITALI, D. FRABOULET, D. MARIOLLE et S. DELEONIBUS : Size scaling of the addition spectra in silicon quantum dots. Phys. Rev. B, 71(3):033305–, janvier 2005.
- [59] M. PIERRE, M. HOFHEINZ, X. JEHL, M. SANQUER, G. MOLAS, M. VINET et S. DELEONIBUS : Background charges and quantum effects in quantum dots transport spectroscopy. The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems, 70:475–481, 2009. 10.1140/epjb/e2009-00258-4.
- [60] S. CHANDRASEKHAR : Stochastic Problems in Physics and Astronomy. Rev. Mod. Phys., 15(1):1–89, janvier 1943.
- [61] R. RAHMAN, J. VERDUIJN, N. KHARCHE, G. P. LANSBERGEN, G. KLIMECK, L. C. L. HOLLENBERG et S. ROGGE : Engineered valley-orbit splittings in quantum-confined nanostructures in silicon. Phys. Rev. B, 83(19):195323–, mai 2011.
- [62] M. HOFHEINZ, X. JEHL, M. SANQUER, G. MOLAS, M. VINET et S. DELEONIBUS : Capacitance enhancement in Coulomb blockade tunnel barriers. Phys. Rev. B, 75:235301, 2007.
- [63] W. G. van der WIEL, S. DE FRANCESCHI, J. M. ELZERMAN, T. FUJISAWA, S. TARUCHA et L. P. KOUWENHOVEN : Electron transport through double quantum dots. Rev. Mod. Phys., 75(1):1–, décembre 2002.
- [64] R. HANSON, L. P. KOUWENHOVEN, J. R. PETTA, S. TARUCHA et L. M. K. VANDERSYPEN : Spins in few-electron quantum dots. Rev. Mod. Phys., 79(4):1217–1265, octobre 2007.
- [65] S. J. CHORLEY, J. FRAKE, C. G. SMITH, G. A. C. JONES et M. R. BUITELAAR : Quantized charge pumping through a carbon nanotube double quantum dot. Appl. Phys. Lett., 100(14):143104–3, avril 2012.
- [66] M. G. HOUSE, H. PAN, M. XIAO et H. W. JIANG : Non-equilibrium charge stability diagrams of a silicon double quantum dot. Appl. Phys. Lett., 99(11):112116–3, septembre 2011.
- [67] H. W. LIU, T. FUJISAWA, Y. ONO, H. INOKAWA, A. FUJIWARA, K. TAKASHINA et Y. HIRAYAMA : Pauli-spin-blockade transport through a silicon double quantum dot. Phys. Rev. B, 77(7):073310–, février 2008.
- [68] Y. M. NIQUET, D. RIDEAU, C. TAVERNIER, H. JAOUEN et X. BLASE : Onsite matrix elements of the tight-binding Hamiltonian of a strained crystal: Application to silicon, germanium, and their alloys. Phys. Rev. B, 79(24):245201–, juin 2009.
- [69] G.-L. INGOLD et Y. V. NAZAROV : Charge Tunneling Rates in Ultrasmall Junctions. in: "Single Charge Tunneling", NATO ASI Series B, Vol. 294, pp. 21-107, Plenum Press, New York, 1992.

- [70] S. D. BARRETT et G. J. MILBURN : Measuring the decoherence rate in a semiconductor charge qubit. Phys. Rev. B, 68(15):155307–, octobre 2003.
- [71] P. NOZIÈRES et C. T. DE DOMINICIS : Singularities in the X-Ray Absorption and Emission of Metals. III. One-Body Theory Exact Solution. Phys. Rev., 178(3):1097–1107, février 1969.
- [72] K. A. MATVEEV et A. I. LARKIN : Interaction-induced threshold singularities in tunneling via localized levels. Phys. Rev. B, 46(23):15337–15347, décembre 1992.
- [73] A. K. GEIM, P. C. MAIN, JR. LA SCALA, N., L. EAVES, T. J. FOSTER, P. H. BETON, J. W. SAKAI, F. W. SHEARD, M. HENINI, G. HILL et M. A. PATE : Fermi-edge singularity in resonant tunneling. Phys. Rev. Lett., 72(13):2061–2064, mars 1994.
- [74] Yuli V. NAZAROV et Yaroslav M. BLANTER : Quantum transport. Cambridge University Press, New York, 2009.
- [75] B. I. SHKLOVSKII et A. L. EFROS : Electronic Properties of Doped Semiconductors. Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- [76] Xuedong HU, Belita KOILLER et S. DAS SARMA : Charge qubits in semiconductor quantum computer architecture: Tunnel coupling and decoherence. Phys. Rev. B, 71(23):235332–, juin 2005.
- [77] C. J. WELLARD, L. C. L. HOLLENBERG et S. DAS SARMA : Theory of the microwave spectroscopy of a phosphorus-donor charge qubit in silicon: Coherent control in the Si:P quantum-computer architecture. Phys. Rev. B, 74(7):075306–, août 2006.
- [78] H. POTHIER, P. LAFARGE, C. URBINA, D. ESTEVE et M. H. DEVORET : Single-Electron Pump Based on Charging Effects. Europhysics Letters, 17:249, 1992.
- [79] L. J. GEERLIGS, V. F. ANDEREGG, P. A. M. HOLWEG, J. E. MOOIJ, H. POTHIER, D. ESTEVE, C. URBINA et M. H. DEVORET : Frequency-locked turnstile device for single electrons. Phys. Rev. Lett., 64(22):2691–2694, May 1990.
- [80] L. P. KOUWENHOVEN, A. T. JOHNSON, N. C. van der VAART, C. J. P. M. HARMANS et C. T. FOXON : Quantized current in a quantum-dot turnstile using oscillating tunnel barriers. Phys. Rev. Lett., 67(12):1626–1629, septembre 1991.
- [81] BUREAU INTERNATIONAL DES POIDS ET MESURES : Résolutions adoptées à la 24e réunion de la Conférence générale. <http://www.bipm.org/fr/convention/cgpm/resolutions.html>, 2011.
- [82] Mark W. KELLER, John M. MARTINIS et R. L. KAUTZ : Rare Errors in a Well-Characterized Electron Pump: Comparison of Experiment and Theory. Phys. Rev. Lett., 80(20):4530–, mai 1998.
- [83] S. V. LOTKHOV, S. A. BOGOSLOVSKY, A. B. ZORIN et J. NIEMEYER : Operation of a three-junction single-electron pump with on-chip resistors. Appl. Phys. Lett., 78(7):946–948, février 2001.
- [84] A. B. ZORIN, S. V. LOTKHOV, H. ZANGERLE et J. NIEMEYER : Coulomb blockade and cotunneling in single electron circuits with on-chip resistors: Towards the implementation of the R pump. J. Appl. Phys., 88(5):2665–2670, septembre 2000.
- [85] M. D. BLUMENTHAL, B. KAESTNER, L. LI, S. GIBLIN, T. J. B. M. JANSSEN, M. PEPPER, D. ANDERSON, G. JONES et D. A. RITCHIE : Gigahertz quantized charge pumping. Nature Physics, 3:343, Mai 2007.

- [86] Yukinori ONO et Yasuo TAKAHASHI : Electron pump by a combined single-electron/field-effect-transistor structure. Appl. Phys. Lett., 82:1221, 2003.
- [87] K. W. CHAN, M. MOTTONEN, A. KEMPPINEN, N. S. LAI, K. Y. TAN, W. H. LIM et A. S. DZURAK : Single-electron shuttle based on a silicon quantum dot. Appl. Phys. Lett., 98(21):212103–3, mai 2011.
- [88] Akira FUJIWARA, Katsuhiko NISHIGUCHI et Yukinori ONO : Nanoampere charge pump by single-electron ratchet using silicon nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistor. Appl. Phys. Lett., 92(4):042102–3, janvier 2008.
- [89] B. KAESTNER, V. KASHCHEYEVS, G. HEIN, K. PIERZ, U. SIEGNER et H. W. SCHUMACHER : Robust single-parameter quantized charge pumping. Appl. Phys. Lett., 92(19):192106–3, mai 2008.
- [90] B. KAESTNER, V. KASHCHEYEVS, S. AMAKAWA, M. D. BLUMENTHAL, L. LI, T. J. B. M. JANSSEN, G. HEIN, K. PIERZ, T. WEIMANN, U. SIEGNER et H. W. SCHUMACHER : Single-parameter nonadiabatic quantized charge pumping. Phys. Rev. B, 77(15):153301–4, avril 2008.
- [91] Jukka P. PEKOLA, Juha J. VARTIAINEN, Mikko MÖTTÖNÖN, Olli-Pentti SAIRA, Matthias MESCHKE et Dmitri V. AVERIN : Hybrid single-electron transistor as a source of quantized electric current. Nature Physics, 4:120 – 124, 2008.
- [92] P. W. BROUWER : Scattering approach to parametric pumping. Phys. Rev. B, 58(16):R10135–R10138, octobre 1998.
- [93] Francesco GIAZOTTO, Panayotis SPATHIS, Stefano RODDARO, Subhajit BISWAS, Fabio TADDEI, Michele GOVERNALE et Lucia SORBA : A Josephson quantum electron pump. Nat Phys, 7(11):857–861, novembre 2011.
- [94] Clarence ZENER : Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 137(833):696–702, septembre 1932.
- [95] T. HAYASHI, T. FUJISAWA, H. D. CHEONG, Y. H. JEONG et Y. HIRAYAMA : Coherent Manipulation of Electronic States in a Double Quantum Dot. Phys. Rev. Lett., 91(22):226804–, novembre 2003.
- [96] K. D. PETERSSON, J. R. PETTA, H. LU et A. C. GOSSARD : Quantum Coherence in a One-Electron Semiconductor Charge Qubit. Phys. Rev. Lett., 105(24):246804–, décembre 2010.
- [97] Daniel LOSS et David P. DIVINCENZO : Quantum computation with quantum dots. Phys. Rev. A, 57(1):120–126, janvier 1998.
- [98] B. E. KANE : A silicon-based nuclear spin quantum computer. Nature, 393(6681):133–137, mai 1998.
- [99] Rutger VRIJEN, Eli YABLONOVITCH, Kang WANG, Hong Wen JIANG, Alex BALANDIN, Vwani ROYCHOWDHURY, Tal MOR et David DIVINCENZO : Electron-spin-resonance transistors for quantum computing in silicon-germanium heterostructures. Phys. Rev. A, 62(1):012306–, juin 2000.
- [100] L. C. L. HOLLENBERG, A. S. DZURAK, C. WELLARD, A. R. HAMILTON, D. J. REILLY, G. J. MILBURN et R. G. CLARK : Charge-based quantum computing using single donors in semiconductors. Phys. Rev. B, 69(11):113301–, mars 2004.
- [101] T. H. STOOFF et Yu. V. NAZAROV : Time-dependent resonant tunneling via two discrete states. Phys. Rev. B, 53(3):1050–, janvier 1996.

- [102] L.A. OPENOV : Phonon-induced decoherence of the two-level quantum subsystem due to relaxation and dephasing processes. Physics Letters A, 372(19):3476–3483, mai 2008.
- [103] Lucian LIVADARU, Peng XUE, Zahra SHATERZADEH-YAZDI, Gino A DILABIO, Josh MUTUS, Jason L PITTERS, Barry C SANDERS et Robert A WOLKOW : Dangling-bond charge qubit on a silicon surface. New Journal of Physics, 12(8):083018–, 2010.
- [104] Y. NAKAMURA, Yu. A. PASHKIN, T. YAMAMOTO et J. S. TSAI : Charge Echo in a Cooper-Pair Box. Phys. Rev. Lett., 88(4):047901–, janvier 2002.
- [105] Toshimasa FUJISAWA, Tjerk H. OOSTERKAMP, Wilfred G. van der WIEL, Benno W. BROER, Ramón AGUADO, Seigo TARUCHA et Leo P. KOUWENHOVEN : Spontaneous Emission Spectrum in Double Quantum Dot Devices. Science, 282(5390):932–935, 1998.
- [106] C. WEBER, A. FUHRER, C. FASTH, G. LINDWALL, L. SAMUELSON et A. WACKER : Probing Confined Phonon Modes by Transport through a Nanowire Double Quantum Dot. Phys. Rev. Lett., 104(3):036801–, janvier 2010.
- [107] Søren E. S. ANDRESEN, Rolf BRENNER, Cameron J. WELLARD, Changyi YANG, Toby HOPF, Christopher C. ESCOTT, Robert G. CLARK, Andrew S. DZURAK, David N. JAMIESON et Lloyd C. L. HOLLENBERG : Charge State Control and Relaxation in an Atomically Doped Silicon Device. Nano Lett., 7(7):2000–2003, juin 2007.
- [108] Jan R. RUBBMARK, Michael M. KASH, Michael G. LITTMAN et Daniel KLEPPNER : Dynamical effects at avoided level crossings: A study of the Landau-Zener effect using Rydberg atoms. Phys. Rev. A, 23(6):3107–3117, juin 1981.
- [109] P. K. TIEN et J. P. GORDON : Multiphoton Process Observed in the Interaction of Microwave Fields with the Tunneling between Superconductor Films. Phys. Rev., 129(2):647–651, janvier 1963.
- [110] William D. OLIVER, Yang YU, Janice C. LEE, Karl K. BERGGREN, Leonid S. LEVITOV et Terry P. ORLANDO : Mach-Zehnder Interferometry in a Strongly Driven Superconducting Qubit. Science, 310(5754):1653–1657, décembre 2005.
- [111] S.N. SHEVCHENKO, S. ASHHAB et Franco NORI : Landau-Zener-Stückelberg interferometry. Physics Reports, 492(1):1–30, juillet 2010.