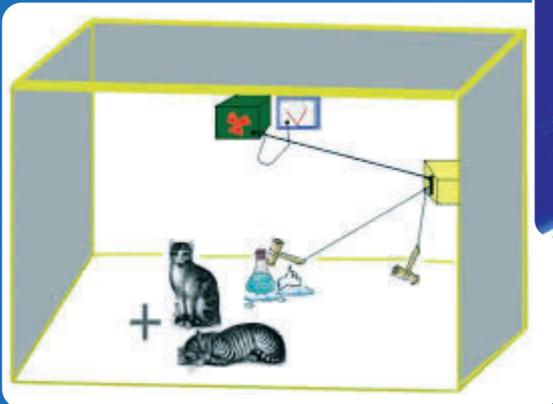
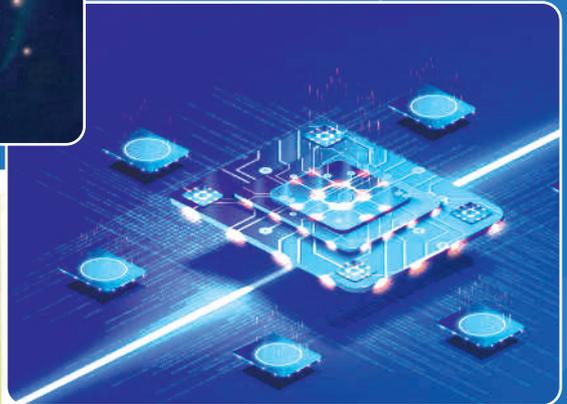




**ROYAUME DU MAROC**  
**Académie Hassan II des Sciences et Techniques**

**Workshop National sur :**  
**«La Physique quantique et ses applications»**



**Collège des Sciences Physiques et Chimiques**

**Rabat, 8-9 octobre 2020**





**Sa Majesté le Roi Mohammed VI, que Dieu Le garde,  
Protecteur de l'Académie Hassan II  
des Sciences et Techniques**





**ROYAUME DU MAROC**  
**Académie Hassan II des Sciences et Techniques**

**Workshop National sur :**  
**«La physique quantique et ses applications»**

**Collège des Sciences Physiques et Chimiques**

**Rabat, 8-9 octobre 2020**

Académie Hassan II des Sciences et Techniques, Rabat  
Km 4, Avenue Mohammed VI (ex Route des Zaers)  
Rabat, Royaume du Maroc

© Hassan II Academy Press

Dépôt Légal :  
ISBN :

Réalisation : **AGRI-BYS** S.A.R.L.

Achévé d'imprimer : février 2021  
Imprimerie Lawne : 11, rue Dakar, Océan, 10040-Rabat, Maroc

# SOMMAIRE

<b>Avant-propos</b> .....	7
<b>Physique quantique et applications</b> Omar FASSI-FEHRI.....	9
<b>SÉANCE I : COMMUNICATION ET CRYPTOGRAPHIE QUANTIQUE</b> .....	11
<b>Applications de la Physique Quantique : Communication Quantique</b> Hamid EZ-ZAHRAOUY .....	13
<b>Quantum Information Theory: Some Fundamental Aspects and Promising Applications</b> Mohammed DAOUD .....	45
<b>Les deux révolutions de la mécanique quantique</b> Yassine HASSOUNI.....	73
<b>General view on the Quantum Computer and Cryptography</b> Abdelmalek AZIZI, El Hassane LAAJI and Taoufik SERRAJ.....	77
<b>Quantum Entanglement Versus Correlation Charge and Correlation Spin in N-Qubits System</b> Yahia BOUGHALEB et S. HARIR .....	89
<b>SÉANCE II : SIMULATION QUANTIQUE</b> .....	103
<b>Application of quantum chemistry modelling to different fields</b> Najia KOMIHA .....	105
<b>Chimie Quantique &amp;Théorie de la modélisation moléculaire</b> Habib EL ALAOUI EL ABDALLAOUI .....	113
<b>Application of Density Functional Theory (DFT) Calculations</b> Abdelmajid AINANE .....	115
<b>Implication des chercheurs marocains en physique des hautes énergies et en astro-particules : Détecteurs ATLAS et KM3NET</b> Rajaa CHERKAOUI EL MOURSLI .....	121
<b>SÉANCE III : PHASES TOPOLOGIQUES ET TRANSITIONS QUANTIQUES</b> ..	145
<b>Phases et matières topologiques</b> Lalla Btissam DRISSI .....	147

<b>Aspects modernes et développements récents en Physique Quantique :</b>	
<b>Algorithmes quantiques</b>	
Mohamed BENNAI .....	159
<b>Properties of elementary magnetic excitations as information carriers in multilayers based on Transition Metal alloys</b>	
Nadia AIT LABYAD, Atika FAHMI and Ahmed QACHAOU .....	173
<b>Quantum dots : Charge retention and tuned light emitting</b>	
Adil Chahboun .....	181
<b>SÉANCE IV : ÉLÉCTRONIQUE DE SPIN ET MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES</b>	<b>183</b>
<b>Elaboration, caractérisation et modélisation de nanomatériaux</b>	
Mohamed SAHLAOUI, M. SAJIEDDINE, A. RAZOUK, A. EL BOUBEKRI, M. OUNACER, S. TILLAOUI, B. RABI, S. EDDAHRI .....	185
<b>Matériaux magnétiques</b>	
Ahmed HOURMATALLAH, N. BENZAKOUR, A. ZOUAOUI .....	191
<b>SÉANCE V : APPLICATIONS DE LA 1<sup>ère</sup> RÉVOLUTION QUANTIQUE EN MATIÈRE CONDENSÉE</b>	<b>201</b>
<b>Nouveaux Concepts des cellules photovoltaïques de troisième génération</b>	
Mimoun ZAZOUI .....	203
<b>Propriétés optiques des Points Quantiques</b>	
Izeddine ZORKANI .....	211
<b>Etats liés dans un continuum et transparence induite dans les systèmes mésoscopiques: Applications pour le guidage, filtrage et démultiplexage</b>	
El Houssaine El BOUDOUTI .....	225
<b>SÉANCE VI : IMAGERIE PAR RÉSONANCE MAGNÉTIQUE</b>	<b>231</b>
<b>Résonance Magnétique Nucléaire: Histoire et applications</b>	
El Mokhtar ESSASSI .....	233
<b>Imagerie par résonance magnétique fonctionnelle</b>	
Nazik ALLALI .....	261
<b>Rôle de la supraconductivité, comme état quantique macroscopique, dans la création de champs magnétiques intenses</b>	
Mohamed AZZOUC .....	269

## AVANT-PROPOS

Le collège des sciences physiques et chimiques de l'Académie Hassan II des Sciences et Techniques a organisé le jeudi 8 et le vendredi 9 octobre 2020, en visioconférence, un workshop national sur la physique quantique et ses applications. Ce workshop est organisé en préparation de la session plénière solennelle de l'Académie, qui aura lieu du 8 au 10 juin 2021, sur le thème «**Les Révolutions Technologiques : Contribution de la physique quantique**».

Le choix de ce thème par le collège des sciences physiques et chimiques est inspiré par les avancées technologiques que nous vivons en cette deuxième décennie du 21<sup>ème</sup> siècle qui constituent une réelle phase de rupture dans la technologie; Elles sont le fruit de plusieurs efforts de développement de théories scientifiques et d'expérimentations. Ce sont des conséquences de grandes découvertes fondamentales du 20<sup>ème</sup> siècle, en particulier la physique quantique qui a imposé des révisions conceptuelles, contre-courant, indispensables pour comprendre la structure de la matière à des échelles de plus en plus petites (liaison chimique, atome, noyau, particules élémentaires). Elle allait donner une compréhension profonde et quantitative des propriétés de la matière et a permis, ainsi, d'élucider la structure et les propriétés, apparemment les plus évidentes (chimiques, électriques, mécaniques, thermiques), de la matière qui nous entoure. Ainsi, la physique quantique qui était initialement une recherche purement fondamentale, s'est transformée, sans que cela ne soit prévu ni programmé à l'avance, en recherche appliquée avec des produits commerciaux de grande valeur ajoutée.

La physique quantique a connu deux révolutions : la première au début du 20<sup>ème</sup> siècle correspondant à l'établissement de la théorie et qui a conduit à des applications incontournables de notre vie quotidienne; la deuxième révolution quantique basée sur des principes et concepts physiques tels que la superposition, l'intrication quantique et le contrôle de systèmes quantiques individuels.

Le Workshop a abordé quelques technologies marquantes, issues de la première révolution quantique, à savoir : l'électronique de spin, la résonance magnétique nucléaire, l'imagerie par résonance magnétique, et des applications en matière condensée. Il a traité aussi de nouvelles technologies, qui ont pour origine la deuxième révolution quantique : calcul quantique, simulation quantique, communication quantique, cryptographie quantique, et capteurs quantiques.

Pour débattre de la contribution de la physique quantique aux révolutions technologiques l'Académie Hassan II des Sciences et Techniques a invité à ce workshop une centaine d'experts nationaux appartenant à toutes les universités marocaines. Les conférences ont été animées par une vingtaine de chercheurs spécialistes en physique quantique et ses applications.

La cérémonie d'ouverture du workshop national sur la physique quantique et ses applications a été marquée par le discours du Professeur Omar Fassi-Fehri, secrétaire perpétuel de l'Académie Hassan II des Sciences et Techniques, qui a souhaité la bienvenue aux participants et expliqué les raisons du choix de cette thématique. Le Professeur Abdelilah Benyoussef, directeur du collège des Sciences Physiques et chimiques a donné le programme du workshop qui comporte sept séances : la première sur la communication et la cryptographie quantique, la deuxième sur la simulation des systèmes quantiques, la troisième sur les phases et transitions de phases dans les systèmes quantiques, la quatrième sur l'électronique de spin et le magnétisme, la cinquième sur les applications de la première révolution quantique en matière condensée, la sixième sur la résonance magnétique nucléaire et l'imagerie par résonance magnétique. La dernière séance a été consacrée à la discussion et aux recommandations.

---

**Mot du Pr. Omar FASSI-FEHRI  
à l'ouverture de Workshop sur :  
«Physique quantique et applications»  
Rabat, 8-9 octobre 2020**

**Mesdames, Messieurs,  
Chers amis,**

Bonjour tout le monde, et Bienvenue à l'Académie Hassan II des Sciences et Techniques.

Je voudrais d'abord remercier tous les collègues, tous les participants à ce workshop, qui ont répondu à l'invitation du Collège des Sciences Physiques et Chimiques de notre Académie, et bien voulu participer à cette réunion en préparation de la session plénière solennelle 2021 dont le thème est en principe «Les révolutions technologiques : contribution de la physique quantique». Et avant de dire un mot sur la physique quantique et son extrême richesse à travers ses multiples applications, je souhaiterais me féliciter de voir autant de collègues présents aujourd'hui avec nous, je souhaite à tous et à toutes une bonne santé, et un bon moral, vu les circonstances de pandémie que nous vivons.

Effectivement, le sujet qui sera abordé à l'occasion de la prochaine session plénière solennelle est vraiment important.

Comme vous le savez le 20<sup>ème</sup> siècle a été caractérisé par le développement, en sciences physiques, de deux théories qui ont révolutionné non seulement le monde scientifique mais même notre vie de tous les jours, et que sont la théorie quantique et la relativité einsteinienne.

La prochaine session plénière traitera uniquement la physique quantique.

A la fin du 19<sup>ème</sup> siècle et avant qu'on découvre les lois de la relativité et celle de la physique quantique, beaucoup de physiciens pensaient qu'en physique on avait pratiquement tout trouvé et qu'il suffisait uniquement d'améliorer la précision des mesures; en effet on avait à notre disposition la loi de Newton et la mécanique classique, les lois de Maxwell et l'électromagnétisme (magnétisme et électricité), les lois de la thermodynamique avec le 1<sup>er</sup> principe, le 2<sup>ème</sup> principe et le 3<sup>ème</sup>, les lois de l'optique, de l'acoustique et la théorie ondulatoire, bref «il n'y avait plus rien à trouver». On avait une explication des phénomènes terrestres et même célestes (mécanique céleste) ; or dès 1905 la théorie de la relativité restreinte et plus tard (1915) la relativité générale par Einstein remettaient en cause des notions fondamentales comme le temps, l'espace, la masse ; de

même les premières découvertes établies en physique quantique par Max Planck, Werner Heisenberg, Niels Bohr, Erwin Schrödinger venaient établir que les «petits» objets, les objets microscopiques obéissaient à une autre mécanique que la mécanique rationnelle; on s'aperçoit alors que ce qui restait à découvrir était encore plus important que ce qu'on savait déjà, parfois depuis l'antiquité, la science fait tous les jours de nouvelles avancées.

Les applications de la physique quantique, interviennent dans pratiquement tous les secteurs de l'activité humaine; grâce à la physique quantique on a mis au point les semi-conducteurs, les ampoules LED, l'ordinateur, le laser, le téléphone portable, l'énergie nucléaire, sans parler de la révolution digitale et numérique...

Toute notre vie aujourd'hui est conditionnée par ces avancées et par leur utilisation dans beaucoup d'applications industrielles.

Au Maroc nous avons besoin, sur le plan des ressources humaines, de développer et former suffisamment de compétences pour pouvoir investir ce secteur et contribuer non seulement à la science mondiale mais aussi au développement industriel et économique du pays, en utilisant ces nouvelles théories, qui ont permis un développement technologique inouï.

C'est pour ça qu'il est très important pour un pays comme le Maroc d'investir ces niches qui font appel à un savoir-faire de pointe, et c'est pour cela que le thème de notre prochaine session plénière est tout à fait pertinent.

Vous êtes invités au cours de la matinée d'aujourd'hui et celle de demain à débattre pour préparer scientifiquement cette session plénière.

Bienvenue, bon travail et merci encore pour votre participation.

**SÉANCE I**  
**COMMUNICATION**  
**ET CRYPTOGRAPHIE QUANTIQUE**



# APPLICATIONS DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE : CRYPTOGRAPHIE QUANTIQUE

*Hamid EZ-ZAHRAOUI*

*Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSi)  
Département de Physique, Faculté des Sciences  
Université Mohammed V - Rabat  
email : ezahamid@fsr.ac.ma ; ezahamid@gmail.com*

Les recherches en physique quantique ne cessent de croître au cours des deux dernières décennies, au vu de ses applications dans le domaine de la physique de la matière, tels que la santé, l'énergie, l'eau et l'environnement, ainsi que le domaine de l'information tels que la cryptographie quantique, le calcul quantique, la téléportation quantique et l'ordinateur quantique.

En ce qui concerne le premier domaine, les activités de recherches du laboratoire de matière condensée et sciences interdisciplinaires portent, essentiellement, sur la modélisation et la simulation de nouveaux matériaux pour différentes applications dans plusieurs secteurs, spécialement l'énergie et le stockage de l'information, à l'aide des méthodes avancées de la physique quantique, basées principalement sur la résolution de l'équation de Schrödinger d'un système à plusieurs particules en interactions. En particulier nos activités sont focalisées sur l'étude des propriétés électroniques, optiques, magnétiques, électriques et thermiques des matériaux, à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), allant du massif au nano, en passant par les systèmes à basses dimensions dans lesquels le confinement quantique est très important, ainsi que les systèmes à deux dimensions, en particulier le graphène et le phosphorène, vu leurs applications dans le photovoltaïque, les batteries, les transistors et les écrans tactiles, le stockage d'hydrogène et la réfrigération magnétique.

En ce qui concerne le deuxième domaine relatif à l'information quantique, il est bien connu qu'une fois l'ordinateur quantique est construit, tous les algorithmes de cryptage classique, basés sur la complexité de calcul (rendant le temps de déchiffrement le plus lent possible) comme seule

condition de sécurité de l'information, ne peuvent plus résister devant les attaques quantiques. Par conséquent, des protocoles de sécurité qui ne dépendent pas de la complexité de calcul sont les bons candidats pour protéger de l'information de ce type d'attaques. La cryptographie quantique en est une. Elle repose essentiellement sur les lois de la mécanique quantique. Cependant, bien que de nombreux protocoles quantiques ont été proposés, ceux qui ont été bien étudiés et réalisés expérimentalement sont les protocoles de distribution de clés quantiques, considérés comme des protocoles fiables pour assurer la sécurité de l'information de façon inconditionnelle dans toutes les communications entre deux parties distantes. De plus, ces protocoles permettent, en principe, une distribution transparente d'une clef secrète qui peut être utilisée efficacement comme tampon unique. Toute tentative d'un espion d'obtenir des informations sur la clef peut être découverte grâce aux postulats de la mécanique quantique.

Dans ce contexte, les activités du laboratoire sont destinées, en premier lieu, au développement de nouveaux protocoles de distribution de clés quantiques (QKD) dans des canaux parfaits et/ou bruyants, en tenant compte des attaques multiples et séquentielles de types "clonage" et/ou "interception émission". A cet égard, le présent travail constitue une synthèse des travaux réalisés au du laboratoire LaMCScl, relatives aux applications de la physique quantique relatives la cryptographie quantique [1-13].

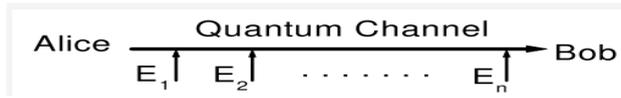
Ainsi le travail contient 6 parties principales. La première partie porte sur les Protocoles de distribution de clef quantique en présence de plusieurs attaques séquentielles ; la deuxième partie traite le cas des attaques multiples avec des états de bases partiellement non-orthogonaux ; la troisième partie est destinée aux effets de du bruit des canaux quantiques sur la sécurité de l'information; la quatrième partie porte sur la stratégie de Distribution de clef quantique avec des attaques hybrides ; la cinquième partie est dédiée à l'étude de la qualité de Transmission des signaux quantiques à base de particules intriquées dans des canaux quantiques dépolarisants. La dernière partie est réservée à la conclusion générale.

## **I- Protocoles de distribution de clef quantique en présence de plusieurs attaques**

Indépendamment de la stratégie d'attaque, nous allons décrire brièvement dans cette section, les étapes essentielles relatives à la distribution de clef quantique.

Afin de définir une clef sécurisée de façon inconditionnelle entre les partenaires légitimes, l'expéditeur Alice et le destinataire Bob, se mettent d'accord, à l'avance, sur l'espace des états (de dimension  $d$ ) et le nombre de bases à utiliser pour la distribution de clef. Ensuite, Alice

choisit aléatoirement une séquence de nombre  $x_A \{x_A = 0,1,2,\dots,d-1\}$ , avant d'envoyer à Bob une séquence de photons de polarisations  $x_A$ , en choisissant aléatoirement une des bases utilisées. Bob à son tour, choisit aléatoirement une des bases utilisées pour mesurer la polarisation de chacun des photons envoyés par Alice dans un canal quantique en présence de plusieurs attaques séquentielles (Fig.1) menées par un ensemble d'espions  $E_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Ces espions utilisent les mêmes bases utilisées par Alice et Bob, dans le but de récupérer le maximum possible d'information. Finalement, après le processus d'envoi des photons par Alice, Bob possède une séquence de nombre  $x_B \{x_B = 0,1,2,\dots,d-1\}$ . De même, chacun des espions  $E_i$  possède une suite de nombre  $x_{E_i} \{x_{E_i} = 0,1,2,\dots,d-1\}$



**Figure 1 :** Schéma représentant les attaques séquentielles menées par des espions  $E_i$

Cependant, pour garantir la sécurité de l'information partagée entre les deux partenaires légitimes, les protocoles QKD exigent le calcul des informations mutuelles  $I(A,B)$  entre Alice et Bob et  $I(A,E_m)$  entre Alice et l'espion  $E_m$  ( $m=1, \dots, N$ ) définies par:

$$I(A,B) = \sum_{x_A=0}^{d-1} \sum_{x_B=0}^{d-1} p(x_A, x_B) \log\left(\frac{p(x_A, x_B)}{p(x_A)p(x_B)}\right) \quad (1)$$

$$I(A,E_m) = \sum_{x_A=0}^{d-1} \sum_{x_{E_m}=0}^{d-1} p(x_A, x_{E_m}) \log\left(\frac{p(x_A, x_{E_m})}{p(x_A)p(x_{E_m})}\right) \quad (2)$$

Où  $p(x_A, x_B)$  désigne la probabilité conjointe du couple  $(x_A, x_B)$ ;  $p(x_A)$  et  $p(x_B)$  sont les probabilités marginales des variables  $x_A$  et  $x_B$  respectivement.

Notons que la quantité d'information perdue par Alice et Bob correspond au maximum des quantités d'informations partielles interceptées par les différents espions présents dans le canal :

$$I(A, E) = \text{Max}_{m=1,N} [I(A, E_m)]. \quad (3)$$

La probabilité d'erreur  $P_{err}$  qu'engendre la mesure effectuée par un ou plusieurs espions, est définie par :

$$P_{err} = \sum_{x_A, x_B} \left[ p(x_A, x_B) \Big|_{\text{sans espions}} - p(x_A, x_B) \Big|_{\text{avec espions}} \right]; \quad (4)$$

Ainsi, le seuil d'erreur quantique garantissant la sécurité de la clef, connu sous le nom du taux d'erreur par qudit (QDER), dans le cas  $d=2$  on le note QBER, est la valeur de la probabilité d'erreur  $P_{err}$  lorsque  $I(A, B) = I(A, E)$ .

Enfin, afin d'obtenir une clef secrète, Alice et Bob utilisent un canal authentifié public pour estimer le taux d'erreur et la quantité maximale d'information obtenue par l'espion. Toutefois, si le taux d'erreur est supérieur au taux d'erreur par qudit (QDER); Alice et Bob n'ont qu'à recommencer la procédure à nouveau, jusqu'à ce que le taux d'erreur devienne plus petit que le QDER.

Dans ce qui suit on va comprendre comment l'espionnage à plusieurs attaques séquentielles, affecte le comportement du seuil et comment renforcer davantage la sécurité de l'information en injectant dans le canal des faux espions.

## I-1- Protocole BB84 : Attaques séquentielles "interception-émission"

### I-1-1- Protocole

Dans ce protocole, l'expéditeur Alice envoie à Bob une séquence de photons en choisissant au hasard 1 ou 0, codés aléatoirement sur l'une des deux bases rectiligne ou diagonale. Le destinataire Bob à son tour, choisit au hasard une base pour mesurer les photons envoyés par son partenaire Alice. D'un autre côté Chacun des espions  $E_i$  souhaite intercepter successivement les photons envoyés par Alice avec une probabilité d'attaque  $\omega_i$ , mesure sa polarisation en choisissant aléatoirement une des deux bases rectiligne ou diagonale avant de le renvoyer à Bob, et ainsi de suite. Cependant, à la place des photons non interceptés, les espions mettent au hasard 0 ou 1 dans leurs chaînes de bits. Ensuite, Alice et Bob change dans un canal public, les bases qu'ils ont utilisées pour chacun des photons. Les bits pour lesquels les bases utilisées par Alice et Bob sont parfaitement identiques constituent essentiellement la clef distribuée.

Dans ce protocole ( $d=2$ ), on peut montrer que les informations mutuelles s'écrivent :

$$I(A, B) = 1 + P_{AB}(0/0) \text{Log}_2(P_{AB}(0/0)) + P_{AB}(1/0) \text{Log}_2(P_{AB}(1/0)) \quad (5)$$

$$I(A, E_m) = 1 + P_{AE_m}(0/0) \text{Log}_2(P_{AE_m}(0/0)) + P_{AE_m}(1/0) \text{Log}_2(P_{AE_m}(1/0)) \quad (6)$$

Où  $P_{AB}(x_B/x_A)$  désigne la probabilité que Bob reçoive  $x_B$  sachant que Alice envoie  $x_A$  et  $P_{AE_m}(x_{E_m}/x_A)$  la probabilité que l'espion  $E_m$  reçoive  $x_{E_m}$  sachant que Alice envoie  $x_A$ , données par:

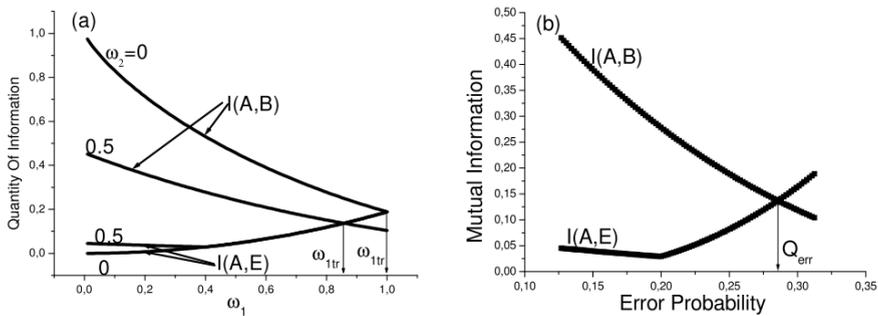
$$P_{AB}(0/0) = \sum_{k=0}^n \frac{2^{n-k} + 1}{2^{n-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^n \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^n \omega_l \quad (7)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = \frac{1 - \omega_m}{2} + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{2^{m-k} + 1}{2^{m-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^{m-1} \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^m \omega_l, \quad (8)$$

avec  $P_{AB}(1/1) = P_{AB}(0/0)$  ;  $P_{AB}(1/0) = 1 - P_{AB}(0/0)$  et  $P_{AB}(1/0) = P_{AB}(0/1)$ . De même pour les probabilités  $P_{AE_m}(x_{E_m} / x_A)$ .

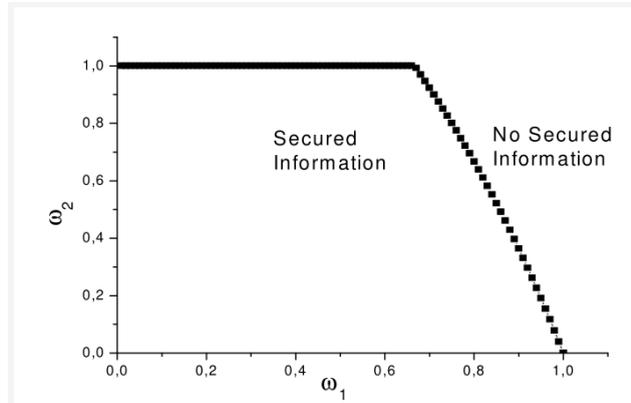
### I-1-2- Résultats et discussions

Dans cette section, nous examinerons la quantité d'information perdue en fonction du nombre d'attaques et de leurs probabilités. Cependant, la figure 2 (a) montre le comportement de la quantité d'informations  $I(A,B)$  partagée entre Alice et Bob et l'information perdue  $I(A,E)$  en fonction de la probabilité d'attaque  $\omega_1$  du premier espion pour différentes valeurs de la probabilité d'attaque  $\omega_2$  relative au 2<sup>ème</sup> espion. Ces grandeurs dépendent fortement des valeurs de  $\omega_1$  et  $\omega_2$ . Ainsi,  $I(A,B)$  décroît de façon monotone avec  $\omega_1$ , tandis que  $I(A,E)$  augmente avec  $\omega_1$ . Cependant, pour  $\omega_1 > \omega_{1tr}$  la quantité d'information perdue est supérieure à l'information reçue par Bob et par conséquent l'information n'est plus sécurisée. Notons que  $\omega_{1tr}$  dépend de la probabilité d'attaque du deuxième espion comme l'indique la figure 2a. Ce résultat est illustré dans la figure 2b dans laquelle les deux informations mutuelles coïncident à une probabilité d'erreur autour de 0.285 qui correspond au seuil d'erreur quantique (QBER) du présent protocole. Ce qui signifie que si le taux d'erreur effectuée par Alice et Bob est supérieur à 28.5% la clef n'est pas sécurisée. Notons que ce protocole est optimal par rapport au protocole BB84 à un seul espion.



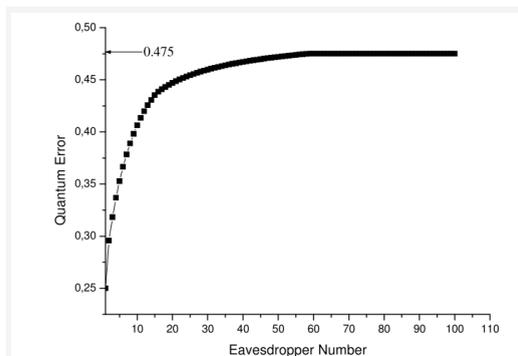
**Figure 2** : Comportement des informations mutuelles en fonction de la probabilité d'attaque du premier espion (a) et la probabilité d'erreur (b) dans le cas de deux attaques séquentielles (N=2)

Nous notons que dans la phase sécurisée, la probabilité d'erreur est inférieure à l'erreur quantique. En effet, le diagramme de phase établi dans le paramètre d'espace  $(\omega_1, \omega_2)$  et présenté sur la figure 3, montre la ligne de transition entre les phases sécurisées et non sécurisées.



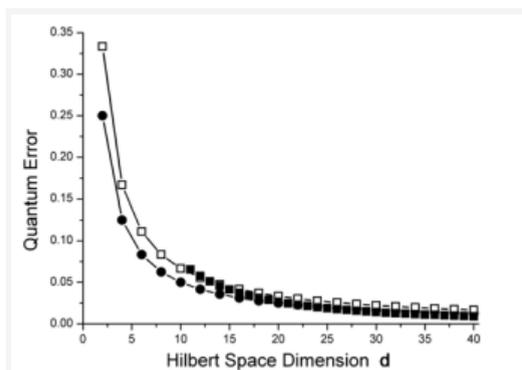
**Figure 3 :** Diagramme de phases montrant la région sécurisée dans l'espace des paramètres  $(\omega_1, \omega_2)$  dans le cas de deux attaques.

Il est clair que la région de la phase sécurisée dépend à la fois des taux de probabilité d'interception  $\omega_1$  et  $\omega_2$ , contrairement au cas du protocole à une seule attaque pour lequel la transition sécurisée-non sécurisée se produit à une probabilité d'interception  $\omega_1 = 1$ . D'autant plus, pour  $\omega_1 < \omega_{1c} \approx 0,67$ , la ligne de transition est indépendante du taux de probabilité d'attaque  $\omega_1$ , tandis que pour  $\omega_1 > \omega_{1c}$ , la transition dépend fortement des valeurs de probabilité d'attaques du deuxième espion. En effet, la probabilité de transition  $\omega_{1tra}$  augmente avec la diminution de  $\omega_2$ . En outre, la figure 3 montre que le QKD peut être sécurisé dans le cas où les espions collaborent entre eux, c'est-à-dire intercepter le photon avec des probabilités identiques ( $\omega_1 = \omega_2$ ). Ainsi, dans ce dernier cas, la figure 4 montre le comportement du taux d'erreur quantique par qubit en fonction du nombre d'attaques séquentielle dans le canal. Il est clair que ce taux augmente de façon non linéaire avec le nombre d'attaques  $N$  avant d'atteindre une valeur limite (QBER=0.475) pour les grandes valeurs de  $N$ . Ce résultat est très important, dans la mesure où l'information devient de plus en plus sécurisée en augmentant le nombre de faux espions dans le canal. Et donc c'est une autre façon pour garantir davantage la sécurité de l'information de façon inconditionnelle et sans modifier ni la dimension de l'espace des états et ni la stratégie d'attaques.



**Figure 4 :** Le comportement de l'erreur en fonction du nombre d'attaques

Les effets de la dimension de l'espace des états ainsi que le nombre de bases utilisé sur le taux d'erreur quantique par qudit (QDER) sont représentés sur la figure 5. Il est clair que le QDER dépend de la dimension et du nombre de base. En effet, pour les faibles dimensions, le QDER augmente avec le nombre de base ; tandis que pour les grandes dimensions, le QDER ne dépend pas du nombre de bases. En revanche, pour un nombre fixé de bases, l'erreur quantique décroît avec la dimension indépendamment du nombre de base utilisé.



**Figure 5 :** Le comportement du taux d'erreur quantique par qudit en fonction de la dimension de l'espace des états pour différents nombre  $M$  de bases, en présence d'un seul espion; les cercles remplis correspondent à  $M=2$  ; les carreaux remplis creux correspondent à  $M=2M=3$  et les carreaux remplis correspondent à  $M=10$ .

La figure montre que le protocole correspondant à  $d=2$  et  $M=3$  est le protocole le plus optimal, il possède le taux d'erreur quantique le plus élevé (QTER=0.34) par rapport aux autres cas  $d$  et ;  $d=2$  et  $M=2$  (QBER=0.25). Cependant, en présence de multiples attaques séquentielles ( $N=2$  et  $d=3$ ), le diagramme de phases  $(\omega_1, \omega_2)$  établi dans la figure 6 montre que le protocole correspondant à  $M=2$  est le plus sécurisé pour  $0.55 < \omega_1 < 0.67$  (Fig.6a), tandis que le protocole correspondant à  $M=4$  est le plus optimal pour  $0.85 < \omega_1 < 1$  (Fig.6b) .

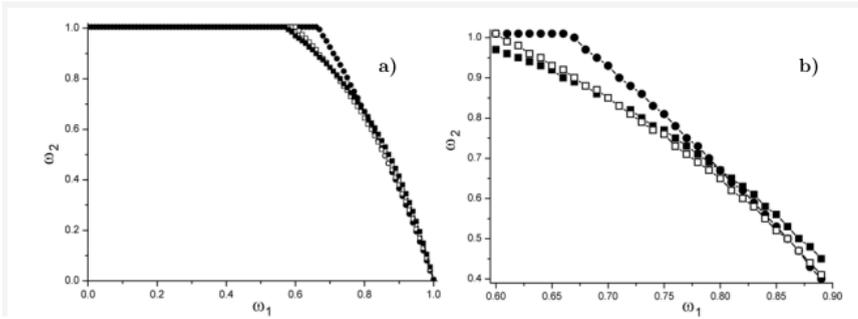


Figure 6 : Diagramme de phases établi dans l'espace des paramètres  $(\omega_1, \omega_2)$ .

### I-2- Protocole BB84: Attaques séquentielles de “clonage”

Dans ce protocole, chacun des espions  $E_i$  adopte une stratégie d'espionnage par clonage en utilisant une transformation unitaire  $U$  définie dans une base formée par les états propres de la matrice de Pauli  $\sigma_y$  :

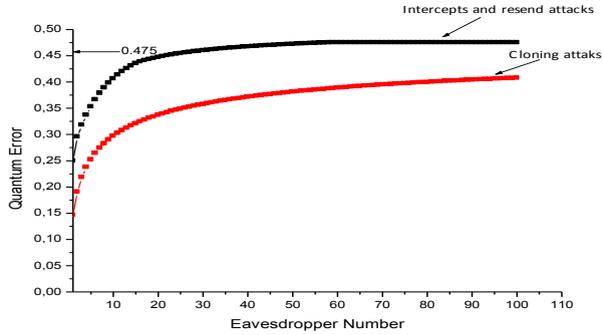
$$U(|0\rangle_{yA}|0\rangle_{yE_i}) = |0\rangle_{yA}|0\rangle_{yE} \quad (9)$$

$$U(|1\rangle_{yA}|0\rangle_{yE_i}) = |1\rangle_{yA}|1\rangle_{yE_i} = \cos(\theta_i)|1\rangle_{yA}|0\rangle_{yE_i} + \sin(\theta_i)|0\rangle_{yA}|1\rangle_{yE_i} \quad (10)$$

Où  $\theta_i \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$  est un paramètre pertinent du protocole, appelé angle d'attaque. Nous allons montrer que la sécurité de la distribution de la clef dépend des angles et des nombres d'attaques. En effet, en utilisant les expressions des informations mutuelles (éqs. 1, 2 et 3), sachant que les probabilités conditionnelles :

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \frac{1}{2} \left( 1 + \prod_{i=1}^{m-1} \cos(\theta_i) \sin(\theta_m) \right) \quad (11)$$

$$P_{AB}(0/0) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \prod_{i=1}^N \cos(\theta_i) \right] \quad (12)$$



**Figure 7:** Comportement de l'erreur quantique en fonction du nombre d'espions dans le cas des attaques identiques  $\theta_i = \theta$  ( $i=1, \dots, N$ ) de clonage. A titre comparatif, la courbe noire correspond au cas interception-émission.

## II- Distribution de clés quantiques en présence de multiples attaques avec des états de bases partiellement non-orthogonaux

### II-1- Protocole

Il s'agit du protocole BB84 dont les états de bases ne sont pas orthogonaux au moins dans une des bases choisies. Considérons les deux bases  $\{|0_a\rangle, |1_a\rangle\}$  et  $\{|0_b\rangle, |1_b\rangle\}$ , dont les états sont définis dans la base canonique formée par les états propres de la matrice de Pauli  $\sigma_z$  :

$$|0_a\rangle = \cos\left(\frac{\eta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\eta}{2}\right)|1\rangle, |1_a\rangle = \cos\left(\frac{\eta}{2}\right)|0\rangle - \sin\left(\frac{\eta}{2}\right)|1\rangle \quad (13)$$

$$|0_b\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|1\rangle, |1_b\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|1\rangle. \quad (14)$$

Où  $\eta$  ( $0 < \eta < \frac{\pi}{2}$ ) est l'angle garantissant la non orthogonalité des états  $|0\rangle_a$  et  $|0\rangle_b$  ;

$$\langle 0_a | 1_a \rangle = \cos \eta$$

Alice envoie une séquence de photons en choisissant de façon aléatoire une des deux bases  $\{|0_a\rangle, |1_a\rangle\}$  ou  $\{|0_b\rangle, |1_b\rangle\}$ . Bob mesure chaque photon en choisissant au hasard de la même manière une des deux bases précédents analyseurs de polarisation. Cependant, un espion  $E_i$  choisit au hasard une des deux bases  $\{|0\rangle_a, |1\rangle_a\}$  ou  $\{|0\rangle_b, |1\rangle_b\}$  dont la première base est définie par un angle  $\eta_i$ , tel que  $\langle 0_a | 1_a \rangle_i = \cos(\eta_i)$

Ainsi, les informations mutuelles (éqs.5 et 6) du présent protocole sont bien calculées en utilisant les probabilités conditionnelles :

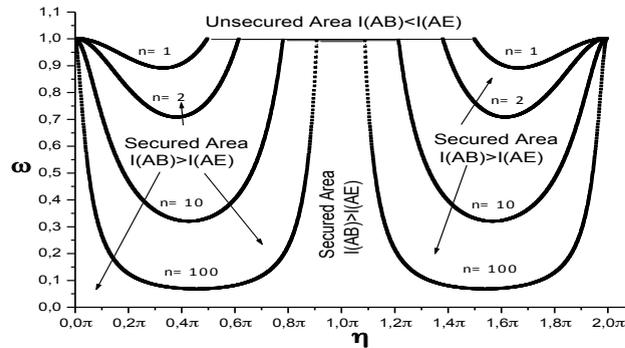
$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) = \sum_{k=0}^n \frac{2^{n-k} + 1}{2^{n-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, n}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j \sin^2(\eta_j)) \prod_{l=k+1}^n \omega_l \sin^2(\eta_l) \quad (15)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \frac{1 - \frac{\omega_m}{2}(1 + \cos(\eta_m))}{2} + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{2^{m-k} + 1}{2^{m-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, m-1}^k \prod_{j=1}^k \left(1 - \omega_j \left(\frac{1 + \cos(\eta_j)}{2}\right)\right) \prod_{l=k+1}^m \omega_l \left(\frac{1 + \cos(\eta_l)}{2}\right) \quad (16)$$

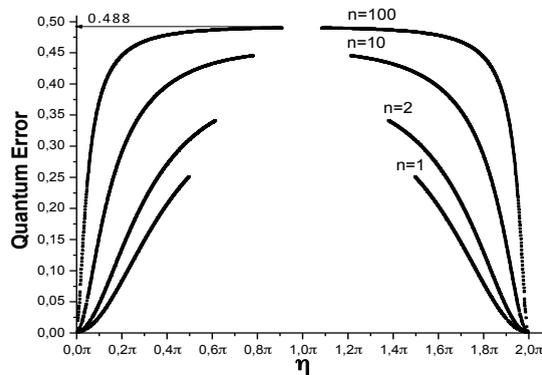
## II-2- Résultats et discussions

Nous allons discuter dans la suite le cas particulier dans lequel nous supposons que tous les espions utilisent des bases et des probabilités d'attaques identiques ( $\eta_i = \eta$  et  $\omega_i = \omega$  ;  $i=1, \dots, N$ ). Le digramme de phases, établi dans la figure 7 montre que la sécurité de l'information dépend essentiellement du nombre d'espions, de leur probabilité d'attaques et de l'angle  $\eta$ . En effet, il est clair que la zone sécurisée se rétrécit dans l'espace des paramètres  $(\omega, \eta)$ , en augmentant le nombre d'espions et pour une valeur fixée de l'angle, une transition relative à la sécurité de l'information prend lieu à une probabilité d'attaque bien déterminée. Le comportement de l'erreur quantique par qubit (QBER) en fonction de l'angle  $\eta$  (Fig.8) montre que le protocole maximalement sécurisé en injectant davantage des faux espions dans le canal avec un angle  $\eta$

bien déterminé. En effet le taux d'erreur quantique maximal est de l'ordre de 48.8% pour un nombre d'espions  $N=100$  et un angle optimal  $\eta$ . D'autant plus, ce protocole est mieux sécurisé par rapport au protocole BB84 standard pour tout angle  $\frac{\pi}{2} < \eta < \frac{3\pi}{2}$ , vu que son QBER est supérieure à 25%



**Figure 8 :** Diagramme de phase dans l'espace des paramètres  $(\omega, \eta)$  pour différents nombres d'espions



**Figure 9 :** Le comportement du taux d'erreur quantique en fonction de  $\eta$  pour différents nombres d'attaques.

### III- Distribution de clefs quantiques en présence de multiples attaques séquentielles dans des canaux dépolarisants

#### III-1- Stratégie de distribution “interception-émission”

Dans cette partie, nous allons étudier l’effet de la dépolarisation du canal sur la distribution des clefs quantiques en présence de plusieurs espions adoptant la stratégie d’espionnage par interception- émission puis par clonage.

Il est bien connu que le concept du canal change selon le type de l’étude effectuée. Le canal quantique dépolarisant que nous allons étudier laisse intact un le qubit  $|\psi\rangle$  envoyé par Alice avec une probabilité  $(1-p)$  ou modifié avec un renversement de bit (bit-flip) ou un changement de phase ou la composition des deux, de façons équiprobable  $(p/3)$  dans le cas d’un canal isotrope, et avec des probabilités différentes dans le cas d’un canal anisotrope. Dans cette partie nous ne considérons que le cas isotrope, défini par l’opérateur unitaire  $T_p$ :

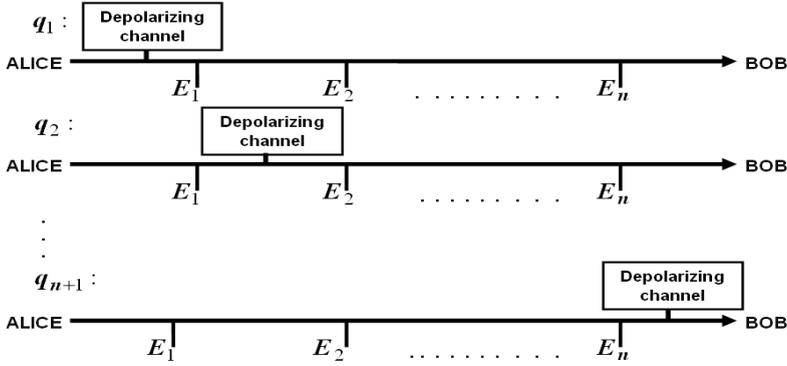
$$T_p(|\psi\rangle) = (1-p)|\psi\rangle\langle\psi| + \sum_{i=1}^3 \sigma_i |\psi\rangle\langle\psi| \sigma_i^\dagger \quad (17)$$

On peut montrer facilement que la probabilité que Bob reçoive un photon polarisé  $x_B$  sachant que Alice envoie un photon polarisé  $x_A$ , sous l’effet du bruit du canal et en absence de toute attaque, est égale à  $(1-2p/3)$  Si  $x_B=x_A$  ; et  $2p/3$  dans le cas contraire. Ce qui montre que  $2p/3$  correspond au bruit du canal défini dans l’équation (17).

Cependant, il est bien connu qu’en présence d’un seul espion sur le canal, il est difficile de savoir de quel côté du canal le bruit peut avoir lieu, avant ou après espionnage. Autrement dit, deux situations distinctes peuvent avoir lieu, la première correspond au cas où le photon envoyé par Alice peut être perturbé par le bruit intrinsèque du canal dans un premier temps, avant d’être perturbé par l’espion ; tandis que la deuxième correspond au cas contraire, c’est à dire, le photon envoyé par Alice peut être perturbé par l’espion dans un premier temps avant d’être perturbé par le canal. Le seul moyen pour résoudre ce problème, est de procéder de manière stochastique, tout en supposant que la première peut avoir lieu avec une probabilité  $q$ , tandis que la deuxième peut avoir lieu avec une probabilité  $1-q$ . En outre, les cas extrêmes pour lesquels la position d’Eve est plus proche de Alice ou la position d’Eve est plus proche de Bob, nous considérons, respectivement  $q = 0$  et  $q = 1$ .

Dans le cas de plusieurs attaques séquentielles, le problème devient beaucoup plus compliqué. En effet, le photon envoyé par Alice peut perdre sa polarisation initiale, sous l’effet du bruit intrinsèque du canal, dans l’un des intervalles situés entre Alice et  $E_1$  ou  $E_1$  et  $E_2, \dots$  ou  $E_i$  et  $E_{i+1}$

$\dots$  ou  $E_n$  et Bob (Fig.11), avec des probabilités respectives  $q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_{n+1}$  ;  $\sum_{i=1}^{n+1} q_i = 1$ .



**Figure 10** : Schéma du canal quantique dépolarisant avec plusieurs attaques séquentielles.

Toutefois, on peut montrer facilement que les probabilités conditionnelles  $P_{AB}(x_B/x_A)$  et  $P_{AE}(x_E/x_A)$ , sous les effets combinés du bruit du canal et les attaques séquentielles des espions présents dans le canal, s'écrivent, dans le cas des attaques "interception-émission" :

$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) = \left( \sum_{k=0}^n \frac{2^{n-k} + 1}{2^{n-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, n} \prod_{j=1}^k (1 - \omega_{i_j}) \prod_{l=k+1}^n \omega_{i_l} \right) \left( 1 - \frac{4p}{3} \right) + \frac{2p}{3} \quad (18)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \left( \left( 1 - \frac{4}{3}p \right) \sum_{k=0}^{m-1} \frac{2^{m-k} + 1}{2^{m-k+1}} \right. \\ \left. \sum_{i_1, \dots, i_k=1, m-1} \prod_{j=1}^k (1 - \omega_{i_j}) \prod_{l=k+1}^m \omega_{i_l} + \frac{1 - \omega_m}{2} + \frac{2}{3}p\omega_m \right) \sum_{i=1}^m q_i + \\ \left( \frac{1 - \omega_m}{2} + \sum_{k=0}^{m-1} \frac{2^{m-k} + 1}{2^{m-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, m-1} \prod_{j=1}^k (1 - \omega_{i_j}) \prod_{l=k+1}^m \omega_{i_l} \right) \sum_{i=m+1}^n q_i \quad (19)$$

De la même manière on peut montrer que dans le cas des attaques de "clonage" les probabilités conditionnelles sont données :

$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{2p}{3} \right) \left( 1 + \prod_{i=1}^N \cos(\theta_i) \right) + \left( 1 - \prod_{i=1}^N \cos(\theta_i) \right) \frac{p}{3} \quad (20)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \frac{1}{2} \left( 1 + \prod_{i=1}^{m-1} \cos(\theta_i) \sin(\theta_m) \right) - \frac{2p}{3} \prod_{i=1}^{m-1} \cos(\theta_i) \sin(\theta_m) \sum_{i=1}^m q_i \quad (21)$$

Notons que dans les deux stratégies d'attaques précédentes, la quantité d'information perdue par Bob est donnée par :

$$I_{Lost} = I(A, E) + H(\delta). \quad (22)$$

$H(\delta)$  étant l'entropie de Shannon qui représente la quantité d'information perdue sous l'effet du bruit du canal ;  $H(\delta) = (1-\delta)\log_2(1-\delta) - \delta\log_2\delta$  avec  $\delta = \frac{2p}{3}$  correspond au bruit intrinsèque du canal.

Notons que le taux d'erreur quantique (QBER) dû aux effets combinés, bruit du canal et espionnage, est la valeur de la probabilité d'erreur  $P_{err}$  lorsque  $I(A,B) = I(A,E) + H(\delta)$

### III-2- Résultats et discussions

Les équations (18) et (20) ne dépendent pas du paramètre stochastique  $q$ , ce qui signifie que dans les deux types d'attaques la quantité d'information reçue par Bob ne dépend en aucun cas de l'endroit où le photon peut être perturbé sous l'effet du bruit du canal. En revanche, les équations (19) et (21) montrent que la quantité d'information interceptée par un espion  $E_m$  dépend fortement des régions entre Alice et  $E_m$  où peut se produire la dépolarisation du photon avec des probabilités  $q_1, q_2, \dots, q_m$ .

Dans la suite, nous allons étudier, dans les deux types d'attaques, le comportement des informations mutuelles pour  $N = 1, 2, 3$  avec différentes probabilités d'attaques correspondant aux différents espions présents dans le canal.

Commençons par le cas de la stratégie d'attaques "interception-émission". Dans le cas d'un seul espion ( $N = 1$ ), l'information interceptée par Eve dépend de l'intervalle dans lequel la dépolarisation du photon peut avoir lieu (figure 11). Il est clair que la quantité d'information perdue augmente avec la diminution du paramètre  $q$ , ce qui signifie que la quantité d'information interceptée par Eve est très importante lorsque la dépolarisation du photon a lieu entre Eve et Bob, et non pas entre Alice et Eve.

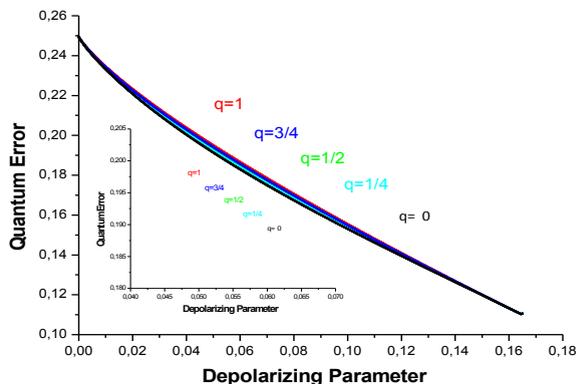
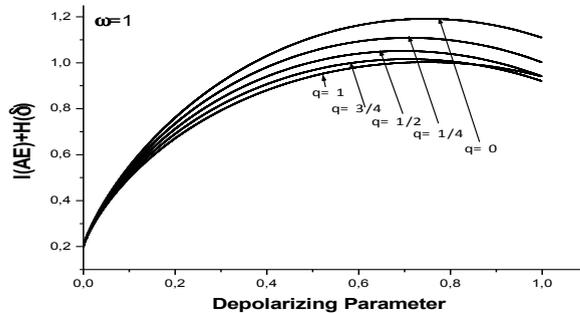


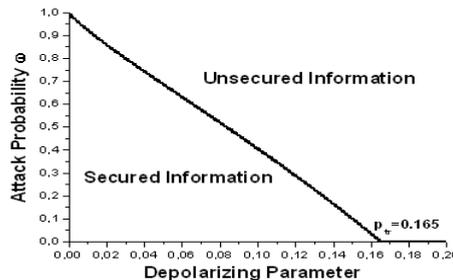
Figure 11 : Le comportement de l'erreur quantique en fonction de la dépolarisation du canal.

En outre, l'information perdue augmente avec l'augmentation de la dépolarisation du canal. Cependant, les résultats présentés dans la figure 12 montrent que la dépendance du taux d'erreur quantique (QBER) est pertinente par rapport à la dépolarisation du canal, tandis qu'elle est moins importante par rapport à la position de l'espion dans le canal. En effet, le taux d'erreur quantique diminue de façon remarquable avec l'augmentation du paramètre  $p$ , par contre il varie légèrement avec le paramètre stochastique  $q$  caractérisant l'endroit dans lequel le photon peut être perturbé sous l'effet du bruit du canal.



**Figure 12 :** Le comportement de l'information perdue en fonction de la dépolarisation du canal.

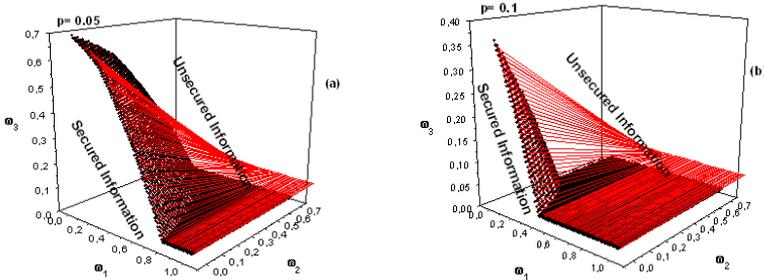
Notons que dans le cas d'un canal parfait ( $p=0$ ) le taux QBER= 25% et pour  $p=0.165$  ce taux d'erreur est de l'ordre de 11% indépendamment des valeurs de la position de l'espion dans le canal.



**Figure 13 :** Diagramme de phase  $(p, \omega)$  pour  $N=1$  et  $q_1 = \frac{1}{2}$

Le diagramme de phase, établi dans la figure 13, montre que la sécurité de l'information dépend de la dépolarisation du canal et de la probabilité d'attaque. En effet, pour une dépolarisation  $p$  donnée, l'information ne reste plus sécurisée lorsque la probabilité d'attaque dépasse une valeur particulière bien déterminée, qui décroît lorsque  $p$  augmente avant de s'annuler, pour des valeurs de  $p$  supérieures à  $p_{tr}$  ( $p_{tr} = 0.165$ ). Ainsi, pour  $p < p_{tr}$ , la quantité d'information perdue est inférieure à celle reçue par Bob, ce qui signifie que sur cette zone, l'information est sécurisée. En revanche, pour  $p > p_{tr}$ , l'information ne reste plus sécurisée.

Dans le cas de plusieurs attaques, différents types de diagrammes de phases peuvent être envisagés. Pour fixer les idées, considérons le cas de trois espions pour lequel les diagrammes de phases établis dans les figures 14a et 14b exhibent différents types de topologies concernant les transitions entre la zone sécurisée et la zone non sécurisée. L'ensemble des probabilités d'attaques  $\omega_{it}$  induisant la transition constitue une surface dans l'espace des paramètres pour laquelle sa topologie dépend essentiellement de la dépolarisation  $p$ . En effet, pour  $q_1 = q_2 = q_3 = q_4 = \frac{1}{4}$ , la zone sécurisée est importante pour les faibles dépolarisation et la surface de transition est maximalelement déformée (figure 14a) ; alors que la zone sécurisée se rétrécit davantage en augmentant la polarisation et la surface de transition est presque plane (figure 14b).



**Figure 14 :** Diagramme de phases  $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$  pour  $N=3$  et  $q_1 = q_2 = q_3 = q_4 = \frac{1}{4}$  ; (a)  $p = 0.05$  et (b)  $p = 0.1$ .

Maintenant nous nous sommes intéressés au comportement du taux d'erreur quantique (QBER) en fonction du nombre d'espion et le bruit du canal. Cependant, le cas le plus général pour lequel les espions présents dans le canal ne coopèrent pas, c'est à dire ils mènent des attaques de manière indépendantes, est difficile à étudier. Pour ce faire nous allons traiter le cas le plus simple possible pour lequel nous supposons que les probabilités d'attaques sont identiques ;  $\omega_i = \omega$  ( $i=1, \dots, N$ ), de plus nous supposons que les paramètres stochastiques associés à la localisation de dépolarisation sont aussi identiques ;  $q_i = q = \frac{1}{N+1}$ . Ainsi, le diagramme de phase  $(p, \omega)$  établi dans la figure 15 montre que la zone sécurisée se rétrécit avec l'augmentation du nombre d'espions. Et que l'information n'est plus sécurisée pour toute dépolarisation  $p > p_c = 0.165$  indépendamment du nombre d'attaques.

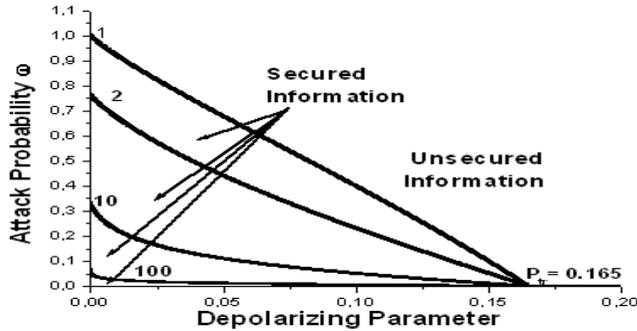


Figure 15 : Diagramme de phase  $(p, \omega)$  dans le cas  $\omega_i = \omega$  et  $q_i = q = \frac{1}{N+1}$  ;  $(i=1, \dots, N)$  pour différentes valeurs de  $N$ .

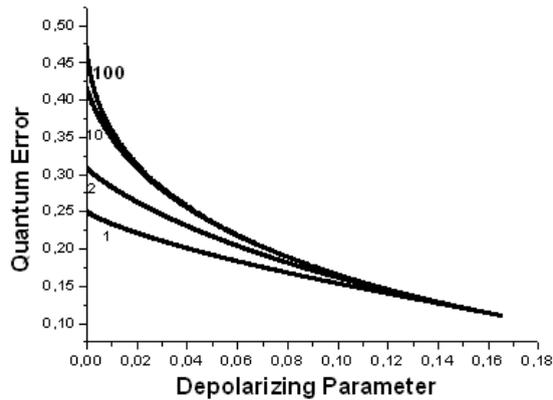
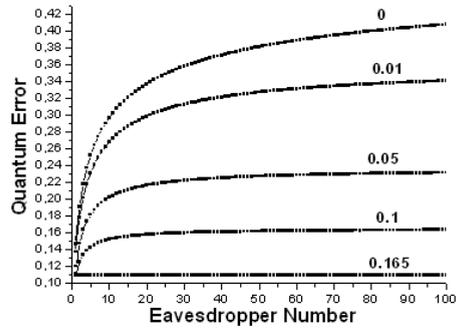


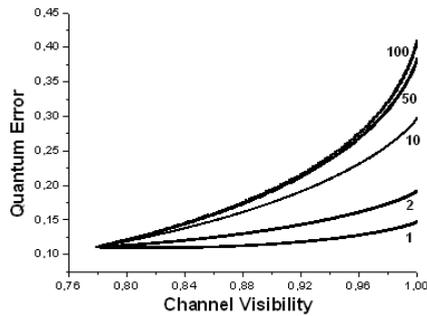
Figure 16 : Le comportement du taux d'erreur quantique en fonction de la dépolarisation du canal.

Revenons au cas des attaques de clonage. Et toujours dans le cas le plus simple où l'on suppose que les espions collaborent entre eux dans la mesure où leurs angles d'attaques sont parfaitement identiques ( $\theta_i = \theta$ ,  $i=1, \dots, N$ ). Nous constatons que le taux d'erreur quantique augmente de façon non linéaire avec le nombre d'espions et dépend fortement du paramètre de dépolarisation. On note également que pour  $p = p_r = 0.165$  l'erreur quantique atteint sa valeur minimale  $QBER = 11\%$  indépendamment du nombre d'espions ou leur angle d'attaque  $\theta$ .



**Figure 17 :** Le comportement de l'erreur quantique en fonction du nombre d'espion.

D'autant plus, la figure 18 montre que le taux d'erreur quantique augmente en augmentant la visibilité  $V$  du canal et / ou le nombre d'espions pour  $V \geq 78\%$ . Alors que, Pour  $p > p_{tr} = 0.165$  ou  $V < 78\%$  on l'information perdue dépasse celle reçue par le destinataire, ce qui montre que l'information est non sécurisée indépendamment du nombre d'attaques.



**Figure 18 :** Le comportement de l'erreur quantique en fonction de la visibilité du canal pour différents nombres d'espions

Les diagrammes de phases  $(N, p)$  et  $(p, \theta)$  présentés respectivement dans les figures 19 et 20 montrent clairement que la zone sécurisée dans le cas de plusieurs espions dépend des trois paramètres : le nombre d'espions, les angles d'attaques et le paramètre de la dépolarisation du canal.

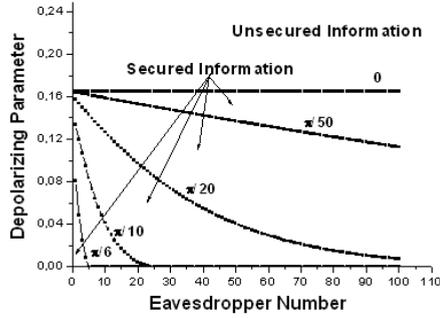


Figure 19 : Diagramme de phase  $(N, p)$  pour différents angles d'attaques

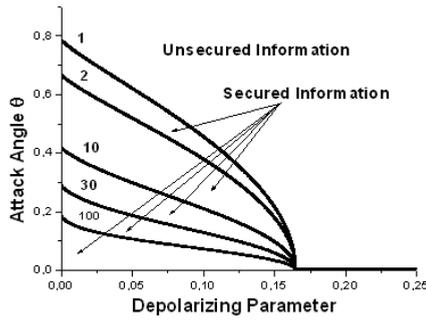


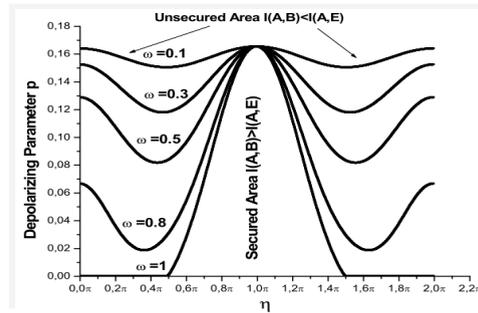
Figure 20 : Diagramme de phase  $(p, \theta)$  pour différents nombre d'espions.

Maintenant ; nous allons étudier la distribution de clef quantique en utilisant le protocole BB84 basé sur des états de bases partiellement non orthogonaux (éqs.13 et 14) en présence de multiples attaques séquentielles dans un canal dépolarisant isotrope. Le calcul des informations mutuelles (eqs.13 et 14) ainsi que le taux d'erreur quantique reposent essentiellement sur le calcul des probabilités conditionnelles:

$$\begin{aligned}
 P_{AB}(0/0) &= P_{AB}(1/1) \\
 &= \left( \sum_{k=0}^n \frac{2^{n-k} + 1}{2^{n-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, n}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_{i_j} \sin^2(\eta_{i_j})) \prod_{i=k+1}^n \omega_{i_i} \sin^2(\eta_{i_i}) \right) \left( 1 - \frac{4p}{3} \right) + \frac{2p}{3}
 \end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned}
& P_{AE_m}(0/0) \\
&= \left( \left( 1 - \frac{4}{3}p \right) \sum_{k=0}^{m-1} \frac{2^{m-k} + 1}{2^{m-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, m-1} \prod_{j=1}^k \left( 1 - \omega_{i_j} \left( \frac{1 + \cos(\eta_{i_j})}{2} \right) \right) \right) \prod_{l=k+1}^m \omega_{i_l} \\
&+ \frac{1 - \frac{\omega_m}{2}(1 + \cos(\eta_m))}{2} + \frac{2}{3} p \omega_m \frac{(1 + \cos(\eta_m))}{2} \sum_{i=1}^m q_i \\
&+ \left( \frac{1 - \frac{\omega_m}{2}(1 + \cos(\eta_m))}{2} \right. \\
&+ \left. \sum_{k=0}^{m-1} \frac{2^{m-k} + 1}{2^{m-k+1}} \sum_{i_1, \dots, i_k=1, m-1} \prod_{j=1}^k \left( 1 - \omega_{i_j} \left( \frac{1 + \cos(\eta_{i_j})}{2} \right) \right) \prod_{l=k+1}^m \omega_{i_l} \left( \frac{1 + \cos(\eta_{i_l})}{2} \right) \right) \sum_{i=m+1}^n q_i
\end{aligned} \tag{24}$$

Les diagrammes de phases établis dans la figure 21 et 22 montrent que pour un canal caractérisé par une dépolarisation  $p < 0.165$ , il existe un intervalle  $(\eta_1, \eta_2)$  dans lequel la clef est non sécurisée. Les valeurs de  $\eta_1$  et  $\eta_2$  dépendent essentiellement de la dépolarisation  $p$  et de la probabilité d'attaques  $\omega$ . En dehors de cet intervalle la clef est sécurisée de façon inconditionnelle. L'information perdue est inférieure à celle reçue par Bob pour toute probabilité d'attaques inférieure à l'indépendamment de l'angle  $\eta$ . Tandis que pour une probabilité certaine ; la clef n'est sécurisée que pour des angles  $\frac{\pi}{2} < \eta < \frac{3\pi}{2}$  (Fig.21). Le même comportement a été obtenu dans la figure 22 présentant le diagramme de phases dans l'espace des paramètres  $(\eta, \omega)$ .



**Figure 21** : Diagramme de phases dans l'espace des paramètres  $(p, \eta)$  pour  $N=1$  et différentes probabilités d'attaques  $\omega$ .

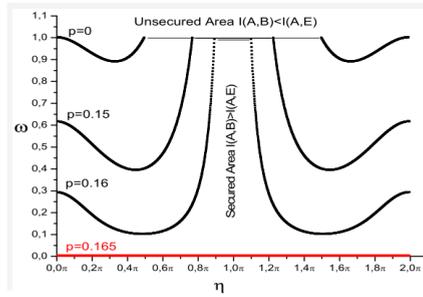


Figure 22 : Diagrammes de phase dans l'espace des paramètres ( $\eta$ ,  $\omega$ ); pour  $N=1$  et différentes valeurs de  $p$ .

Le comportement du taux d'erreur quantique en fonction de l'angle  $\eta$  est présenté dans les figures 22 a et 22 b. Il est clair que le taux d'erreur dépend de l'angle assurant partiellement la non orthogonalité des états de bases, le nombre d'attaques et le bruit intrinsèque du canal gouverné par le paramètre de dépolarisation  $p$ . Dans le cas d'un seul espion et  $p = 0,1$  le taux d'erreur quantique atteint sa valeur maximale (QBER = 0,16) pour  $\eta \approx 0,77 \pi$  (Fig.22a). Cependant, la figure 22b montre que le taux d'erreur augmente avec l'angle et le nombre d'espions, et pour un nombre d'espions  $N$  donné, il existe un angle particulier pour lequel le taux est maximal. Par exemple pour  $N=10$ , le taux maximal (42.5%) correspond à  $\eta=0.8 \pi$

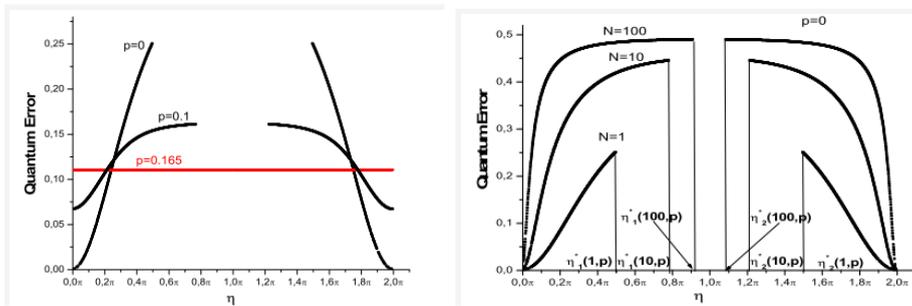
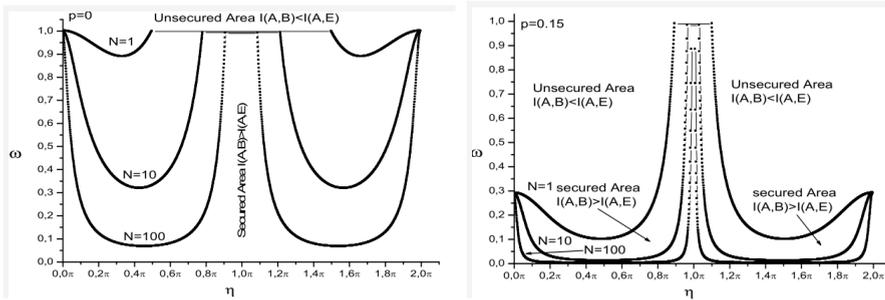


Figure 23 : Le comportement du taux d'erreur quantique en fonction de l'angle  $\eta$  ; (a) pour différentes valeurs de dépolarisation  $p$  ; (b) pour différents nombres d'espions

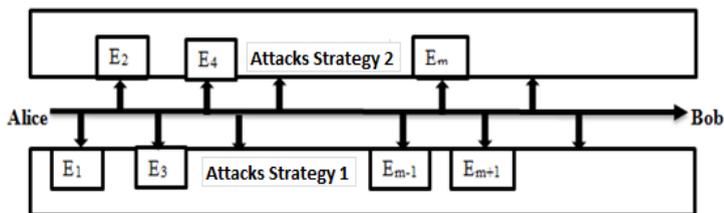
Le diagramme de phases établi dans la figure 22, montre que la zone sécurisée dans l'espace des paramètres ( $\eta$ ,  $\omega$ ) se rétrécit de façon remarquable en augmentant le bruit du canal et/ou le nombre d'espions. Cependant, la zone sécurisée augmente légèrement lorsque l'angle  $\eta$  est proche de  $\pi$



**Figure 24 :** Diagrammes de phases dans l'espace des paramètres ( $\eta$ ,  $\omega$ ) ;  
à gauche ( $p=0$  : canal parfait) et à droite  $p=0.15$ .

#### IV- Stratégie de Distribution de clef quantique avec des attaques hybrides

Dans cette partie, nous considérons le cas où les espions successifs présents dans le canal attaquent le photon avec deux stratégies différentes; de telle sorte que si l'espion  $E_i$  adopte comme stratégie d'attaques "interception-émission", les espions  $E_{i-1}$  et  $E_{i+1}$  adoptent le "clonage" comme stratégie d'attaques, et ainsi de suite comme l'indique le schéma suivant :



**Schéma montrant les deux stratégies d'attaques adoptées par les espions successifs**

Dans la suite nous allons étudier les deux cas de figures :

- Le premier cas pour lequel le premier espion adjacent à Alice adopte comme stratégie ‘‘interception-émission’’
- Le deuxième cas pour lequel le premier espion adjacent à Alice adopte le ‘‘clonage’’ comme stratégie d’attaque.

#### IV-1- Attaques alternées pour lesquelles le premier espion adopte ‘‘le clonage’’

Notons que Si le nombre  $N$  total d’espions est impair  $\frac{N+1}{2}$  espions adoptent le clonage comme stratégie et les  $\frac{N-1}{2}$  adoptent comme stratégie ‘‘interception-émission’’ sur le canal quantique.

Si  $N$  est pair, les  $N/2$  espions adoptent le clonage comme stratégies et les autres  $N/2$  adoptent ‘‘interception-émission’’ comme stratégie d’attaques. Cependant, les probabilités conditionnelles relatives aux informations mutuelles entre Alice et Bob s’écrivent :

$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) = \left[ \sum_{k=0}^{N/2} 2^{\frac{N-k}{2}} + 1 \times \sum_{i_1, \dots, i_k=1, N/2}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^{N/2} \omega_l \right] \times \left( 1 + \prod_{l=1}^{N/2} \cos(\theta_l) \right) / 2 ; N \text{ pair} \quad (25)$$

$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) = \left[ \sum_{k=0}^{(N-1)/2} 2^{\frac{(N-1)-k}{2}} + 1 \times \sum_{i_1, \dots, i_k=1, (N-1)/2}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^{(N-1)/2} \omega_l \right] \times \left( 1 + \prod_{l=1}^{(N+1)/2} \cos(\theta_l) \right) / 2 ; N \text{ impair} \quad (26)$$

De même pour les probabilités conditionnelles relatives aux informations mutuelles entre Alice et un espion  $E_m$  s’écrivent :

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \left( 1 + \left[ \prod_{i=1}^{\frac{m-1}{2}} \left( 1 - \frac{\omega_i}{2} \right) \frac{\omega_m}{2} \right] \times \prod_{i=1}^{\frac{m}{2}} \cos(\theta_i) \right) / 2 ; m \text{ pair} \quad (27)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \left( 1 + \left[ \sum_{k=0}^{(m-1)/2} 2^{\frac{(m-1)-k}{2}} + 1 \times \sum_{i_1, \dots, i_k=1, (m-1)/2}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^{(m-1)/2} \omega_l \right] \times \prod_{l=1}^{(m-1)/2} \cos(\theta_l) \sin(\theta_m) \right) / 2 ; m \text{ impair} \quad (28)$$

#### IV-2- Attaques alternées pour lesquelles le premier espion adopte ‘‘interception-émission’’

Contrairement au cas précédent, si le nombre  $N$  total d’espions est impair,  $\frac{N+1}{2}$  espions adoptent ‘‘interception-émission’’ comme stratégie et les  $\frac{N-1}{2}$  adoptent comme stratégie le

‘‘clonage’’ sur le canal quantique. Cependant, les probabilités conditionnelles relatives aux informations mutuelles entre Alice et Bob et entre Alice et un espion  $E_m$  s’écrivent :

$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) \left[ \sum_{k=0}^{N/2} \frac{2^{\frac{N}{2}-k} + 1}{2^{\frac{N}{2}-k+1}} \times \sum_{i_1, \dots, i_k=1, N/2}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^{N/2} \omega_l \right] \times \left( 1 + \prod_{i=1}^{N/2} \cos(\theta_i) \right) / 2 ; N \text{ pair} \quad (29)$$

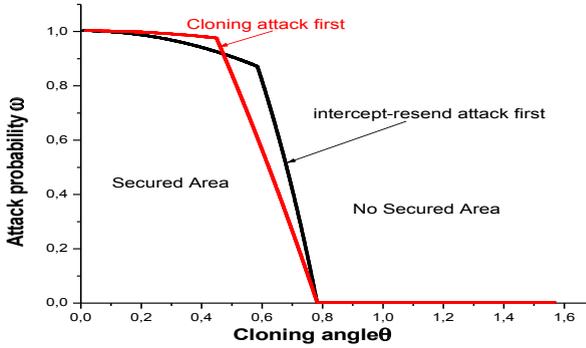
$$P_{AB}(0/0) = P_{AB}(1/1) \left[ \sum_{k=0}^{(N+1)/2} \frac{2^{\frac{(N+1)}{2}-k} + 1}{2^{\frac{(N+1)}{2}-k+1}} \times \sum_{i_1, \dots, i_k=1, (N+1)/2}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^{(N+1)/2} \omega_l \right] \times \left( 1 + \prod_{i=1}^{(N-1)/2} \cos(\theta_i) \right) / 2 ; N \text{ impair} \quad (30)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \left( 1 + \left[ \sum_{k=0}^{m/2} \frac{2^{\frac{m}{2}-k} + 1}{2^{\frac{m}{2}-k+1}} \times \sum_{i_1, \dots, i_k=1, \frac{m}{2}}^k \prod_{j=1}^k (1 - \omega_j) \prod_{l=k+1}^{m/2} \omega_l \right] \times \prod_{i=1}^{\frac{m-1}{2}} \cos(\theta_i) \sin(\theta_m) \right) / 2 ; m \text{ pair} \quad (31)$$

$$P_{AE_m}(0/0) = P_{AE_m}(1/1) = \left( 1 + \left[ \prod_{i=1}^{(m-1)/2} \left( 1 - \frac{\omega_i}{2} \right) \frac{\omega_m}{2} \right] \times \prod_{i=1}^{(m-1)/2} \cos(\theta_i) \right) / 2 ; m \text{ impair} \quad (32)$$

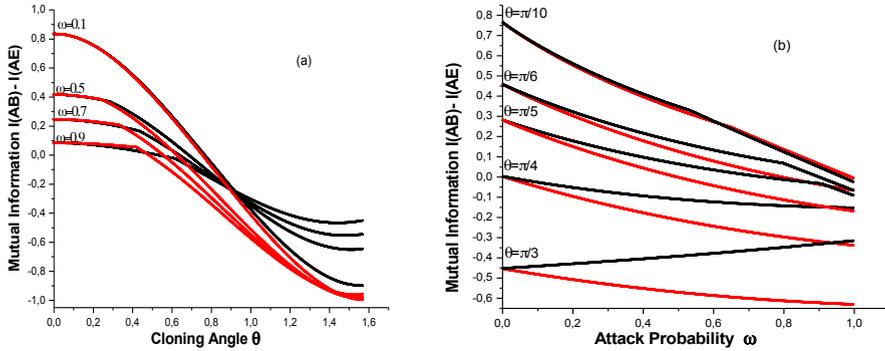
### IV-3- Résultats et discussions

Dans le cas de deux espions ( $N=2$ ), le diagramme phase établi, dans l’espace des paramètres  $(\theta, \omega)$ , présenté dans la figure 23, exhibe une ligne de transition information sécurisée/non sécurisée. Cependant la zone sécurisée dans l’espace des paramètres  $\theta$  and  $\omega$  dépend de l’ordre chronologique adopté par les deux espions présents dans le canal.



**Figure 25 :** The  $(\theta, \omega)$  phase diagram showing the transition between secured and no secured information in the case of two ( $N=2$ ) eavesdroppers.

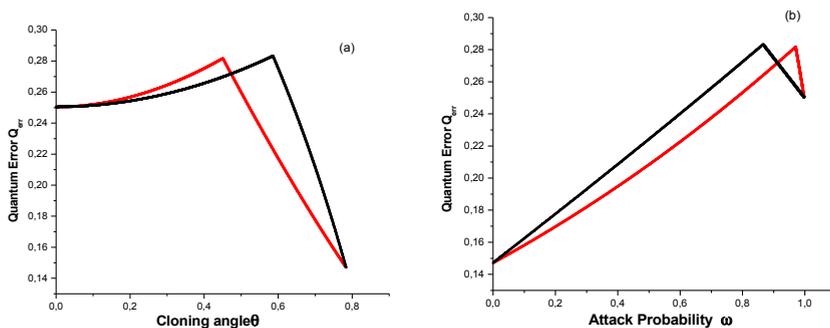
En effet, il est clair que la zone de sécurité correspondant à la deuxième stratégie hybride pour laquelle le premier espion adopte ‘‘interception-émission’’ comme stratégie d’attaques, est légèrement plus large que celle correspondant au à la première stratégie hybride pour laquelle le premier espion adopte le clonage comme stratégie d’attaques.



**Figure 26** : L'information secrète  $I_s = I(A,B) - I(A,E)$  (a) en fonction de l'angle d'attaque pour différentes probabilités d'interception  $\omega$  ; (b) en fonction de la probabilité d'attaques pour différents angles d'attaques ; dans le cas ( $N=2$ ).

La figure 24 montre que pour les faibles probabilités d'interception et les faibles angles de clonage, la zone où les deux courbes noire et rouge sont approximativement superposées est plus large, ce qui correspond à une distribution de clés quantiques plus sûre. En revanche, les informations secrètes sont négatives quelle que soit la stratégie d'hybridation adoptée.

D'autant plus, la stratégie d'hybridation des attaques joue un rôle important dans le comportement du taux d'erreur quantique QBER en fonction de l'angle d'attaque (Fig.25 a) et en fonction de la probabilité d'interception (Fig.25b). Mais dans les deux cas, le taux d'erreur quantique maximal est environ 28,4% et le taux minimal est de l'ordre de 14,6%.



**Figure 27** : Le comportement du taux d'erreur quantique QBER (a) en fonction de l'angle d'attaque ; (b) en fonction de la probabilité d'attaque ; dans le cas de deux espions ( $N=2$ ). La couleur rouge correspond à la première stratégie d'hybridation (clonage en premier) ; tandis que la couleur noire correspond à la deuxième stratégie (interception-émission en premier) .

## V- Transmission des signaux quantiques à base de particules intriquées dans des canaux dépolarisants

Cette partie porte sur l'étude de l'effet de la dépolarisation des canaux quantiques sur la qualité de la transmission de l'information à base de deux photons intriqués. Le cas de trois photons intriqués a été aussi étudié dans le cas d'un canal isotrope.

### V-1- Description du canal

Reprenons le canal défini dans l'équation (17), cette fois-ci nous supposons qu'il est anisotrope ; de telle sorte que la densité d'état d'entrée  $\pi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  sera transformée après transmission dans le canal en une densité de sortie :  $\Phi(\pi_i) = p_0\pi_i + \sum_{k=x,y,z} p_k\sigma_k\pi_i\sigma_k^\dagger$  ;  $\sigma_x, \sigma_y$  et  $\sigma_z$  sont des transformations de Pauli que peut subir le photon avec affectées de leur probabilité  $p_x, p_y$  et  $p_z$  respectivement ; avec  $p_0 + p_x + p_y + p_z = 1$  :

Posons  $p_0 = \frac{1}{4}(1 + 3\eta)$  et  $p_{k=x,y,z} = \frac{1}{4}(1 - \eta_{k=x,y,z})$ , avec  $0 \leq \eta_{k=x,y,z} \leq 1$  et  $\eta_x + \eta_y + \eta_z = 3\eta$ ,

A noter que le cas particulier  $\eta = 1$  correspond à un canal parfait. Tandis que Le cas  $\eta_x = \eta_y = \eta_z = \eta$  correspond à un canal dépolarisant isotrope.

### V-2- Informations mutuelles

Dans un système quantique formée par deux sous-systèmes (A) et (B) l'information mutuelle mesurant la corrélation totale est donnée par:

$$I_{AB} = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) \quad (33)$$

Où  $\rho_{AB}$  est la matrice densité de l'ensemble du système ;  $\rho_A$  et  $(\rho_B)$  sont les matrices de densité des sous-systèmes (A) et (B) respectivement. S étant l'entropie de Von Neumann définie par :

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \text{Log}_2 \rho) = -\sum_k \lambda_k \text{Log}_2 \lambda_k \quad ; \quad (34)$$

où les  $\lambda_k$  sont les valeurs propres de la matrice densité  $\rho$ .

Considérons un état initial  $|\psi_i\rangle$  composé de deux particules intriquées  $|\psi_i\rangle = \cos(\theta_i)|00\rangle_i + \sin(\theta_i)|11\rangle_i$ . En utilisant la représentation du vecteur de Bloch, l'opérateur de densité d'entrée  $\pi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  s'écrit:

$$= \frac{1}{4} \left( \left( I^{(1)} \otimes I^{(2)} + \cos(2\theta_i) \left( \sigma_z^{(1)} \otimes I^{(2)} + I^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} \right) + \sin(2\theta_i) \left( \sigma_x^{(1)} \otimes \sigma_x^{(2)} - \sigma_y^{(1)} \otimes \sigma_y^{(2)} \right) + \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} \right) \right) \quad (35)$$

Où les  $\sigma_x^{(j)}, \sigma_y^{(j)}, \sigma_z^{(j)}$  sont des matrices de Pauli et  $I^{(j)}$  représente la matrice unité qui agissent sur le  $j^{\text{ème}}$  qubit ( $j=1,2$ ). Et par suite l'opérateur densité résultant s'écrit :

$$\rho_i = \frac{1}{4} \left\{ \begin{aligned} & I^{(1)} \otimes I^{(2)} + \frac{1}{2} (\eta_x + \eta_y) \cos(2\theta_i) (\sigma_z^{(1)} \otimes I^{(2)} + I^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}) + \frac{1}{4} (\eta_x + \eta_y)^2 \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} + \\ & \frac{1}{4} \sin(2\theta_i) [(\eta_z + \eta_y)^2 \sigma_x^{(1)} \otimes \sigma_x^{(2)} - (\eta_z + \eta_x)^2 \sigma_y^{(1)} \otimes \sigma_y^{(2)}] \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

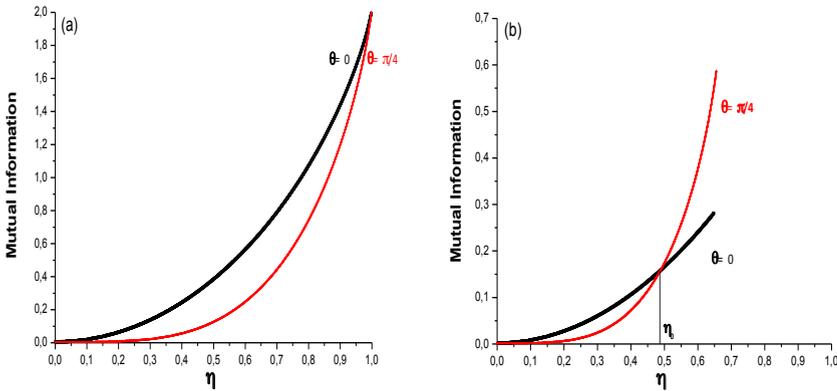
A noter que pour un état d'entrée  $|\psi_i\rangle$  à deux qubits décrit par un angle  $\theta_i$  fixé, le maximum de

l'information mutuelle est calculé à partir de l'entropie  $S(\rho_i) = -\sum_{k=1}^4 \lambda_k(\theta_i) \text{Log}_2 \lambda_k(\theta_i)$

### V-3- Résultats et discussion

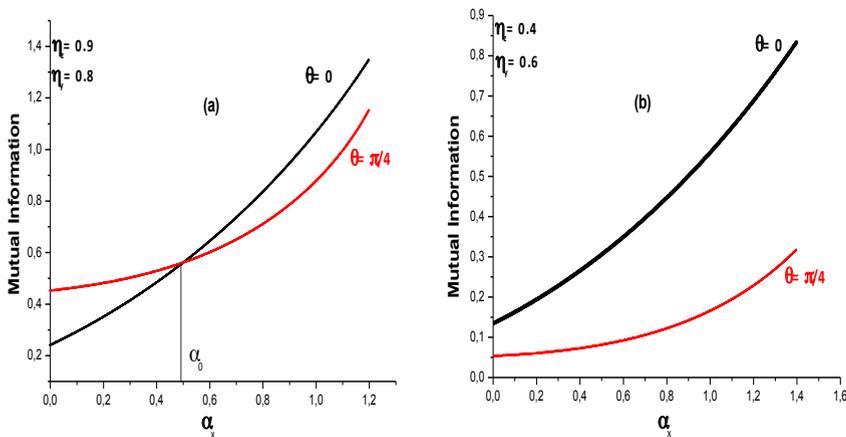
L'information mutuelle correspondant à la transmission de l'état intriqué, via le canal dépolarisant défini a été calculée numériquement dans le cas les deux cas canal isotrope et canal anisotrope pour les états faiblement ( $\theta = 0$ ) et fortement ( $\theta = \frac{\pi}{4}$ ) intriqués. La figure 26 présente le comportement de l'information mutuelle pour des signaux quantiques à base des particules intriquées, en fonction de la dépolarisation du canal, dans les deux cas, canal isotrope (figure 26a) et d'un canal anisotrope (figure 26b). Cependant, la figure 26b présente le comportement de l'information mutuelle en fonction de l'anisotropie du canal dans le cas particulier  $\eta_x = \eta_y = \frac{2\eta}{3}$  et  $\eta_z = \frac{5\eta}{3}$ . Il est clair que dans le cas isotrope (figure 26a) l'information mutuelle correspondant au forte intrication est plus petite que celle correspondant au faible intrication, ce qui signifie, que la transmission de deux qubits faiblement intriqués est de très bonne qualité par rapport à celle basée sur deux qubits fortement intriqués. Toutefois, la figure 26b établi dans le cas d'un canal dépolarisant anisotrope la montre que l'existence d'une dépolarisation  $\eta_0$  au dessous de laquelle ( $\eta < \eta_0$ ), la transmission du signal faiblement intriqué est meilleure que la transmission du signal fortement intriqué alors que dans le cas ( $\eta > \eta_0$ ) la transmission est de très bonne qualité pour un signal fortement intriqué.

Cependant, avant de préparer le signal à transmettre dans un canal quantique, et dans le but de choisir l'intrication susceptible d'assurer une transmission de très bonne qualité, il est recommandé de connaître la nature de la dépolarisation dudit canal, ainsi que son degré d'anisotropie (fortement ou faiblement anisotrope).

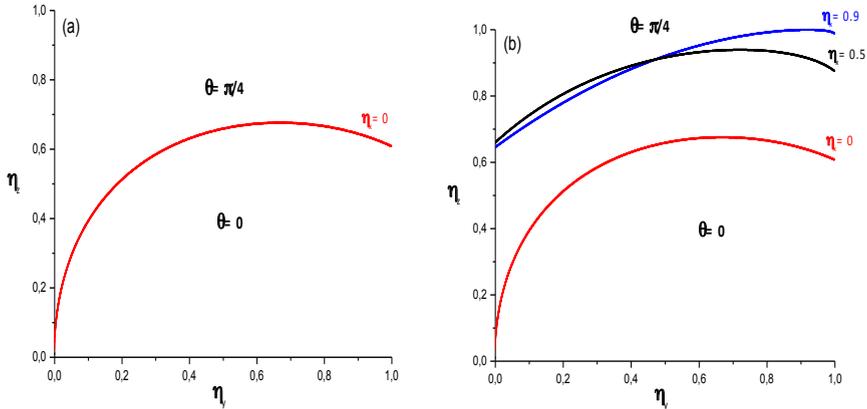


**Figure 28** : L'information mutuelle en fonction du paramètre de dépolarisation (a) canal isotrope (b) canal anisotrope.

Les informations mutuelles obtenues dans la figure 27 en fonction du rapport  $\alpha_x = \frac{\eta_x}{\eta_y}$  ; montrent que la transmission dépend fortement de l'anisotropie  $\alpha_x$ . En effet, pour des valeurs données de  $\eta_y$  et  $\eta_z$ , il existe une valeur particulière  $\alpha_0$  au dessous de laquelle la transmission du signal fortement intriqué est meilleure par rapport à celle d'un signal faiblement intriqué (Fig.27a). Tandis que pour ( $\alpha_x > \alpha_0$ ), la transmission du signal faiblement intriqué est la meilleure (Fig.27b).



**Figure 29** : L'information mutuelle avec des états faiblement (noire) et fortement (rouge) intriqués en fonction du paramètre  $\alpha_x = \frac{\eta_x}{\eta_y}$  (a)  $\eta_y = 0.8, \eta_z = 0.9$  et (b)  $\eta_y = 0.6, \eta_z = 0.4$ .

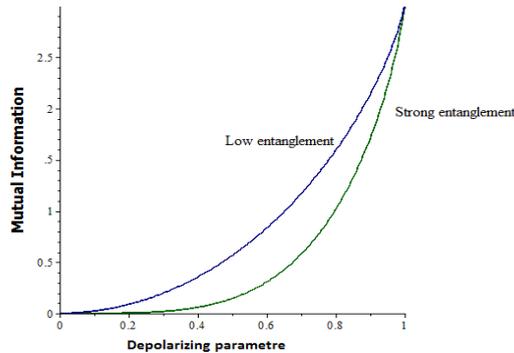


**Figure 30** : Le diagramme de phase  $(\eta_y, \eta_z)$  pour (a)  $\eta_x = 0$  et (b) plusieurs valeurs  $\eta_x$ .

Le diagramme de phase établi dans l'espace  $(\eta_y, \eta_z)$ , montre les régions, où la transmission des états fortement ou faiblement intriqués est la meilleure. Ainsi, pour  $\eta_x = 0$ , et pour toute valeur fixée de  $\eta_y$ , il est clair que la transmission d'un signal fortement intriqué est la meilleure pour les grandes valeurs de  $\eta_z$ ; tandis que la transmission des signaux faiblement intriqués est la meilleure pour les faibles valeurs de  $\eta_z$ . La ligne de transition séparant les deux régions est présentée dans figure 28 a. Par exemple, pour  $\eta_y = 0.6$  et  $\eta_z = 0.5$ , la transmission du signal faiblement intriqué est meilleure que celle du signal fortement intriqué; tandis que pour  $\eta_y = 0.6$  et  $\eta_z = 0.7$ , c'est le cas contraire qui persiste. La figure 28b présente des résultats similaires dans les cas  $\eta_x = 0$ ,  $\eta_x = 0.5$  et  $\eta_x = 0.9$ .

Dans le but d'étudier l'impact du nombre de particules intriquées sur la qualité de la transmission d'un signal quantique, nous considérons la transmission, dans un canal dépolarisant isotrope, d'un signal quantique, à base de trois particules intriquées, gouverné par  $|\varphi_i\rangle = \cos(\theta_i)|000\rangle_i + \sin(\theta_i)|111\rangle_i$ .

Les informations mutuelles présentées dans la figure 29 montrent que la transmission d'un signal à faible intrication est meilleure par rapport à celle correspondant à un signal de forte intrication en bon accord avec le cas de deux particules intriquées. En revanche, la transmission basée sur trois particules intriquées est de très bonne qualité par rapport à celle de deux particules.



**Figure 31** : L'information mutuelle en fonction de la dépoliarisation dans le cas de trois particules intriquées

## VI- Conclusion générale

Nous avons développé de nouveaux protocoles de distribution de clés quantiques garantissant de façon inconditionnelle la sécurité de l'information dans des canaux quantiques dépolarisants anisotropes. Ces protocoles reposent essentiellement sur l'injection des faux espions dans les canaux de transmission. En particulier nous avons étudié le protocole BB84 standard à quatre états sous l'effet de multiples attaques séquentielles. Nous avons montré que l'injection des faux espions renforce davantage la sécurité de l'information.

Nos activités ont été aussi étendues aux protocoles gouvernés par des systèmes quantiques de grandes dimensions (qudit) et un nombre bien déterminé de bases mutuellement non biaisées. Nous avons montré que l'erreur quantique par qudit, augmente avec le nombre d'attaques dans le canal. Ce qui permettra de renforcer davantage la sécurité de la communication en injectant des faux espions dans les canaux de communication. Les protocoles pour lesquels les états de bases sont partiellement non orthogonaux. Il se trouve que l'angle optimal entre les états de bases non orthogonaux dépend essentiellement du nombre d'attaques et la stratégie adoptée par les espions présents dans le canal. Cette étude a été aussi étendue aux cas des canaux dépolarisants, pour lesquels nous avons montré que l'erreur quantique par qubit (QBER) peut être inférieure ou supérieure au seuil standard du protocole BB84 (25%), en fonction des paramètres intrinsèques du protocole et aussi du canal.

Nous avons aussi proposé des protocoles hybrides basés sur un mélange d'attaques "interception-émission" et de clonage des canaux parfaits et/ou dépolarisants dans les quels nous avons montré que la quantité d'information intercepté dans le canal, dépend essentiellement de l'ordre chronologique des attaques.

Ensuite, nous avons investigué, à l'aide des calculs quantiques avancés, les effets d'anisotropie des canaux dépolarisants la qualité de la transmission des signaux quantiques à base de deux

particules intriquées. Nous avons montré que la qualité de la transmission dépend essentiellement du degré d'anisotropie du canal et le degré d'intrication du signal transmis. Dans le cas des canaux à forte anisotropie, nous avons montré que la transmission est de très bonne qualité, pour les signaux fortement intriqués; tandis que dans le cas des canaux à faible anisotropie, la transmission est de très bonne qualité, pour les signaux faiblement intriqués.

Le cas des signaux quantiques à base de trois particules intriquées a été aussi étudié dans le cas d'un canal quantique isotrope. Nous avons montré que la qualité du signal est meilleure par rapport au cas de deux particules.

**Notre challenge** est de développer des codes numériques capables de simuler toute catégorie de protocoles de distribution de clefs quantiques avec différentes stratégies pour résoudre un certain nombre de problèmes complexes et pertinents liés à la sécurité de l'information.

## Références

- [1] H. Ez-Zahraouy and A. Benyoussef ; International Journal of Modern Physics B, Vol. **23**, 4755 (2009)
- [2] M. Dehmani, H. Ez-Zahraouy and A. Benyoussef ; Journal of Computer Science, Vol. **6** , 684 (2010)
- [3] M. Daoud and H. Ez-Zahraouy; Phys. Scr. **84**, 045018 (2011)
- [4] M. Daoud and H. Ez-Zahraouy; Journal of Russian Laser Research, Vol. **33**, 20 (2012)
- [5] M. Dehmani, M. Errahmani, H. Ez-Zahraouy and A. Benyoussef; Phys. Scr. **86**, 015803 (2012)
- [6] M. Dehmani, H. Ez-Zahraouy, and A. Benyoussef Journal of Russian Laser Research, Vol. **34**, 71 (2013)
- [7] M. Dehmani, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef; Optik **125**, 624 (2014)
- [8] M. Dehmani, H. Ez-Zahraouy, and A. Benyoussef; Journal of Russian Laser Research, Vol. **36**, 228 (2015)
- [9] M. Dehmani, H. Ez-Zahraouy and A. Benyoussef; Quantum Cryptography within Several Sequential Attacks in BB84 Protocol (pp. 149-176); Chapter book in Advances in Mathematics Research. Volume 19; (2015) Albert R. Baswell (Editor), Nova Sciences Publisher.
- [10] M. Dehmani, E. Salmani, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef; Journal of Theoretical and Applied Information Technology Vol. **95**, 2252 (2017)
- [11] M. Dehmani, E. Salmani, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef; International Journal of Electrical and Computer Engineering Vol. **8**, 2988 (2018)
- [12] M. Dehmani, E. Salmani, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef; To appear in Int. J. Information and Communication Technology (2020)
- [13] M. Dehmani, E. Salmani, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef; BB84 protocol with alternating cloning and intercept-resend attacks ; Accepted in Int. J. Information and Communication Technology



# QUANTUM INFORMATION THEORY SOME FUNDAMENTAL ASPECTS AND PROMISING APPLICATIONS

*Mohammed DAOUD*

*Department of Physics, Faculty of Sciences,  
University Ibn Tofail, Kenitra, Morocco  
email: m-daoud@hotmail.com*

## Abstract

Quantum information is a multidisciplinary subject which involves several fields of research in physics and mathematics (quantum mechanics, optics, information theory, programming, discrete mathematics, ...). This contribution focuses on some theoretical and mathematical aspects behind quantum information theory. A discussion is presented about the characterization, classification and quantification of quantum correlations in multi-partite quantum systems. Entropic and geometric non classical correlations quantifiers are introduced. Besides the fundamental aspects of quantum information, the theoretical foundations of some promising applications such as quantum metrology, quantum key distribution and quantum computing are discussed. Some mathematical problems related to the so-called *mutually unbiased bases* used in quantum computing and quantum information processing are presented.

## 1 The general framework of quantum information theory

The science of quantum information has arisen over the last two decades as a convergence of the two 20<sup>th</sup> century great revolutions: quantum mechanics and information science [1, 2, 3, 4]. This fascinating and fast-growing field brings together concepts, techniques and tools from classical information science (computer science, communications, cryptography) and quantum mechanics that describes how the universe behaves at its smallest and most fundamental level. The classical information science concerns the mathematical theory that studies the information processing protocols such as as coding, storage, data compression, transmission and security of data. In classical information processing systems, information is stored in the states of a physical system governed by the classical laws of physics. Quantum information theory deals how classical information processing protocols can be accomplished when the information is stored in the quantum states of a physical system. In other words, the main objectives of the quantum information science is to enhance the efficiency of storage and transmission of information by exploiting the quantum mechanical properties of physical systems. Quantum information theory shares a certain common set of foundational concepts with its classical

counterpart but is distinguished by a large number of radically new concepts and potential applications based on exotic possibilities inherent in quantum theory itself ( see [5, 6] and references therein). The unit of quantum information is the *quantum bits* or *qubits* which replaces the notion of classical bit (0 and 1). A qubit can have a non denumerably infinite number of possible states in contrast with a classical bit which has just two possible states (namely, '0' and '1'). In a two-dimensional Hilbert space  $\mathbb{C}^2$ , the general a qubit writes as the linear combination given by the normalized vector  $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1, \quad a \in \mathbb{C}, \quad b \in \mathbb{C} \quad (1)$$

where  $|0\rangle$  and  $|1\rangle$  are the elements of an orthonormal basis in  $\mathbb{C}^2$ . From a geometrical point of view, the state  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  of the space  $\mathbb{C}^2$  can be mapped to a point  $(x, y, z, t)$  of the sphere  $S^3$  in  $\mathbb{R}^4$  with  $a = x + iy$  and  $b = z + it$ . The state  $|\psi\rangle$  can be re-written as  $|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$  up to a global multiplicative phase factor. This implies that the point  $(x, y, z, t)$  of the sphere  $S^3$  can be represented as a point  $(1, \theta, \varphi)$  of the sphere  $S^2$  (the Bloch sphere) in  $\mathbb{R}^3$ . The application  $(x, y, z, t) \mapsto (1, \theta, \varphi)$  corresponds to the first Hopf fibration  $S^3 \xrightarrow{S^1} S^2$  of compact fibre  $S^1$ .

As the information can be encoded in quantum states belonging to a finite or infinite Hilbert space  $\mathcal{H}$  (isomorphic to  $\mathbb{C}^2$  for qubits or  $\mathbb{C}^d$  for qudits), the mathematical tools developed in quantum mechanics for finite-dimensional Hilbert spaces are of paramount importance in quantum information theory. Any well-defined two level quantum system can be thought of as representing a qubit. Examples of two state quantum systems are a photon, which possesses two polarization states, an electron, which possesses two possible spin states, or a particle in one of two possible energy states. The qudits can be implemented using vibrational states (zero-phonon state for  $|0\rangle$ , one-phonon state for  $|1\rangle$ ,  $\dots$ ,  $(d-1)$ -phonons state  $|d-1\rangle$ ). In a finite-dimensional Hilbert space  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$ , a generic vector describing a qudit state writes

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{d-1} c_n |n\rangle, \quad c_n \in \mathbb{C} \quad (2)$$

where the  $|n\rangle$  span the basis of  $\mathcal{H}$ . From an algebraic point of view, qudit systems can be described by a generalized variant of the Weyl-Heisenberg algebra [7, 8, 9]. From the point of view of quantum mechanics, the states  $|n\rangle$  can be realized as generalized angular momentum states with

$$|n\rangle = |j, m\rangle, \quad n = j - m, \quad d = 2j + 1 \quad (3)$$

where for fixed  $j$ , the index  $m$  takes the values  $-j, -j+1, \dots, j$ . This yields the correspondence  $|0\rangle = |j, j\rangle$ ,  $|1\rangle = |j, j-1\rangle$ ,  $\dots$ ,  $|d-1\rangle = |j, -j\rangle$  between qudits and angular momentum states. (Let us recall that the *angular momentum state*  $|j, m\rangle$  is a common eigenstate of the square  $J^2$  of a generalized angular momentum ( $J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle$ ) and of the  $z$ -component  $J_z$  of the angular momentum ( $J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle$ ). For  $d = 2$ , the basis vectors  $|0\rangle$  and  $|1\rangle$  can be identified with the vectors associated with the fundamental irreducible representation ( $j \equiv \frac{1}{2}$ ) of  $SU(2)$ , i.e.,  $|0\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ,  $|1\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ .

Another interesting qudit's physical realization involves the polarization states of single-mode multiphoton field. The single mode means that  $d$  photons forming a multi-photon have equal frequencies

and propagate along the same direction. The observables characterizing the multi-photon polarizations are the quantum analogue of the Stokes parameters in classical optics [10]. In this sense, the polarization of a light field can be described by the Hermitian Stokes operators

$$S_0 = \frac{1}{2}(a_h^\dagger a_h^- + a_v^\dagger a_v^-), S_3 = \frac{1}{2}(a_h^\dagger a_h^- - a_v^\dagger a_v^-), S_1 = \frac{1}{2}(a_h^\dagger a_v^- + a_v^\dagger a_h^-), S_2 = \frac{1}{2i}(a_h^\dagger a_v^- - a_v^\dagger a_h^-) \quad (4)$$

where the subscripts  $h$  and  $v$  label the horizontal and vertical polarization modes respectively. The photon creation and annihilation operators satisfy the standard bosonic commutation rules

$$[a_\alpha^-, a_\beta^+] = \delta_{\alpha,\beta}$$

where  $\alpha, \beta \in \{h, v\}$ . The Stokes operators  $S_1, S_2$  and  $S_3$  satisfy the structure relations of the Lie algebra  $su(2)$ . Bases states are the Fock states with certain number of photons in two orthogonal polarization modes. It is reasonable to use vertical and horizontal polarization modes for basis state definition. For a fixed total photon number  $n_h + n_v = d - 1$ , the Hilbert space is  $d$ -dimensional and spanned by the basis

$$\mathcal{F} = \{|n_h, n_v\rangle, n_h + n_v = d - 1\} \quad (5)$$

For a quantum system with multiple qudits, the resulting Hilbert space in which all qudits live is the tensor product of the individual qudit spaces. Hence, For  $N$  qudits system, the quantum states live in the  $d^N$ -dimensional Hilbert space  $\mathbb{C}^{d^N}$ . According to the superposition principle, this may lead to entangled states. In the case where  $d = 2^N$ , the corresponding qudits can be obtained from tensor products. For example, for  $d = 4$  a basis of  $\mathbb{C}^4 \sim \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  is such that an arbitrary quartit state writes as

$$|\psi\rangle = a|0\rangle \otimes |0\rangle + b|0\rangle \otimes |1\rangle + c|1\rangle \otimes |0\rangle + d|1\rangle \otimes |1\rangle$$

where  $a, b, c, d \in \mathbb{C}$  (usually, in  $|i\rangle \otimes |j\rangle$  the state  $|i\rangle$  refers to the first qubit and  $|j\rangle$  to the second).

It is interesting to remark that the vectors  $|\psi\rangle$  for  $d = 2, 2^2$  and  $2^3$  are associated with the Hopf fibrations  $S^3 \xrightarrow{S^1} S^2$  (connected to complex numbers),  $S^7 \xrightarrow{S^3} S^4$  (connected to quaternions) and  $S^{15} \xrightarrow{S^7} S^8$  (connected to octonions). Entanglement for  $d = 2^2$  and  $2^3$  can be discussed in terms of fibrations on spheres. In the same vein, we may ask the question of the interest for entanglement of Cayley-Dickson algebras for  $d = 2^N$  with  $N > 3$  and of fibrations on hyperboloids.

The two-qubit state  $|\psi\rangle$  is said to be entangled (non separable) if the quantum state cannot be written as the tensor product of two qubits in  $\mathbb{C}^2$ . It is simple to check that a necessary and sufficient condition for the state  $|\psi\rangle$  of  $\mathbb{C}^4$  to be non entangled (separable) is

$$ad - bc = 0.$$

Therefore, if  $ad - bc \neq 0$ , then the state is entangled. The degree of entanglement of an arbitrary pure normalized two-qubit state  $|\psi\rangle$  is characterized by the concurrence defined by

$$C = 2|ad - bc|, \quad 0 \leq C \leq 1 \quad (6)$$

For mixed two qubit states, we employ the concurrence as a measure of bipartite entanglement. For a pair of qubits  $A$  and  $B$  described by the density matrix  $\rho_{AB}$ , the concurrence is [11, 12]

$$C(\rho_{AB}) = \max\{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4, 0\} \quad (7)$$

for  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$  the square roots of the eigenvalues of the "spin-flipped" density matrix

$$\varrho_{AB} \equiv \rho_{AB}(\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho_{AB}^*(\sigma_y \otimes \sigma_y) \quad (8)$$

where the star stands for complex conjugation and  $\sigma_y \equiv \sigma_2$  is the usual Pauli matrix. Non entangled states correspond to  $C = 0$ , maximally entangled states to  $C = 1$ . A maximally entangled state is such that the density operator for each qubit is half the identity operator; it corresponds to a maximum value of the von Neumann entropy ( $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \ln \rho)$ ).

Quantum entanglement in quantum systems, comprising two or more parts, constitutes a key concept to distinguish between quantum and classical correlations and subsequently to understand quantum-classical boundary. Also, besides its fundamental importance, entanglement is commonly accepted to be extremely important in the development of modern quantum information science. Several scenarios for the physical implementation of entangled states has been investigated (see [13, 14] and the references therein). Hence, the superposition principle and entanglement provide the resource which offers an important resource to perform massive quantum parallelism with a speed up of computations (for  $N$  qubits,  $2^N$  computations can be achieved in parallel through the use of *quantum algorithms*). In this scheme, characterizing, quantifying and classifying the quantum correlations in multi-partite quantum systems is one of the challenging issues in quantum information theory. Some aspects and measures to distinguish between the classical and non classical correlations in bipartite quantum systems are discussed in what follows.

## 2 A unified scheme of correlations in multi-partite quantum systems

Therefore, the determination of the nature and the amount of quantum correlations between the sub-components of a quantum system has attracted a special attention during the last two decades. Different measures were introduced from different perspectives and for various purposes. Probably the most familiar measure is quantum discord [15, 16] which goes beyond the entanglement of formation. It is given by the difference of total and classical correlations existing in a bipartite system. Now, it is well understood that almost all quantum states, including unentangled (separable) ones, contain quantum correlations. However, the analytical evaluation of quantum discord requires an optimization procedure that is generally a challenging task. To overcome this difficulty, geometrical approaches were proposed in the literature. One may quote for instance the Hilbert-Schmidt norm in the space of density matrices which presents the advantage to get closed analytical expressions [17]. Several distances were employed in the context of quantum correlations quantification (trace distance, Bures distance, ...) with their own advantages and drawbacks.

The states of any multipartite quantum system can be classified as being classical, quantum-classical and quantum states. Subsequently, the correlations can also be categorized in total, quantum, semi-classical and classical correlations. This requires a specific measure (entropic or geometric measure) to decide about the dissimilarity between a given quantum state and its closest one without

the desired property and to provide a scheme to compare consistently different correlations existing in systems comprising two or more parts. In this sense, the relative entropy provides the tool to develop an approach dealing with a unified view of the correlations in multipartite systems.

However, it must be noticed that despite its theoretical information meaning, the relative entropy is not symmetrical in its arguments and therefore can not be viewed as a true metric distance. In other hand, from an analytical point of view, the derivation of closed expressions of based entropy measures involves optimization procedures that are in general challenging and complicated to achieve. To overcome such mathematical difficulties, a linearized variant of relative entropy allows the derivation of analytical expressions of quantum and classical correlations in a two qubit system. The relation with the geometric measure based on Hilbert-Schmidt norm is established and allows the derivation of computable correlations. In this respect, this approach can be seen, in some sense, interpolating between the based relative entropy view and the geometrical one. More specifically, it provides us with a very simple way to perform the optimization required in deriving closest product, classical and classical product states.

The linear form of relative entropy can be decomposed in symmetric and anti-symmetric parts. The antisymmetric part is related to quantum Jensen-Shannon divergence. In other hand, the symmetric part is exactly the Hilbert-Schmidt distance. Hereafter, we shall discuss and compare the additivity relations of the various correlations in a bipartite quantum system using the linear relative entropy and Hilbert-Schmidt norm. We also discuss the derivation of quantum discord for a two qubit system whose density matrix is of rank two and we give the expression of geometric discord based on trace norm. We also introduce the local quantum Fisher information which plays a special role in quantum metrology.

## 2.1 Relative entropy

The main ingredient for the unified view of the correlations existing in multipartite systems is the concept of relative entropy. It is the quantum analogue of the Kullback-Leibler divergence between two classical probability distributions and provides a measure of the dissimilarity between two quantum states. The relative entropy defined by

$$S(\rho\|\sigma) = -\text{Tr}(\rho \log \sigma) - S(\rho), \quad (9)$$

constitutes a quantitative tool to distinguish between the states of a given quantum and gives the distance between them according to the nature of their properties ( $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho)$  is the von Neumann entropy). The distance between a given state  $\rho$  and the closest product state ( $\pi_\rho = \rho_A \otimes \rho_B$ ), where  $\rho_A$  and  $\rho_B$  denote the reduced densities matrices of the subsystems, as measured by relative entropy, quantifies the total correlation  $T = S(\rho\|\pi_\rho)$ . It writes as the difference of the von Neumann

$$T = S(\rho\|\pi_\rho) = S(\pi_\rho) - S(\rho) \quad (10)$$

Similarly, using relative entropy, the quantum discord encompassing quantum correlations is measured as the minimal distance between the state  $\rho$  and the classical states

$$\chi_\rho = \sum_{i,j} p_{i,j} |i\rangle \langle i| \otimes |j\rangle \langle j| \quad (11)$$

where  $p_{i,j}$  are the probabilities and  $\{|i\rangle, |j\rangle\}$  local basis. It writes also as the difference between the von Neumann entropies of the states  $\rho$  and  $\chi_\rho$

$$D = S(\rho \|\chi_\rho) = S(\chi_\rho) - S(\rho). \quad (12)$$

The classical correlation, as measured by relative entropy, gives the distance between the classical state  $\chi_\rho$  and its closest classical product state  $\pi_{\chi_\rho}$ . It coincides with the difference of von Neumann entropies of the relevant states

$$C = S(\chi_\rho \|\pi_{\chi_\rho}) = S(\pi_{\chi_\rho}) - S(\chi_\rho). \quad (13)$$

In this approach the based relative entropy quantum correlations or quantum discord  $D$  (12) does not coincide with the quantum discord based on von Neumann entropy. The difference is given by

$$L = S(\pi_\rho \|\pi_{\chi_\rho}) = S(\pi_{\chi_\rho}) - S(\pi_\rho). \quad (14)$$

Noticing that the based entropy correlations  $T$ ,  $D$ ,  $C$  and  $L$  can be expressed as differences of von Neumann entropies (Eqs. (10), (12), (13) and (14)) and satisfy the following remarkable additivity relation

$$T - D - C + L = 0. \quad (15)$$

It must be noticed that the relative entropy (9) is not symmetric under the exchange  $\rho \leftrightarrow \sigma$ . In this respect, it cannot define a distance from a purely mathematical point of view. Moreover, the relative entropy induces intractable minimization procedures that are in general very difficult to perform [18]. To avoid such difficulties the linear relative entropy offers an alternative way to get computable expressions of correlations existing in multipartite systems .

### 2.1.1 Symmetrized linear relative entropy

The linear entropy

$$S_2(\rho) \doteq 1 - \text{Tr}(\rho^2)$$

is related to the degree of purity,  $P = \text{Tr}(\rho^2)$ , and therefore reflects the mixedness in the state  $\rho$ . It is defined as a linearized variant of von Neumann entropy by approximating  $\log \rho$  by  $\rho - \mathbb{I}$  where  $\mathbb{I}$  stands for the identity matrix. Accordingly, the relative entropy (9) can be linearized as follows

$$S_l(\rho_1 \|\rho_2) = \text{Tr} \rho_2(\rho_1 - \rho_2) \quad (16)$$

that is obviously not symmetric by interchanging  $\rho_1$  and  $\rho_2$ . To define a symmetrized linear relative entropy,  $S_l(\rho_1 \|\rho_2)$  is decomposed as the sum of two terms: symmetric and antisymmetric. The symmetric part is defined by

$$S_+(\rho_1 \|\rho_2) = S_l(\rho_1 \|\rho_2) + S_l(\rho_2 \|\rho_1). \quad (17)$$

The antisymmetric term is given by

$$S_-(\rho_1 \|\rho_2) = S_l(\rho_1 \|\rho_2) - S_l(\rho_2 \|\rho_1) \quad (18)$$

and rewrites as the differences between the linear entropies of the states  $\rho_1$  and  $\rho_2$

$$S_-(\rho_1 \|\rho_2) = S_2(\rho_2) - S_2(\rho_1). \quad (19)$$

It is important to emphasize that the symmetrized linear relative entropy (17) is related to some generalized version of relative entropy discussed in the literature. Indeed, it can be expressed as

$$S_-(\rho_1\|\rho_2) = D_2(\rho_1 + \rho_2\|\rho_2 - \rho_1) - D_2(\rho_1 + \rho_2\|\rho_1 - \rho_2) \quad (20)$$

in terms of quantum Jensen-Shannon entropy of order 2 defined by

$$D_2(\rho_1\|\rho_2) := S_2\left(\frac{\rho_1 + \rho_2}{2}\right) - \frac{1}{2}S_2(\rho_1) - \frac{1}{2}S_2(\rho_2). \quad (21)$$

which is a symmetrized version of relative entropy. It was recently used to investigate the distance between quantum states and subsequently constitutes a good geometric candidate to classify quantum states according to their correlation contents. The square root of quantum Jensen-Shannon divergence is a metric and can be isometrically embedded in a real Hilbert space equipped with a Hilbert-Schmidt norm. Using (16) and (17), the symmetric part of symmetrized linear relative entropy is exactly the Hilbert-Schmidt distance

$$S_+(\rho_1\|\rho_2) = \|\rho_1 - \rho_2\|^2. \quad (22)$$

The symmetric and antisymmetric linear entropy are important in the sense that the symmetrized linear relative entropy gives the distance between the states of a given quantum system and the anti-symmetrical linear relative entropy quantifies the amount of correlations existing between two distinct states. Hence, the linear relative entropy offers an adequate scheme to derive explicit expressions for correlations in a common framework and to discuss the relationship between quantum, semi-quantum and classical correlation.

### 2.1.2 Additivity relation of geometric and entropic correlations

The Fano-Bloch representation of an arbitrary two-qubit state  $\rho$  is

$$\rho = \frac{1}{4} \sum_{\alpha,\beta} R_{\alpha,\beta} \sigma_\alpha \otimes \sigma_\beta \quad (23)$$

where  $\alpha, \beta = 0, 1, 2, 3$ ,  $R_{i0} = \text{Tr}\rho(\sigma_i \otimes \sigma_0)$ ,  $R_{0i} = \text{Tr}\rho(\sigma_0 \otimes \sigma_i)$  are components of local Bloch vectors and  $R_{ij} = \text{Tr}\rho(\sigma_i \otimes \sigma_j)$  are components of the correlation tensor. The operators  $\sigma_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) stand for the three Pauli matrices and  $\sigma_0$  is the identity matrix. The distance (22), between two distinct density matrices  $\rho$  and  $\rho'$ , writes as

$$S_+(\rho\|\rho') \equiv d(\rho, \rho') = \frac{1}{4} \sum_{\alpha,\beta} (R_{\alpha,\beta} - R'_{\alpha,\beta})^2, \quad (24)$$

in terms of the elements of the correlations matrices. Beside the distance defined by (24), the linear analogue of total correlation  $T$  (10), quantum correlation  $D$  (12), Classical correlation  $C$  (13) and the quantity  $L$  (14) are respectively given by

$$T_2 = S_-(\rho\|\pi_\rho) \quad D_2 = S_-(\rho\|\chi_\rho) \quad C_2 = S_-(\chi_\rho\|\pi_{\chi_\rho}) \quad L_2 = S_-(\pi_\rho\|\pi_{\chi_\rho}). \quad (25)$$

Using the expression (19), it is simply verified that the correlations  $T_2$ ,  $D_2$ ,  $C_2$  and  $L_2$  can be written as differences of linear entropies. This implies the remarkable additivity relation [19]

$$T_2 - D_2 - C_2 + L_2 = 0. \quad (26)$$

Since the Hilbert-Schmidt provides an useful tool to quantify geometrically the quantum correlation (geometric quantum discord), the geometric analogues of total correlation  $T$  (10), quantum correlation  $D$  (12), classical correlation  $C$  (13) and the quantity  $L$  (14) can be introduced similarly [19] ( see also [20, 21])

## 2.2 Entropic quantum discord

For a state  $\rho \equiv \rho_{AB}$  of a bipartite quantum system composed of particle  $A$  and particle  $B$ , the quantum discord is defined as the difference between total correlation  $I(\rho_{AB})$  and classical correlation  $C(\rho_{AB})$ . The total correlation is usually quantified by the mutual information  $I$

$$I(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (27)$$

where  $\rho_{A(B)} = \text{Tr}_{B(A)}(\rho_{AB})$  is the reduced state of  $A(B)$ , and  $S(\rho)$  is the von Neumann entropy of a quantum state  $\rho$ . Suppose that a positive operator valued measure (POVM) measurement is performed on particle  $A$ . The set of POVM elements is denoted by  $\mathcal{M} = \{M_k\}$  with  $M_k \geq 0$  and  $\sum_k M_k = \mathbb{I}$ . We notice that in this case the generalized positive operator valued measurement is not required. Indeed, it has been shown ( see for instance [22, 23]) that for the optimal measurement for the conditional entropy is ensured by projective one. Thus, a projective measurement on the subsystem  $A$  project the system into a statistical ensemble  $\{p_{B_k}, \rho_{B_k}\}$ , such that

$$\rho_{AB} \longrightarrow \rho_{B_k} = \frac{(M_k \otimes \mathbb{I})\rho_{AB}(M_k \otimes \mathbb{I})}{p_{B_k}} \quad (28)$$

where the von Neumann measurement for subsystem  $A$  writes as

$$M_k = U \Pi_k U^\dagger : \quad k = 0, 1, \quad (29)$$

with  $\Pi_k = |k\rangle\langle k|$  is the projector for subsystem  $A$  along the computational base  $|k\rangle$ ,  $U \in SU(2)$  is a unitary operator with unit determinant, and

$$p_{B_k} = \text{tr} \left[ (M_k \otimes \mathbb{I})\rho_{AB}(M_k \otimes \mathbb{I}) \right].$$

The amount of information acquired about particle  $B$  is then given by

$$S(\rho_B) - \sum_k p_{B_k} S(\rho_{B_k}),$$

which depends on measurement  $\mathcal{M}$ . This dependence can be removed by doing maximization over all the measurements, which gives rise to the definition of classical correlation:

$$\begin{aligned} C(\rho_{AB}) &= \max_{\mathcal{M}} \left[ S(\rho_B) - \sum_k p_{B_k} S(\rho_{B_k}) \right] \\ &= S(\rho_B) - \tilde{S}_{\min} \end{aligned} \quad (30)$$

where  $\tilde{S}_{\min}$  denotes the minimal value of the conditional entropy

$$\tilde{S} = \sum_k p_{B_k} S(\rho_{B_k}). \quad (31)$$

The difference between  $I(\rho_{AB})$  and  $C(\rho_{AB})$  gives the amount of quantum discord in the system

$$D(\rho_{AB}) = I(\rho_{AB}) - C(\rho_{AB}) = S(\rho^A) + \tilde{S}_{\min} - S(\rho_{AB}). \quad (32)$$

The main difficulty, for several qubits as well as qudits systems, lies in performing the minimization of the conditional entropy 31. In general, there is no straightforward algorithm to compute explicitly quantum discord for mixed states except in some special situations like for instance ones involving rank two density matrices.

### 2.2.1 Quantum mutual information

Suppose that the density  $\rho_{AB}$  is a two qubit state of rank two. We denote the corresponding non vanishing eigenvalues by  $\lambda_1$  and  $\lambda_2$ . The joint entropy is

$$S(\rho_{AB}) = -\lambda_1 \log_2 \lambda_1 - \lambda_2 \log_2 \lambda_2. \quad (33)$$

The quantum mutual information is given by

$$I(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) + \sum_{j=1,2} \lambda_j \log_2 \lambda_j \quad (34)$$

where  $\rho^A$  and  $\rho^B$  are the marginal states of  $\rho_{AB}$ , and

$$S(\rho_A) = -\lambda_+^A \log_2 \lambda_+^A - \lambda_-^A \log_2 \lambda_-^A \quad S(\rho_B) = -\lambda_+^B \log_2 \lambda_+^B - \lambda_-^B \log_2 \lambda_-^B \quad (35)$$

Reporting (35) into (34), the quantum mutual information reads

$$I(\rho_{AB}) = H(\lambda_+^A) + H(\lambda_+^B) - H(\lambda_1) \quad (36)$$

where  $H(x) = -x \log_2 x - (1-x) \log_2(1-x)$ .

### 2.2.2 Conditional entropy

The classical correlation  $C(\rho_{AB})$  defined by (30) can be derived by considering projective measurements for the subsystem  $A$ . The general form of the  $SU(2)$  unitary operator, occurring in (29), is

$$U = \exp(\eta\sigma_+ - \bar{\eta}\sigma_-) \exp(i\phi\sigma_3) \quad (37)$$

where  $\eta \in \mathbb{C}$  and  $\phi \in \mathbb{R}$ . This parametrization allows us to express the quantities defined by

$$\langle \sigma_i \rangle_k = \langle k | U^\dagger \sigma_i U | k \rangle, \quad i = 1, 2, 3 \quad \text{and} \quad k = 0, 1$$

as

$$\langle \sigma_3 \rangle_k = (-)^k \frac{1 - \bar{z}z}{1 + \bar{z}z}, \quad \langle \sigma_1 \rangle_k = (-)^k \frac{\bar{z} + z}{1 + \bar{z}z}, \quad \langle \sigma_2 \rangle_k = i(-)^k \frac{\bar{z} - z}{1 + \bar{z}z}$$

It follows that the conditional entropy rewrites as

$$\tilde{S} \equiv \tilde{S}(\theta, \varphi) = \sum_{k=0,1} p_k^B H\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4 \det \rho_k^B}\right). \quad (39)$$

The minimization of  $\tilde{S}$  can be performed over the polar and azimuthal angles. Nevertheless, there exists another elegant way to optimize the conditional entropy. It is based on the Koashi-Winter relation [24] (see also [25, 26, 27]) as we shall explain in what follows.

### 2.2.3 Minimization of conditional entropy

The Koashi-Winter relation establishes the connection between the classical correlation of a bipartite state  $\rho_{AB}$  and the entanglement of formation of its complement  $\rho_{BC}$ . This connection requires the purification of the two rank state  $\rho_{AB}$  which decomposes as

$$\rho_{AB} = \lambda_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \lambda_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \quad (40)$$

where  $\lambda_1$  and  $\lambda_2$  are the eigenvalues of the  $\rho_{AB}$ . Attaching a qubit  $C$  to the bipartite system  $AB$ , we write the purification of  $\rho_{AB}$  as

$$|\psi\rangle = \sqrt{\lambda_1} |\psi_1\rangle \otimes |u_\alpha\rangle + \sqrt{\lambda_2} |\psi_2\rangle \otimes |v_\alpha\rangle \quad (41)$$

such that the whole system  $ABC$  is described by the pure density state  $\rho_{ABC} = |\psi\rangle\langle\psi|$  from which one has the bipartite densities  $\rho_{AB} = \text{Tr}_C \rho_{ABC}$  and  $\rho_{BC} = \text{Tr}_A \rho_{ABC}$ . Suppose now that a von Neumann measurement  $\{M_0, M_1\}$  is performed on qubit  $A$  (here also we need positive operator valued measurement of rank one that is proportional the one dimensional projector). From the viewpoint of the whole system in the pure state  $|\psi\rangle$ , the measurement gives rise to an ensemble for  $\rho_{BC}$  that we denote by

$$\mathcal{E}^{BC} = \{p_k, |\phi_k^{BC}\rangle\}$$

where

$$p_k = \langle\psi| M_k \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} |\psi\rangle \quad |\phi_k^{BC}\rangle\langle\phi_k^{BC}| = \frac{1}{p_k} \text{Tr}_A \left[ (M_k \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I}) |\psi\rangle\langle\psi| \right].$$

On the other hand, from the viewpoint of the state  $\rho_{AB}$ , the von Neumann measurement on  $A$  gives rise to the ensemble for  $\rho_B$  defined previously as  $\mathcal{E}^B = \{p_k^B, \rho_k^B\}$ . It is simple to check that the ensemble  $\mathcal{E}^B$  can be induced from  $\mathcal{E}^{BC}$  by tracing out the qubit  $C$ , namely

$$\rho_k^B = \text{Tr}_C \left[ |\phi_k^{BC}\rangle\langle\phi_k^{BC}| \right].$$

We denote by  $E(|\phi_k^{BC}\rangle)$  the measure of entanglement for pure states. It is given by the von Neumann entropy of the reduced subsystem  $\rho_k^B = \text{Tr}_C(|\phi_k^{BC}\rangle\langle\phi_k^{BC}|)$

$$E(|\phi_k^{BC}\rangle) = S(\rho_k^B).$$

It follows that the average of entanglement of formation over the ensemble  $\mathcal{E}^{BC}$

$$\bar{E}^{BC} = \sum_{k=0,1} p_k E(|\phi_k^{BC}\rangle)$$

coincides with the conditional entropy (31). According to Koashi-Winter relation [24], the entanglement of formation of  $\rho_{BC}$  is the minimal value of the conditional entropy

$$\tilde{S}_{\min} = E(\rho^{BC}). \quad (42)$$

and one obtains

$$\tilde{S}_{\min} = E(\rho^{BC}) = H\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - |C(\rho^{BC})|^2}\right) \quad (43)$$

where  $C(\rho_{BC})$  is the concurrence of the state  $\rho^{BC}$ .

The conditional entropy given by (43) is reached for  $\theta = \pi/2$  and  $\varphi = 0$ . This result can be verified using the equation (39).

### 2.3 Geometric quantum discord

The computability of quantum discord based on von Neumann entropy is in general a very complex task. Indeed, it has been proven that computing entropic quantum discord is NP-complete and only partial results were obtained for some special two-qubit states. To overcome these difficulties, a geometric variant of quantum discord has been proposed in several works by employing Schatten  $p$ -norms. The first geometric measure of quantum discord was formulated in [17] by using the Hilbert-Schmidt norm ( $p = 2$ ). It is defined as the minimal Hilbert-Schmidt distance between a given state  $\rho$  and the closest classical states of the form

$$\chi = \sum_{i=1,2} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \otimes \rho_i \quad (44)$$

when the measurement is performed on the first subsystem. In equation (44),  $p_i$  is a probability distribution,  $\rho_i$  is the marginal density matrix of the second subsystem and  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$  is an arbitrary orthonormal vector set. Despite its ease of computability the geometric discord based on Hilbert-Schmidt distance can increase under local quantum operations on the unmeasured qubit and is not a good quantum correlations indicator. This drawback is due to the lack of the contractivity property that any quantum correlations quantifier should satisfy (see reference [28]). Now, it is well established that the trace norm (Bures norm with  $p = 1$ ) is the only Schatten  $p$ -norm that one can use to deal with the geometric measure of quantum correlations [29] (see also [30, 31]) and the corresponding trace distance quantum discord is defined by

$$D_T(\rho) = \frac{1}{2} \min_{\chi \in \Omega} \|\rho - \chi\|_1, \quad (45)$$

where the trace distance is defined by  $\|\rho - \chi\|_1 = \text{Tr} \sqrt{(\rho - \chi)^\dagger (\rho - \chi)}$ . It measures the distance between the state  $\rho$  and the classical-quantum state  $\chi$  belonging to the set  $\Omega$  of classical-quantum states. A generic state  $\chi \in \Omega$  is of the form  $\chi = \sum_k p_k \Pi_{k,1} \otimes \rho_{k,2}$  where  $\{p_k\}$  is a probability distribution,  $\Pi_{k,1}$  are the orthogonal projector associated with the qubit 1 and  $\rho_{k,2}$  is density matrix associated with the second qubit. For a bipartite quantum system described by a density matrix of  $X$  type

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{23} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{14} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (46)$$

The phase factors  $\frac{\rho_{14}}{|\rho_{14}|} = e^{i\theta_{14}}$  and  $\frac{\rho_{23}}{|\rho_{23}|} = e^{i\theta_{23}}$  of the off diagonal elements can be removed using the local unitary transformations

$$|0\rangle_1 \rightarrow \exp\left(\frac{-i}{2}(\theta_{14} + \theta_{23})\right) |0\rangle_1 \quad |0\rangle_2 \rightarrow \exp\left(\frac{-i}{2}(\theta_{14} - \theta_{23})\right) |0\rangle_2 \quad (47)$$

In this way, the anti-diagonal entries of the density matrix become positive and one gets

$$\rho \rightarrow \tilde{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & |\rho_{14}| \\ 0 & \rho_{22} & |\rho_{23}| & 0 \\ 0 & |\rho_{23}| & \rho_{33} & 0 \\ |\rho_{14}| & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (48)$$

which rewrites in the Fano-Bloch representation as

$$\tilde{\rho} = \sum_{\alpha\beta} R_{\alpha\beta} \sigma_\alpha \otimes \sigma_\beta, \quad (49)$$

where the non vanishing matrix elements  $R_{\alpha\beta}$  are given by

$$\begin{aligned} R_{11} &= 2(|\rho_{23}| + |\rho_{14}|) & R_{22} &= 2(|\rho_{23}| - |\rho_{14}|) & R_{33} &= 1 - 2(\rho_{22} + \rho_{33}) \\ R_{03} &= 2(\rho_{11} + \rho_{33}) - 1 & R_{30} &= 2(\rho_{11} + \rho_{22}) - 1. \end{aligned}$$

The trace distance quantum discord is invariant under local transformations and we have

$$D_T(\rho) = D_T(\tilde{\rho}). \quad (50)$$

By minimizing the quantity (45), the trace distance quantum discord in the state (46) takes the form

$$D_T(\rho) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{R_{11}^2 R_{\max}^2 - R_{22}^2 R_{\min}^2}{R_{\max}^2 - R_{\min}^2 + R_{11}^2 - R_{22}^2}}, \quad (51)$$

where

$$R_{\min}^2 = \min\{R_{11}^2, R_{33}^2\} \quad \text{with} \quad R_{\max}^2 = \max(R_{33}^2, R_{22}^2 + R_{30}^2).$$

The Bell diagonal states constitute a specific instance of two-qubit  $X$  states. In the Fano-Bloch representation, they take the form

$$\rho^{\text{BD}} = \frac{1}{4} \left( I \otimes I + \vec{c} \cdot (\vec{\sigma} \otimes \vec{\sigma}) \right),$$

with  $\vec{c} = \{c_1, c_2, c_3\}$  being a three-dimensional vector with elements satisfying  $0 \leq |c_i| \leq 1$  and  $\vec{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$  denotes the standard Pauli matrices. The trace distance discord (51) reduces to

$$D_T(\rho^{\text{BD}}) = \text{int}\{|c_1|, |c_2|, |c_3|\}, \quad (52)$$

that is the intermediate value for the absolute values of the correlation factors  $c_1$ ,  $c_2$ , and  $c_3$ .

## 2.4 Local quantum uncertainty

Recently, a new measure called local quantum uncertainty has been introduced to investigate the pairwise quantum correlations of discord type in multipartite systems. It has all the desirable properties that every good quantum correlations quantifier should satisfy. It is based on the notion of Skew information introduced by Wigner to determine the uncertainty in the measurement of an observable. The local quantum uncertainty presents the advantage of being analytically computable for any qubit-qudit system [32, 33, 34, 35]. It is interesting to stress that this new quantum correlation quantifier is deeply related to quantum Fisher information which is usually used in the context of quantum metrology. The local quantum uncertainty is a reliable quantifier of quantum correlation in bipartite quantum systems. This is essentially due to its easiness of computability and the fact that it enjoys all necessary properties of being a good quantumness measure. It is zero for classically correlated states and invariant under local unitary operations. We notice that for a two-qubit pure state, the local quantum uncertainty reduces to the linear entropy of entanglement [36] The local quantum uncertainty quantifies the minimal quantum uncertainty in a quantum state due to a measurement of a local observable [36] For a bipartite quantum state  $\rho$ , the local quantum uncertainty is defined as

$$\mathcal{U}(\rho) \equiv \min_{K_1} \mathcal{I}(\rho, K_1 \otimes \mathbb{I}_2), \quad (53)$$

where  $K_1$  is some local observable on the qubit 1,  $\mathbb{I}_2$  is the identity operator acting on the qubit 2 and

$$\mathcal{I}(\rho, K_1 \otimes \mathbb{I}_2) = -\frac{1}{2} \text{Tr}([\sqrt{\rho}, K_1 \otimes \mathbb{I}_2]^2) \quad (54)$$

is the skew information which provides an analytical tool to quantify the information content in the state  $\rho$  with respect to the observable  $K_1$ . This quantity was introduced by Wigner and Yanase to quantify the uncertainty in mixed states. The statistical idea underlying skew information is the Fisher information which plays a central role in the theory of statistical estimation and quantum metrology. The local quantum uncertainty is defined through a minimization procedure over the ensemble of all Hermitian operators acting on the qubit 1. For two qubit systems ( $\frac{1}{2}$ -spin particles), the expression of the local quantum uncertainty is given by [36]

$$\mathcal{U}(\rho) = 1 - \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}, \quad (55)$$

where  $\lambda_1, \lambda_2$  and  $\lambda_3$  are the eigenvalues of the  $3 \times 3$  matrix  $W$  whose matrix elements are defined by

$$\omega_{ij} \equiv \text{Tr}\{\sqrt{\rho}(\sigma_i \otimes \mathbb{I}_2)\sqrt{\rho}(\sigma_j \otimes \mathbb{I}_2)\}, \quad (56)$$

with  $i, j = 1, 2, 3$ .

In this first part of this contribution, we have discussed the concept of relative entropy as a typical measure providing a quantitative ingredient to deal, in a common framework, with the different kind of correlations in multipartite systems. However, the relative entropy formalism presents some technical inconvenience when one needs to determine analytic expressions of correlations. This is mainly due to optimization process required in minimizing the distance between a quantum state and its closest one without the required property. To overcome this problem, and paralleling the definition of geometric discord, the  $p$ -norms ( $p = 1$  and  $p = 2$ ) distance were considered to introduce the geometric variants of total, quantum, classical correlations [20, 21]. The linear formulation of relative entropy provides an unified scheme to quantify the correlation in a bipartite quantum system. Also, it gives the useful tool to get computable expressions and to classify the different correlations in a bipartite quantum system.

### 3 Quantum correlations in quantum metrology

The second part of our contribution concerns quantum metrology which is an emerging field in quantum information science [37, 38, 39, 40]. This discipline allows to achieve high precision measurements that are unattainable with classical laws of physics. During the last decade, different metrology protocols have been theoretically investigated and experimentally implemented to enhance the precision in estimating various parameters (see [40]).

This special interest is mainly motivated by the fact that in quantum metrology the parameter estimation goes beyond the classical limit and in some cases tends to the Heisenberg limit imposed by the laws of quantum mechanics. The quantum metrology originates from the theory of quantum estimation which has been the subject of important investigations during the last 20 years [41, 42, 43]. The key ingredient in quantum metrology is the notion of quantum Fisher information [44] and especially its inverse which depicts the lower bound in statistical estimation of an unknown parameter according to Cramér-Rao theorem [41, 42, 45] Now, it is well established that quantum metrology offers the possibility to surpass the restrictions imposed by classical laws of physics and there is a common belief that the fabrication of sensing devices, based on the quantum mechanical laws of physics, would be a priori possible.

Recently, it has been found that the use of entangled states can provide a better sensitivity in estimating an unknown phase shift. Indeed, if the estimation of a parameter encoded in a unitary transformation (e.g. a phase shift) of probe states involving  $n$  non-entangled qubits, the precision scales as  $\frac{1}{\sqrt{n\nu}}$  where  $\nu$  is the number of repeated measurements which ameliorates the classical scaling given by  $\frac{1}{\sqrt{\nu}}$ . In the presence of  $n$  entangled qubits the optimal scaling rewrites  $\frac{1}{n\sqrt{\nu}}$  enhancing the standard scaling limit by a factor of  $\sqrt{n}$  [38, 39, 40]. In this sense, it is natural to ask if the quantum correlation other than entanglement can ameliorate the precision in metrology protocols. This issue was recently addressed in [36, 46, 47, 48, 52]. In fact, to understand the role of quantum correlation beyond entanglement in a black-box quantum metrology task, a quantum correlation quantifier termed as quantum interferometric power was recently introduced in [46] (see also [48]). This discord-like measure of quantum correlations is defined in term of quantum Fisher information and gives also the precision in an interferometric phase estimation. This adds a new tool to the existing list of quantum correlations quantifiers and offers a promising tool to characterize the quantum correlations in multipartite systems thanks to its reliability and its ease of computability.

In a given estimation protocol, the determination of some unknown parameter can be achieved by measuring a probe system whose quantum state depends on that parameter. Hence, one should first prepare the input state (i.e.  $\rho$ ) which has to be sensitive to the parameter variations. The second step consists in encoding of the information about the unknown parameter (i.e.  $\theta$ ). This encoding can be realized by a unitary evolution (i.e.  $\rho \rightarrow \rho_\theta$ ). The final part of this protocol concerns the measurement of an appropriate observable (i.e.  $H$ ) in the output state (i.e.  $\rho_\theta$ ).

Adopting this picture, we shall examine in this part the role of quantum correlations in quantum phase estimation. We first discuss the notion of the local quantum Fisher information for a generic two-qubit states when the dynamics of the first qubit is governed by a local Hamiltonian. We determine the minimum of the local quantum Fisher information when the first qubit is driven by an arbitrary local Hamiltonian. This analysis is similar to the derivation of the quantum interferometric power. Indeed, the quantum interferometric power is defined by minimizing the quantum Fisher information over all local Hamiltonians. This establishes the role of quantum correlations in enhancing the phase precision in an interferometric setup.

### 3.1 Local quantum Fisher information

The process of estimating the value of an unknown parameter consists in three steps: (i) the preparation of the probe state (input-state), (ii) the interaction of the initialized state with the system (target) encoding the physical quantity to be estimated and finally (iii) the measure of the state (output-state) resulting from the interaction of the input-state and the system. In quantum metrology, the interferometric configuration constitutes one of the most interesting scenarios which are widely used in phase estimation (see for instance [40] and [53]). We assume that the dynamics of the first qubit, in a bipartite system, is governed by the local phase shift transformation  $e^{-i\theta H} \equiv e^{-i\theta H_1 \otimes \mathbb{I}}$  where  $H_1$  is a local Hamiltonian acting on the qubit 1 and  $\mathbb{I}$  denotes the  $2 \times 2$  identity matrix. In this picture, the output states are given by

$$\rho_\theta = e^{-i\theta H} \rho e^{+i\theta H}$$

From the measurement of the observable  $H$  in the output states, the parameter  $\theta$  can be estimated through an (unbiased) estimator  $\hat{\theta}$ . The quantum mechanics imposes the fundamental limit of the variance of the estimator  $\hat{\theta}$ . This is given by the quantum Cramér-Rao bound

$$\text{var } \hat{\theta} \geq \frac{1}{\nu F(\rho, H)}$$

where  $\nu$  is the number of times the estimation protocol is repeated and  $F(\rho, H)$  is the quantum Fisher information. For the parameter dependent states  $\rho_\theta$ , the quantum Fisher information is defined by

$$F(\rho_\theta) \equiv F(\rho, H) = \text{Tr}(\rho_\theta L_\theta^2) \quad (57)$$

where  $L_\theta$  is the symmetric logarithmic derivative determined by the algebraic equation

$$\partial_\theta \rho = \frac{1}{2}(\rho_\theta L_\theta + L_\theta \rho_\theta). \quad (58)$$

It is clear that the spectral decomposition of the density matrix and its derivative with respect to the parameter  $\theta$  provides us with the expression of the quantum Fisher information. The explicit expression of the quantum Fisher information takes the form

$$F(\rho, H) = \sum_{i=1}^4 \lambda_i F(|\psi\rangle_i, H) - 8 \sum_{i \neq j}^4 \frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i + \lambda_j} |\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle|^2 \quad (59)$$

where  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) are the eigenvalues of the density matrix  $\rho$ . The quantity  $F(|\psi\rangle_i, H)$  is expressed in term of the variance of the operator  $H$  on the eigenstate  $|\psi\rangle_i$  as

$$F(|\psi\rangle_i, H) = 4(\Delta H)_{|\psi\rangle_i}^2, \quad (60)$$

where the variance of the Hamiltonian  $H$  is given by  $(\Delta H)_{|\psi\rangle_i}^2 = \langle \psi_i | H^2 | \psi_i \rangle - |\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle|^2$ . The dynamics of the probe state is assumed to be governed by local unitary transformations acting on the first qubit while leaving the second qubit unchanged. The general form of such local Hamiltonians is

$$H_1 = \vec{r} \cdot \vec{\sigma} := r_1 \sigma_1 + r_2 \sigma_2 + r_3 \sigma_3 \quad (61)$$

where  $\vec{r} = (\sin \alpha \cos \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \alpha)$  and the components of  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  are the usual Pauli matrices ( $\sigma_1 = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$ ,  $\sigma_2 = i(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|)$ ,  $\sigma_3 = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$ ).

### 3.2 Quantum interferometric power

To investigate the role of non classical correlations in improving the precision in quantum metrology protocols, we employ quantum interferometric power as quantifier of quantum correlations. It is defined as the minimum of the quantum Fisher information

$$\mathcal{P}(\rho) = \frac{1}{4} \min_{H_1} F(\rho, H_1), \quad (62)$$

where the optimization is performed over all Hamiltonians  $\{H_1\}$  acting on the qubit 1. Since, the quantum interferometric power is defined in term of quantum Fisher information, it is naturally related the degree of precision that a bipartite state  $\rho$  provides to ensure the success of the estimation protocol regardless of the phase direction. The properties of quantum Fisher information confers to quantum interferometric power many interesting properties: (i) non negative, (ii) invariant under local unitary transformations (iii) non increasing under local operations on the second qubit and (iv) asymmetric with respect to the two subsystems (except for symmetric quantum states). The analytical expression of the quantum interferometric power for an arbitrary bipartite quantum system writes

$$\mathcal{P}(\rho) = \lambda_M^{\min}, \quad (63)$$

where  $\lambda_M^{\min}$  is the smallest eigenvalue of the  $3 \times 3$  matrix  $M$  whose elements are defined by

$$M_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k,l: \lambda_k + \lambda_l \neq 0} \frac{(\lambda_k - \lambda_l)^2}{\lambda_k + \lambda_l} \langle \psi_k | \sigma_i \otimes \mathbb{I} | \psi_l \rangle \langle \psi_l | \sigma_j \otimes \mathbb{I} | \psi_k \rangle, \quad (64)$$

with  $\lambda_i$  and  $|\psi_i\rangle$  being respectively the eigenvalues and the eigenvectors of density matrix  $\rho$ .

The quantum interferometric power provides a tool to decide about the degree of quantumness in a bipartite system and plays a prominent role in understanding the role of quantum information in enhancing the parameter precision in quantum metrology protocols [49, 50, 51].

### 3.3 Bounds of local Fisher information

Quantum correlations constitute a resource to enhance the parameter precision bipartite states for unitary parametrization process even in the absence of entanglement. Recently, it has been shown that the local quantum Fisher information is connected to the speed of quantum evolution when the distance between two arbitrary states is measured with the Bures distance [48]. Based on this relation, bounds on the metrology precision can be derived by evaluating the upper and the lower bound of local quantum Fisher information. As by product, it has been found that under a local unitary evolution, the lower bound of speed gives the amount of quantum correlations existing in the bipartite state and coincides with the quantum interferometric power (62). On the other hand, the upper bound of the local quantum Fisher information is interpreted as the maximum achievable speed [48] (see also [36]). It follows that the error in estimating the phase  $\theta$  can be bounded as [48]

$$\frac{1}{F_{\max}(\rho)} \leq \Delta\theta \leq \frac{1}{F_{\min}(\rho)} \quad (65)$$

where

$$F_{\min}(\rho) = \frac{1}{4} \min_{\{H_1\}} F(\rho, H_1), \quad F_{\max}(\rho) = \frac{1}{4} \max_{\{H_1\}} F(\rho, H_1), \quad (66)$$

are the minimal and the maximal amount of local quantum Fisher information over all local observables acting on the qubit 1. The quantity  $F_{\min}(\rho)$  is exactly the interferometric power defined by (62). To write down the expressions of the upper and lower bounds, we optimize the local quantum Fisher information (59) over the variables  $\alpha$  and  $\beta$  parameterizing the orientation of the unit vector  $\vec{\tau}$  (see equation (61)). By setting the derivatives to zero, one finds the solutions  $\vec{\tau} = (1, 0, 0)$ ,  $\vec{\tau} = (0, 1, 0)$  and  $\vec{\tau} = (0, 0, 1)$  associated with the quantum Fisher  $F(\rho, \sigma_1)$ ,  $F(\rho, \sigma_2)$  and  $F(\rho, \sigma_3)$ . Therefore, one gets

$$F_{\min}(\rho) = \frac{1}{4} \min(F(\rho, \sigma_1), F(\rho, \sigma_2), F(\rho, \sigma_3)), \quad F_{\max}(\rho) = \frac{1}{4} \max(F(\rho, \sigma_1), F(\rho, \sigma_2), F(\rho, \sigma_3)). \quad (67)$$

This result can be alternatively derived by optimizing over all local traceless Hamiltonians acting on the first qubit and the bounds of the local quantum Fisher information write

$$F_{\min}(\rho) = 1 - \lambda_W^{\max}, \quad F_{\max}(\rho) = 1 - \lambda_W^{\min}, \quad (68)$$

where  $\lambda_W^{\max}$  and  $\lambda_W^{\min}$  denote respectively the largest and the smallest values of the following quantities

$$W_{ii} = \sum_{m \neq n} \frac{2\lambda_m \lambda_n}{\lambda_m + \lambda_n} \langle m | \sigma_i \otimes \mathbb{I} | n \rangle \langle n | \sigma_i \otimes \mathbb{I} | m \rangle, \quad i = 1, 2, 3, \quad (69)$$

involving the non vanishing eigenvalues of the density matrix  $\rho$  describing the two-qubit system. They can be written also as

$$W_{ii} = 1 - M_{ii} = 1 - \frac{1}{4} F(\rho, \sigma_i), \quad (70)$$

where the matrix elements  $M_{ii}$  are defined by (64).

## 4 Some mathematical aspects of mutually unbiased bases in quantum information

### 4.1 Introducing MUBs

Unitary operator bases in the Hilbert space  $\mathbb{C}^d$  and mutually unbiased bases (MUBs) are of pivotal importance for quantum information and quantum computing as well as for quantum mechanics in general. From a very general point of view, MUBs are closely connected to the principle of complementarity introduced by Bohr in the early days of quantum mechanics. They play an important role in quantum mechanics as for the discrete Wigner function, for the solution of the Mean King problem, for the understanding of the Feynman path integral formalism and potentially for studies of the Weyl-Heisenberg group in connection with quantum optics. MUBs are of central importance in quantum information theory as for instance in quantum state tomography (deciphering an unknown quantum state), quantum cryptography (secure quantum key exchange) and quantum teleportation. Two distinct orthonormal bases of  $\mathbb{C}^d$  are said to be unbiased if and only if the modulus of the inner product of any vector of one basis with any vector of the other one is equal to  $\frac{1}{\sqrt{d}}$ :

**Definition.** Let  $B_a$  and  $B_b$  two distinct orthonormal bases

$$B_a = \{|a\alpha\rangle : \alpha = 0, 1, \dots, d-1\}, \quad B_b = \{|b\beta\rangle : \beta = 0, 1, \dots, d-1\}$$

of the Hilbert space  $\mathbb{C}^d$ . The bases  $B_a$  and  $B_b$  ( $a \neq b$ ) are said to be unbiased if and only if

$$\forall \alpha \in \mathbb{Z}_d, \forall \beta \in \mathbb{Z}_d : |\langle a\alpha | b\beta \rangle| = \frac{1}{\sqrt{d}} \quad (71)$$

where  $\langle | \rangle$  denotes the inner product of  $\mathbb{C}^d$ . The inner product  $\langle a\alpha | b\beta \rangle$  has a modulus independent of  $\alpha$  and  $\beta$ .

There exist numerous ways of constructing sets of MUBs. Most of them are based on discrete Fourier transform over Galois fields and Galois rings, generalized Pauli spin matrices, quantum angular momentum theory, group theoretical methods, discrete phase states and Hadamard matrices. If two unbiased bases undergo the same unitary or anti-unitary transformation, they remain mutually unbiased, i.e., the MUBs are stable under unitary or anti-unitary transformations. The number of MUBs in  $\mathbb{C}^d$  cannot exceed  $d+1$ . The maximum number  $d+1$  of MUBs is attained when  $d$  is a power  $p^m$  ( $m \geq 1$ ) of a prime number  $p$ . In this part, from the Lie algebra  $su(2)$  of we shall derive a formula for a complete set of MUBs in dimension  $p$  with  $p$  prime.

### 4.2 Group-theoretical construction of MUBs

The computational basis  $B_d$  spanned by the vectors  $|n\rangle$  (3) (with  $n = 0, 1, \dots, d-1$ ), can be identified with the basis for the irreducible representation ( $j$ ) of  $SU(2)$

$$B_{2j+1} = \{|j, m\rangle : m = j, j-1, \dots, -j\} \quad (72)$$

The complete set  $\{J^2, J_z\}$  can be replaced by another complete set of two commuting operators. Here, we consider the set  $\{J^2, v_a\}$ , where the unitary operator  $v_a$  is defined by

$$v_a|j, m\rangle = \begin{cases} |j, -j\rangle & \text{if } m = j \\ \omega^{(j-m)a}|j, m+1\rangle & \text{if } m = j-1, j-2, \dots, -j \end{cases}$$

where  $\omega = e^{i\frac{2\pi}{2j+1}}$  is a primitive  $(2j+1)$ -th root of unity and  $a$  is a fixed parameter in the ring  $\mathbb{Z}_{2j+1}$ . The operator  $v_a$  comes from the polar decomposition of the  $SU(2)$  generators  $J_{\pm}$ . For fixed  $a$ , the common eigenvectors of  $J^2$  and  $v_a$  provide an alternative basis to the states  $|j, m\rangle$ . Indeed, we have the following result:

**Proposition.** For fixed  $j$  and  $a$  (with  $2j \in \mathbb{N}^*$  and  $a \in \mathbb{Z}_{2j+1}$ ), the  $2j+1$  common eigenvectors of  $J^2$  and  $v_a$  can be taken in the form

$$|j\alpha; a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m=-j}^j \omega^{\frac{1}{2}(j+m)(j-m+1)a+(j+m)\alpha} |j, m\rangle.$$

The states  $|j\alpha; a\rangle$  satisfy (i)  $v_a|j\alpha; a\rangle = \omega^{j\alpha-a}|j\alpha; a\rangle$  with  $\alpha = 0, 1, \dots, 2j$  and (ii) the ortho-normalisation condition  $\langle j\alpha; a | j\beta; a\rangle = \delta_{\alpha,\beta}$ , ( $\alpha, \beta = 0, 1, \dots, 2j$ ). This property shows that for fixed  $j$  and  $a$ ,  $B_a = \{|j\alpha; a\rangle : \alpha = 0, 1, \dots, 2j\}$  is an orthonormal set which provides a nonstandard basis for the irreducible representation  $(j)$  of  $SU(2)$ . For fixed  $j$ , there exists  $2j+1$  orthonormal bases  $B_a$  since  $a$  can take  $2j+1$  distinct values ( $a = 0, 1, \dots, 2j$ ). By adopting the notation  $|a\alpha\rangle = |j\alpha; a\rangle$  together with the change (3), the eigenvectors of  $v_a$  can be written as

$$|a\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{n \in \mathbb{Z}_d} \omega^{\frac{1}{2}(n+1)(d-n-1)a-(n+1)\alpha} |n\rangle$$

where  $\omega = e^{i\frac{2\pi}{d}}$ . For fixed  $d$  and  $a$ , each eigenvector  $|a\alpha\rangle$  is a linear combination of the qudits  $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |d-1\rangle$  and the basis

$$B_a = \{|a\alpha\rangle : \alpha = 0, 1, \dots, d-1\}$$

is an alternative to the computational basis  $B_d$ . For fixed  $d$ , we therefore have  $d+1$  remarkable bases of the  $d$ -dimensional space  $\mathbb{C}^d$ , namely,  $B_d$  and  $B_a$  for  $a = 0, 1, \dots, d-1$ .

The matrix  $V_a$ , representing the operators  $v_a$ , can be diagonalized by means of the  $d$ -dimensional matrix  $H_a$  of elements

$$(H_a)_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{d}} \omega^{\frac{1}{2}(n+1)(d-n-1)a-(n+1)\alpha}$$

with  $n, \alpha = 0, 1, \dots, d-1$ . Note that the complex matrix  $H_a$  is a generalized Hadamard matrix: it is a unitary matrix and the modulus for each entry is equal to  $\frac{1}{\sqrt{d}}$ . This establishes a connection between MUBs and Hadamard matrices (see [54]).

**Proposition.** For  $d = p$ ,  $p$  a prime number, the bases  $B_0, B_1, \dots, B_p$  form a complete set of  $p+1$  MUBs. The  $p^2$  vectors  $|a\alpha\rangle$ , with  $a, \alpha = 0, 1, \dots, p-1$ , of the bases  $B_0, B_1, \dots, B_{p-1}$  are given by a single formula, namely

$$|a\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{n \in \mathbb{F}_p} \omega^{\frac{1}{2}(n+1)(p-n-1)a-(n+1)\alpha} |n\rangle, \quad \omega = e^{i\frac{2\pi}{p}} \quad (73)$$

that gives the  $p$  basis vectors for each basis  $B_a$ .

### 4.3 Multilevel optical system and mutually unbiased bases

Suppose that we are implementing a quantum protocol in which the information exchanged between the sender and the receiver is encoded in the states of a finite optical quantum system as for instance cryptographic key distribution where the quantum carriers are  $d$ -level systems.

#### 4.3.1 Phase operator and Phase states

There are several ways to experimentally realize the multilevel quantum optical systems which are of crucial importance in quantum key distribution (for more details see for instance [55]-[56] and references therein). Following the approach developed in [57, 58], we define now the polar decomposition of raising and lowering stokes operators, the phase states and the MUBs for the  $d$  dimensional optical quantum system under consideration.

To define the phase operator, we introduce the operators  $S_- = S_1 - iS_2$  and  $S_+ = S_1 + iS_2$  in terms of the Stokes observables (4) and the number operators  $N_h = a_h^\dagger a_h^-$  and  $N_v = a_v^\dagger a_v^-$  acting on the Fock states as usual

$$N_h|n_h, n_v\rangle = n_h|n_h, n_v\rangle \quad N_v|n_h, n_v\rangle = n_v|n_h, n_v\rangle. \quad (74)$$

The Fock states are given by

$$|n_h, n_v\rangle = \frac{(a_h^+)^{n_h} (a_v^+)^{n_v}}{\sqrt{n_h!} \sqrt{n_v!}} |0, 0\rangle. \quad (75)$$

Using the two boson Schwinger realization (4), the actions of  $S_-$ ,  $S_+$  and  $S_3$  on the  $d$ -dimensional Hilbert space  $\mathcal{F}$  are given by

$$S_+|n_h, n_v\rangle = \sqrt{n_v(n_h + 1)}|n_h + 1, n_v - 1\rangle, S_-|n_h, n_v\rangle = \sqrt{n_h(n_v + 1)}|n_h - 1, n_v + 1\rangle, S_3|n_h, n_v\rangle = \frac{1}{2}(r$$

It is simply to verify that

$$S_+|d - 1, 0\rangle = 0 \quad S_-|0, d - 1\rangle = 0 \quad (77)$$

The operators  $S_+$  and  $S_-$  can be decomposed as

$$S_- = E_d \sqrt{N_h(N_v + 1)} \quad S_+ = \sqrt{N_h(N_v + 1)} (E_d)^\dagger \quad (78)$$

This polar decomposition of the stokes operators gives a simple way to build unitary phase operators. The operator  $E_d$  acts on  $\mathcal{F}$  as

$$E_d|n_h, n_v\rangle = |n_h - 1, n_v + 1\rangle, \quad (79)$$

for  $n_h = 1, 2, \dots, d - 1$ . For  $n_h = 0$ , we shall assume that  $E_d|0, d - 1\rangle = |d - 1, 0\rangle$  so that (79) is valid modulo  $d$ . The operator  $E_d$  is unitary and the corresponding eigenstates are given by

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{n_h=0}^{d-1} q^{mn} |n_h, d - 1 - n_h\rangle, \quad (80)$$

where  $q := e^{2\pi i/d}$ . The states  $|m\rangle$ , labeled by the parameters  $m \in \mathbb{Z}/d\mathbb{Z}$ , satisfy

$$E_d|m\rangle = e^{i\theta_m}|m\rangle \quad \theta_m = m \frac{2\pi}{d}, \quad (81)$$

which shows that  $E_d$  is indeed a phase operator. It is remarkable that the states  $|m\rangle$  write as a discrete Fourier transform of the basis  $\{|n_h, d-1-n_h\rangle : n_h = 0, 1, \dots, d-1\}$  of the  $d$ -dimensional space  $\mathcal{F}$ .

The states (80) are unbiased to the computational basis  $B_d := \{|n_h, n_v\rangle, n_h + n_v = d-1\}$ . The other remaining mutually unbiased bases can be generated from the evolved states

$$U(t)|n_h, n_v\rangle = e^{iS_+S_-t}|n_h, n_v\rangle = e^{in_h(n_v+1)t}|n_h, n_v\rangle, \quad (82)$$

when  $t := t_p = \frac{p\pi}{d}$  with  $p = 0, 1, 2, \dots, d-1$ . Thus, the states (80) transform as

$$U(t_p)|m\rangle := |p, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{n_h=0}^{d-1} q^{mn_h} q^{n_h(d-n_h)p/2} |n_h, d-1-n_h\rangle. \quad (83)$$

The computational basis  $B_d$  and the bases  $B_p = \{|p, m\rangle\}$  ( $p = 0, 1, 2$ ) are mutually unbiased.

#### 4.4 Weyl pairs and Generalized Pauli matrices

The phase operator discussed in the previous section (79) is the analogue of the operator  $v_a$  (73). They are in relation with the Generalized Pauli matrices which are relevant in quantum computing operations involving qudits. For  $d$  arbitrary, the matrix  $V_a$ , representing  $v_a$ , the operators can be decomposed as

$$V_a = XZ^a, \quad a = 0, 1, \dots, d-1$$

in term of the so-called Weyl pair. The matrices  $X$  and  $Z$  satisfy

$$Z|n\rangle = \omega^n|n\rangle, \quad n = 0, 1, \dots, d-1, \quad X|n\rangle = |n-1\rangle \pmod{d}$$

The linear operators corresponding to the matrices  $X$  and  $Z$  are known in quantum information as flip or shift and clock or phase operators, respectively. The unitary matrices  $X$  and  $Z$  satisfy the relation

$$XZ = \omega ZX \quad X^d = Z^d = I_d$$

where  $I_d$  is the  $d$ -dimensional unity and zero matrices, respectively. The last two equations show that  $X$  and  $Z$  constitute a so-called Weyl pair and generalize the  $\sigma_x$  and  $\sigma_z$  operations which are the two elementary unitary transformations in quantum computing involving qubits ( $d = 2$ ). For  $d$  arbitrary, the *generalized Pauli matrices* in dimension  $d$  are defined by

$$U_{ab} = X^a Z^b, \quad a, b \in \mathbb{Z}_d,$$

and belong to the unitary group  $U(d)$ . They satisfy the trace relation

$$\text{tr} \left( U_{ab}^\dagger U_{a'b'} \right) = d \delta_{a,a'} \delta_{b,b'}$$

Thus, the set  $\{U_{ab} : a, b \in \mathbb{Z}_d\}$  of unitary matrices is an orthogonal set with respect to the Hilbert-Schmidt inner product. Consequently, the  $d^2$  pairwise orthogonal matrices  $U_{ab}$  can be used as a basis of  $\mathbb{C}^{d \times d}$ . For  $d = 2$ , the matrices  $X$  and  $Z$  generate the ordinary Pauli matrices. It is interesting to note that beside their relevance in quantum computing, the generalized Pauli matrices are useful in the context of stabiliser codes based on equi-entangled states and phase states [59, 60].

## 5 Qudits and MUBs in Quantum Key Distribution (QKD)

Quantum Key Distribution (QKD) or Quantum cryptography (QC), provides two legitimate parties (traditionally called Alice and Bob) a secure way of sharing a secret key. The security of QKD is based on fundamental laws of quantum measurements. Every measurement alters the system and therefore any eavesdropper (called by convention Eve) attempting any unwanted measurement can in principle be detected. The first quantum key distribution involving the properties of two level quantum systems is the BB84 protocol proposed by Bennett and Brassard in 1984 [61]. Many different protocols were subsequently proposed, exploiting different additional features of quantum theory, and several experimental works were realized. Hence, In 1991, A. Ekert proposed a novel QKD scheme based on entangled particles and Bell inequality [62]. Since then, Quantum Key Distribution has been proven to be a very useful and reliable technique of key generation for the encryption of sensitive data. To improve the security of quantum communication against any eavesdropping process, QKD schemes based on qubits were generalized to protocols using quantum systems of higher dimension (qudits). In this respect, it was shown in [63, 64] that the encoding information using three complementary bases (six states) provides better security than obtainable with the BB84 protocol which uses only two complementary bases. Cryptographic schemes based on  $d$  level quantum systems with  $M$  mutually unbiased bases were also developed. In this sense, protocol using  $d = 4$  states and  $M = 2$  bases was studied in [65] and the case of  $d = 3$  states and  $M = 4$  bases was presented in [66]. This provided the way to formulate a generalized quantum key distribution involving quantum systems with arbitrary dimension  $d$  and using  $M$  mutually complementary bases [67, 68]. The generalization to an arbitrary  $d$ -dimensional Hilbert space using  $M$  mutually complementary bases [67] allows Alice and Bob a great deal of freedom and offers various advantages, such a higher flux of information compared to the qubit cryptography schemes.

In this section, we shall discuss a quantum key distribution where the information is encoded in qudits, involving mutually unbiased bases and the effect of several eavesdroppers intercept-resend attacks. In this respect, the mutual information between Alice and Bob and between Alice and one of the eavesdroppers. We introduce the notion of quantum error that allows the legitimate parties to detect eavesdroppers intercept-and-resend attacks. The analysis involves : (i) the dimension of the Hilbert space, (ii) the number of mutually unbiased bases from which Alice choose to encode her message and (iii) the number of the eavesdroppers present in the communication channel.

### 5.1 Extended BB84 protocol and the eavesdropping strategy

The BB84 protocol can be extended by encoding the information in  $d$  levels system and using  $M \leq d+1$  mutually unbiased bases. We assume that this generalized protocol is under the attacks of an arbitrary number  $N$  of eavesdropper  $E_1, E_2, \dots, E_N$ . In this situation, Alice selects first randomly one of the  $M$  bases in which she wants to encode her state and second decides which of the  $d$  states to send. In other word she sends randomly  $0, 1, 2, \dots, d-1$ , with equal probability  $1/d$ , to Bob. The symbols  $0, 1, 2, \dots, d-1$  stand for the number of photons polarized horizontally in the state  $|n_h, n_v\rangle$  (each symbol corresponds to a quantum state). Bob measures each sent symbol by selecting at random between the  $M$  bases. Hence, the mutual information between Alice and Bob can be described by a

joint probability  $P(x_A, x_B)$ , where  $x_A = 0, 1, \dots, d-1$  and  $x_B = 0, 1, \dots, d-1$  are random variables representing the photon state prepared by the sender (Alice) and the measurement results obtained by the receiver (Bob). Between them a number  $N$  of eavesdropper  $E_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Each eavesdropper  $E_i$  intercepts, with the probability  $\omega_i$ , the photon state emitted by the eavesdropper  $E_{i-1}$ , measures its number of photon with horizontal polarization, by selecting at random, with probability  $1/M$ , between the  $M$  MUBs and resends it, in its measured state, to the eavesdropper  $E_{i+1}$ . At the place of the non measured photon, with probability  $1 - \omega_i$ , the eavesdropper  $E_i$  send randomly  $0, 1, 2, \dots, d-1$ , with equal probability  $1/d$ , to the eavesdropper  $E_{i+1}$ . In the same way, the eavesdropper  $E_{i+1}$  intercepts, with probability  $\omega_{i+1}$ , the state emitted by the eavesdropper  $E_i$ , measures its number of horizontally polarized photons, by selecting at random, with probability  $1/M$  between the  $M$  MUBs and resend it in its measured state to the eavesdropper  $E_{i+2}$  and so on. We note that the eavesdropper  $E_1$  intercepts the state emitted by Alice with the probability  $1 - \omega_1$  and the eavesdropper  $E_N$  resends the measured state to Bob.

Finally, in order to obtain a secret key, Alice and Bob use an authenticated public channel to estimate the error rate and the maximal quantity of information obtained by the eavesdroppers. However, if the error rate (called the error probability) is greater than a critical value (quantum error) Alice and Bob begin an other prototype to establish an other secret key until they the error rate becomes smaller than the quantum error. Although, the model under consideration is not optimal, it let us to understand how a sequential eavesdropper affects the behavior of the quantum error and the mutual information between the legitimates parties Alice and Bob as a function of their probabilities of attack.

### 5.1.1 The mutual informations

To evaluate the mutual information between Alice and Bob, Alice and the eavesdroppers, the relevant information is the Shannon information of the sifted symbols, i.e., the symbols for which Alice and Bob have used the same bases. This information is measured in bits for simplicity.

Let denote by  $p(x)$  the prior probability for Alice to send the symbol  $x$  and  $p(x|y)$  is the posteriori probability that is the conditional probability of the sending party having sent the symbol  $x$  and the receiver (Bob or Eves) measured the result  $y$ . The mutual information is

$$I_{AY} = \log_2 d - H_{\text{apost}}^d \quad (84)$$

where  $Y$  stands for  $B, E_1, E_2, \dots, E_N$  and the quantity

$$H_{\text{apost}}^d = - \sum_y p(y) \sum_x p(x|y) \log_2 p(x|y) \quad (85)$$

is the aposteriori entropy. The posteriori probability  $p(x|y)$  can be easily evaluated. Indeed, using the symmetry properties of the protocol, ones obtains

$$I_{AY} = \log_2 d + \sum_{n_h=0}^{d-1} p(n_h|0) \log_2 p(n_h|0). \quad (86)$$

Therefore, the direct reconciliation information between Alice and Bob is given by

$$I_{AB} = \log_2 d + P_{AB}(0|0) \log_2(P_{AB}(0|0)) + [1 - P_{AB}(0|0)] \log_2 \left[ \frac{1 - P_{AB}(0|0)}{d-1} \right] \quad (87)$$

where

$$P_{AB}(0|0) = \sum_{k=0}^N a_k(N) \Omega_k(N), \quad (88)$$

with

$$a_k(N) = \frac{1}{M^{N-k}} \left[ 1 + \frac{M-1}{d} \sum_{i=0}^{N-k-1} M^i \right], \quad (89)$$

expressed, in terms of the Fock space dimension  $d$ , the number of MUBs  $M$  and the number of eavesdroppers involved in the protocol. The quantities  $\Omega_k(N)$  occurring in (88) are given by

$$\Omega_k(N) = \omega_1 \omega_2 \cdots \omega_N \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_k} \left[ \frac{1 - \omega_{i_1}}{\omega_{i_1}} \frac{1 - \omega_{i_2}}{\omega_{i_2}} \cdots \frac{1 - \omega_{i_k}}{\omega_{i_k}} \right] \quad (90)$$

for  $k \neq 0$  and  $\Omega_0(N) = \omega_1 \omega_2 \cdots \omega_N$ . The indices  $i_j$  take the values  $1, \dots, N$ . Similarly, using the equation (86), the direct reconciliation information between Alice and the  $m$ th eavesdropper is

$$I_{AE_m} = \log_2 d + P_{AE_m}(0|0) \log_2(P_{AE_m}(0|0)) + [1 - P_{AE_m}(0|0)] \log_2 \left[ \frac{1 - P_{AE_m}(0|0)}{d-1} \right], \quad (91)$$

with

$$P_{AE_m}(0|0) = \frac{1 - \omega_m}{d} + \sum_{k=0}^{m-1} a_k(m) \Omega_k(m). \quad (92)$$

The quantities  $a_k(m)$  and  $\Omega_k(m)$  in (92) are given respectively by the expressions (89) and (90) modulo the substitution of  $N$  by  $m$ . In the particular case, where the eavesdroppers communicate between them and try to intercept the same state with identical probability  $\omega_i = \omega$  for  $i = 1, 2, \dots, N$ , the equation (88) takes the simple form

$$P_{AB}(0|0) = \frac{1}{d} + \frac{d-1}{d} \left[ 1 + \frac{\omega}{M}(1-M) \right]^N \quad (93)$$

and the equation (92) reads

$$P_{AE_m}(0|0) = \frac{1}{d} + \frac{d-1}{d} \frac{\omega}{M} \left[ 1 + \frac{\omega}{M}(1-M) \right]^{m-1} \quad (94)$$

### 5.1.2 The quantum error

The lost information between the honest parties Alice and Bob corresponds to the maximum information intercepted by the entire eavesdroppers. This is given by

$$I_{AE} = \text{Max} \left( I_{AE_1}, I_{AE_2}, \dots, I_{AE_{N-1}}, I_{AE_N} \right). \quad (95)$$

The error rate or the error probability  $P_{\text{err}}$  is given by:

$$P_{\text{err}} = \sum_{x_A, x_B} \left| P_{AB}(x_A/x_B)|_{\omega_i=0} - P_{AB}(x_A/x_B)|_{\omega_i \neq 0} \right| \quad (96)$$

The quantum error  $Q_{\text{err}}$  is the value of the error probability  $P_{\text{err}}$  for which  $I_{AB} = I_{AE}$ . Hence, for  $P_{\text{err}} < Q_{\text{err}}$ ,  $I_{AE} < I_{AB}$ , while for  $P_{\text{err}} > Q_{\text{err}}$ ,  $I_{AE} > I_{AB}$ . A quantum cryptographic scheme is secure when the error probability  $P_{\text{err}}$  is smaller than quantum error  $Q_{\text{err}}$ . At the transition from secured to unsecured phase, they coincide.

## 5.2 The protocol security

In the case of one eavesdropper, three situations where Alice encode her sent data in states of a Hilbert space of dimension  $d < 10$  and using  $M = 2$ ,  $M = 3$  or  $M = 10$  mutually unbiased bases. The computation of the quantum error  $Q_{\text{err}}$  shows that the protocol involving  $M = 2$  bases gives less security and Alice should use three complementary bases to ensure more security. However, for  $d > 10$ ,  $Q_{\text{err}}(M = 10) < Q_{\text{err}}(M = 3)$  and the protocols involving two and three mutually unbiased bases give identical quantum error and provides better security. It follows that the idea according to which the use of all mutually unbiased bases offers better security is not true for higher dimensional systems. The number of complementary bases providing the maximum quantum error is deeply related to the Hilbert space dimension.

It is important to stress that the effect, of many eavesdroppers intercept-resend attacks, on the quantum error and mutual information between Alice and Bob, within the BB84 protocol, corresponds to the case where  $d = 2$  and  $M = 2$ . In this case the quantum error and the transition secured/no secured transition is strongly dependent on the number of the eavesdroppers and their probabilities of intercepting attacks. It must be noticed also that the quantum error increases when many eavesdroppers are involved in the BB84 protocol and the lower value corresponds to a single eavesdropper case.

The case of several eavesdroppers were analysed in detail in [69]. The security of the model is strongly dependent on  $d$  (the dimension of the Hilbert space),  $\omega_i$  ( $1 \leq i \leq N$ , the attack probabilities),  $N$  (the number of eavesdroppers) and  $M$  (the number of mutually unbiased bases).

## 6 Concluding remarks

The field of quantum information is rapidly developing and this has lead to several theoretical as well applied achievements. The interest in this new field of research has stimulated the development of new theoretical methods and experimental tools to implement quantum protocols that exploit the quantum features of microscopic systems. These efforts have involved scientists working in several fields of science, such as theoretical physics, mathematics, computer science, quantum optics, condensed matter physics,  $\dots$ . In this respect, quantum information science has dedicated special attention to studies which are of practical importance to encode information in the quantum states and to employ the properties of single quantum systems in implementing quantum tasks. One may quote for instance atoms and ions in high-finesse cavities and traps, molecules and impurity centers in polymer and crystalline matrices. However, it must be noticed that the implementation of quantum protocols is very challenging due to the rapid decay of superposition states. This process is called decoherence. In implementing a quantum task, the coherence time of quantum states should exceed the time of executing the task. Therefore, to overcome the decoherence effects, one has to find the experimental tools in order to isolate the system from the surroundings. This will preserves the superposition states and increases the coherence time artificially. Such scenario can be realised in optomechanical systems involving optical an mechanical modes in which the information transferred from optical to mechanical degrees of freedom is more resilient against the decoherence effects [70, 71, 72, 73].

## References

- [1] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).
- [2] V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **74** (2002) 197.
- [3] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki and K. Horodecki, *Rev. Mod. Phys.* **81**(2009) 865.
- [4] O. Gühne and G. Tóth, *Phys. Rep.* **474** (2009) 1.
- [5] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80** (2008) 517576.
- [6] K. Modi, A. Brodutch, H. Cable, T. Paterek and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **84** (2012) 1655.
- [7] M. Daoud and M. Kibler, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** (2012) 244036.
- [8] M. Daoud and L. Gouba, *Journal of Mathematical Physics* **58** (2017) 053509.
- [9] M. Daoud and E. H. El Kinani, *Physics Letters A* **375** (2011) 2492.
- [10] L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [11] W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 2245; W.K. Wootters, *Quant. Inf. Comp.* **1** (2001) 27.
- [12] S. Hill and W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 5022.
- [13] M. Daoud, A. Jellal, E. B. Choubabi and E. H. El Kinani, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44** (2011) 325301.
- [14] M. Daoud and E. B. Choubabi, *Optics Communications* 284 (2011) 4535.
- [15] L. Henderson and V. Vedral, *J. Phys. A* **34** (2001) 6899.
- [16] H. Ollivier and W.H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2001) 017901.
- [17] B. Dakic, V. Vedral and C. Brukner, *phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 190502.
- [18] K. Modi, T. Paterek, W. Son, V. Vedral and M. Williamson, *Phys. Rev. Lett.* **104** ( 2010 ) 080501.
- [19] M. Daoud, R. Ahl Laamara and W. Kaydi, *Physics Letters A* **378** (2014) 3501.
- [20] B. Bellomo, R. Lo Franco and G. Compagno, *Phys. Rev. A* 86, 012312 (2012).
- [21] B. Bellomo, G.L. Giorgi, F. Galve, R. Lo Franco, G. Compagno and R. Zambrini, *Phys. Rev. A* **85** (2012) 032104.
- [22] M. Daoud and R. Ahl Laamara, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** (2012) 325302.
- [23] M. Daoud and R. Ahl Laamara, *Int. J. Quantum Inform.* **10** (2012) 1250060.
- [24] M. Koachi and A. Winter, *Phys. Rev. A* 69 (2004) 022309.
- [25] M. Shi, W. Yang, F. Jiang and J. Du, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44** (2011) 415304.
- [26] M. Daoud, R. Ahl Laamara and R. Essaber, *Int. J. Quantum Inform.* 11 (2013) 1350057.
- [27] M. Daoud, R. Ahl Laamara and W. Kaydi, *J. Phys. A: Math. Theor.* **46** (2013) 395302.

- [28] M. Piani, *Phys. Rev. A* **86** (2012) 034101.
- [29] F. M. Paula, Thiago R. de Oliveira and M. S. Sarandy, *Phys. Rev. A* **87** (2013) 064101.
- [30] R. Bromley, M. Cianciaruso and G. Adesso *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 210401.
- [31] F. Ciccarello, T. Tufarelli and V. Giovannetti, *New Journal of Physics* **16** (2014).
- [32] A. Slaoui, M. Daoud and R.A. Laamara, *Quantum Information Processing* **17** (2018) 178.
- [33] A. Slaoui, M.I. Shaukat, M. Daoud and R.A. Laamara, *The European Physical Journal Plus* **133** (2018) 413.
- [34] L Bakmou, A Slaoui, M. Daoud and R.A. Laamara, *Quantum Information Processing*, **18** (2019) 163.
- [35] A Slaoui, L Bakmou, M. Daoud and R.A. Laamara, *Physics Letters A* **383** (19) (2019) 2241-2247.
- [36] D. Girolami, T. Tufarelli, and G. Adesso, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 240402 (2013).
- [37] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone, *Science* **306** (2004) 1330.
- [38] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 010401.
- [39] S. Lloyd, *Science* **321** (2008) 1463.
- [40] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone, *Nature Photo.* **5** (2011) 222.
- [41] C.W. Helstrom, *Quantum Detection and Estimation Theory*, Academic Press, New York, (1976).
- [42] A.S. Holevo, *Probabilistic aspects of quantum theory*, North-Holland, Amsterdam (1982).
- [43] S.L. Braunstein and C. M. Caves, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 3439.
- [44] R.A. Fisher, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **22** (1925) 700 .
- [45] H. Cramer, *Mathematical Methods of Statistics*, Princeton University, Princeton, NJ, (1946).
- [46] D. Girolami, A.M. Souza, V. Giovannetti, T. Tufarelli, J.G. Filgueiras, R.S. Sarthour, D.O. Soares-Pinto, I.S. Oliveira and G. Adesso *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 210401.
- [47] G. Adesso, *Phys. Rev. A* **90** (2014) 022321.
- [48] M.N. Bera, *Role of quantum correlation in metrology beyond standard quantum limit*, *arXiv:1405.5357*.
- [49] H. El Hadfi, Y. Ait Taleb and M. Daoud, *International Journal of Modern Physics B* **31** (2017) 1750052.
- [50] R. Laghmach, H. El Hadfi, B. Maroufi and M. Daoud, *International Journal of Quantum Information* **18** (04)(2020) 2050018.
- [51] L. Bakmou, M. Daoud and R. Ahl Laamara, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **53** (38) (2020) 385301.
- [52] A. Farace, A. De Pasquale, G. Adesso and V. Giovannetti, *New J. Phys.* **18** (2016) 013049.
- [53] M.G.A. Paris, *Int. J. Quant. Inf.* **7** (2009) 125.
- [54] M.R Kibler, *J. Phys. A: Math. Theor.* **41** (2008) 375302; M.R Kibler, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** (2009) 353001.

- [55] A.V. Burlakov, D.N. Klyshko, JETP Letters **69**, 839 (1999).
- [56] A.V. Burlakov, M.V. Chekhova, O.A. Karabutova, D.N. Klyshko and S. P. Kulik, Phys. Rev. A **60**, R4209 (1999).
- [57] M. Daoud and M. Kibler, J. Phys. A: Math. Theor. **43** (2010) 115303.
- [58] M. Daoud and M. Kibler, Phase operators, phase states and vector phase states for  $SU_3$  and  $SU_{2,1}$ , J. Math. Phys. **52** (2011) 082101.
- [59] M. Daoud and M. Mansour, Int. J. Mod. Phys. B **31** (2017) 1750132.
- [60] M Mansour, M. Daoud and L Bouhouch, International Journal of Quantum Information **17** (2019) 1950009.
- [61] C.H. Bennett and G. Brassard in *Proceeding of the IEEE International Conference on Computer, Systems and Signal Processing*, Bangalore, India (IEEE Press, New York,1984).
- [62] A.K. Ekert, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 661 .
- [63] D. Bruß, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 3018.
- [64] H. Bechmann-Pasquinucci and N. Gisin, Phys. Rev. A **59**, 4238 (1999).
- [65] H. Bechmann-Pasquinucci and W. Tittel, Phys. Rev. A **61**, 062308 (2000).
- [66] H. Bechmann-Pasquinucci and A. Peres, [quant-ph/0001083](#).
- [67] M. Bourennane, A. Karlsson and G. Björk, Phys. Rev. A **64**, 012306 (2001).
- [68] N. Cerf, M. Bourennane, A. Karlsson and N. Gisin, Phys. Rev. Lett **88**, 127902 (2002).
- [69] M. Daoud and H. Ez-zahraouy, Physica Scripta **84** 045018 (2011).
- [70] J. El qars, M. Daoud and R. Ahl Laamara, Eur. Phys. J. D (2017) 71: 122
- [71] J. El Qars, M. Daoud and R. Ahl Laamara, Journal of Modern Optics, 1-11 (2018).
- [72] Y. Es-sahely, J. El Qars, M. Daoud and R. Ahl Laamara, International Journal of Quantum Information, **16** (2018) 1850015.
- [73] J. El Qars, M. Daoud and R. Ahl Laamara, Physical Review A **98** (2018) 042115.



## LES DEUX RÉVOLUTIONS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

*Yassine HASSOUNI*

*ESMAR, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat*

La lumière a constitué une problématique pour l'Homme scientifique depuis fort longtemps.

Newton a eu la pensée que la lumière qui passe d'un milieu à un autre plus dense (plus réfringent je dirais) est attirée vers la normale au dioptre séparant les deux milieux selon une loi proche de celle gravitationnelle. Ceci vient du fait qu'on cherchait à lever le défi causé par le phénomène de réfraction de la lumière (loi de Descartes et Snell) quand cette lumière passe par deux milieux différents.

En d'autres termes Newton pensait que cette lumière pourrait se comporter comme des grains d'énergie. Après Plusieurs années grâce aux travaux du Physicien Français Augustin Jean Fresnel et Thomas Young la lumière est décrite selon un modèle obéissant à la théorie dite théorie ondulatoire de la lumière. La définition de la lumière est complétée grâce au grand Physicien Maxwell à travers ses 4 fameuses équations.

La lumière, dans le cadre de la physique classique, est définie comme transversale.

Le début du vingtième siècle a connu la naissance d'une nouvelle théorie; la mécanique quantique. C'est une théorie nécessaire pour décrire le monde de l'infiniment petit.

Le Grand physicien Albert Einstein a signé trois articles en 1905 dont chacun lui a valu un grand renom avant même qu'il soit célèbre. Un de ces articles stipule que la lumière est émise sous forme de quanta, grains d'énergie proportionnelle à la fréquence. Dans sa théorie, la lumière a donc un aspect corpusculaire. La confirmation de cet aspect corpusculaire lui a valu le prix Nobel de la théorie de l'effet photoélectrique en 1922. La lumière est alors composée de grains d'énergie, convenus d'appeler par la suite Photons, et ces photons peuvent entrer en collision avec la matière, précisément avec des électrons.

D'une manière générale, un système physique quantique peut avoir un comportement corpusculaire comme il peut y en avoir un ondulatoire. Cette idée a poussé le grand Physicien De Broglie à introduire la notion de dualité onde-Corpuscule.

C'est une première révolution de la mécanique quantique.

Un autre mystère de la mécanique quantique est apparu après le célèbre Article D'Albert Einstein, Boris Rosen et Podolski 1935, communément appelé argument EPR. L'interprétation autour du phénomène d'intrication qui n'a pas d'équivalent en Physique classique a provoqué un débat qui a duré des décennies entre Bohr et Einstein. Ce dernier n'a pas cessé de croire que la mécanique quantique est juste mais incomplète. Brièvement L'intrication quantique est un phénomène qui lie intimement les propriétés de deux particules, quelle que soit la distance qui les sépare.

Le débat fut tranché en 1982, lorsqu'Alain Aspect réalisa à l'Institut d'Optique d'Orsay une expérience démontrant la réalité physique de l'intrication quantique sur des particules de lumière – les photons.

C'est à des questions liées à la seconde révolution et en particulier les questions autour de l'intrication que s'intéresse plusieurs chercheurs de notre équipe de recherche et ce depuis 2007. Plus de dix thèses ont été soutenues autour de ce sujet. Cette recherche vise à contribuer pour donner un sens plus rigoureux à l'intrication et la question qui se pose est arrivera-t-on à réaliser des expériences qui pourront confirmer quantitativement cette intrication.

Des collaborations avec des centres internationaux autour de ce thème ont été établies, à noter en particulier l'ICTP (International Center of Theoretical Physics) à Trieste en Italie avec lequel notre groupe est désigné «centre Associé». Nous pouvons citer également le Centre Brésilien de recherches en Physique CBPF-Rio De Janeiro, dont la coopération existe depuis 2004 le laboratoire Lumière, Matière et Interfaces de l'Ecole Normale Supérieur de Paris-Saclay, Université Paris-Saclay et «American Society of Beirut».

Des rencontres hautement qualifiées nous ont permis d'avoir des contacts et de collaborer avec de grands physiciens spécialistes de ce domaine. En 2014, nous avons eu l'honneur d'avoir parmi nous le grand physicien Serge Haroche, prix Nobel de Physique quantique 2012. Il s'agissait d'une école et d'un workshop organisés en partenariat avec ICTP-Trieste Italie sur deux semaines à Rabat. Une deuxième édition vient d'être organisée par le même groupe à HOCEIMA Maroc; Mars 2020.

Tout récemment, nous avons réussi à mettre en place une collaboration avec une des équipes du Physicien éminent Alain Aspect. Une doctorante, Youssra Bouassria, de notre équipe est en stage dans ce contexte, à Paris depuis plusieurs mois. Cette collaboration a déjà abouti à deux publications scientifiques communes.

Nous avons également invité Alain Aspect à un Webinaire durant la période de la pandémie Covid-19 pour animer une conférence sur le même thème. Une rencontre sur la même thématique mais en présentiel est aussi envisagée à la faculté des Sciences de Rabat en partenariat avec l'ambassade de France dès la fin de la pandémie.

Il est à signaler que la base de notre piste de recherche est liée à une étude purement théorique des algèbres de Heisenberg. L'algèbre de Heisenberg Généralisée est à l'origine de plusieurs applications en théorie quantique de l'information. On s'intéresse essentiellement à l'étude des protocoles de sécurité basés sur les notions de la mécanique quantique.

## Références

<https://scholar.google.com/citations?hl=fr&user=ej5D7QUAAAAJ>

### Quelques références en 2020

Time evolution and anti-bunching effect of diatomic molecules coherent states

A Belfakir, EMF Curado, Y Hassouni

Annals of Physics, 168331, 2020.

Dyonic objects and tensor network representation

A Belhaj, Y El Maadi, SE Ennadifi, Y Hassouni, MB Sedra

Modern Physics Letters A, 2050336, 2020.

Robustness of deformed catlike states under dissipative decoherence

A Belfakir, A Belhaj, Y Hassouni

Physical Review D 102 (6), 065003, 2020.

Investigation of the noise figure in a degenerate dual-pump phase-sensitive amplifier using a multi-wave model

Y Bouasria, D Chatterjee, W Xie, I Fsaifes, F Goldfarb, Y Hassouni

JOSA B 37 (9), 2745-2754, 2020.

Bidirectional teleportation using Fisher information

C Seida, A El Allati, N Metwally, Y Hassouni

Modern Physics Letters A, 2050272, 2020.

Quantum heat engine based on spin isotropic Heisenberg models with Dzyaloshinskii–Moriya interaction

Y Khlifi, A El Allati, A Salah, Y Hassouni

International Journal of Modern Physics B 34 (21), 2050212, 2020.

Phase-space behavior of physical nonlinear coherent states

M Ziane, A Belfakir, E Díaz-Bautista, M El Baz, Y Hassouni

Physica Scripta 95 (11), 115221, 2020.

Generalized  $su(1, 1)$  algebra and the construction of nonlinear coherent states for Pöschl-Teller potential

A Belfakir, Y Hassouni

Physics Letters A, 126603, 2020.

Construction of coherent states for Morse potential: A  $su(2)$ -like approach

A Belfakir, Y Hassouni, EMF Curado

Physics Letters A, 126553, 2020.

Generalized Heisenberg Algebras: periodicity and finite representation

A Belfakir, Y Hassouni.

Physica Scripta 95 (5), 055208, 2020.

Non-Gaussian states with strong positive partial transpose

A Belfakir, M Ziane, M El Baz, Y Hassouni

The European Physical Journal D 73 (10), 216, 2020.



# GENERAL VIEW ON THE QUANTUM COMPUTER AND CRYPTOGRAPHY

*Abdelmalek AZIZI*<sup>1</sup>, *El Hassane LAAJI*<sup>1</sup>, and *Taoufik SERRAJ*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *ACSA Laboratory, Faculty of Sciences, Oujda,  
Mohammed First University, Morocco  
e.laaji@ump.ac.ma, abdelmalekazizi@yahoo.fr*

<sup>2</sup> *MASI Laboratory, Multidisciplinary Faculty, Nador,  
Mohammed First University, Morocco  
taoufik.serraj@gmail.com*

## 1 Introduction

Cryptography is present in our daily life, it is present when we use E-Government, E-Commerce, Cloud Computing services, and so on. The cryptography is present in the background of all those applications, but are we safe when the quantum computer will be scalable and operational? The response of all the researchers is No. The developments in quantum computers and quantum communications technologies are quick. Soon, the quantum computer will easily break all classical public-key cryptosystems (e.g., RSA, ECDH, and El Gamal) by using quantum algorithms like Shor's algorithm, Grover's algorithm, or other quantum algorithms. Such quantum algorithms can solve the factorization problem, the discrete logarithm, or the brute force search problems in polynomial time [4]. In 2016, D-Wave Canadian company created a quantum computer D-Wave-2X with 1000 Qubits. The company director states that this Quantum computer achieves a level of 100 Million times faster than a classical computer [2].

During the last years, there was an increased interest in post-quantum cryptography, because the enormous challenge of the cryptographic community is to build new post-quantum cryptosystems and or Quantum cryptosystems able to resist quantum computer attacks. Therefore, in 2015 the National Security Agency (NSA) posed the problem seriously, and in 2016 the National Institute of Standards and Technology (NIST) launched an international post-quantum cryptosystem standardization project. In April 2020, the competition reached its third round by selecting seven finalist candidates; they design four of them for the Public Key Encryption (PKE) and Key Exchange Mechanism (KEM) schemes and three for Signature schemes[2]. The NIST experts state "*The third-round finalist public-key encryption and key-establishment algorithms are Classic McEliece, CRYSTALS-KYBER, NTRU, and SABER. The third-round finalists*

for digital signatures are CRYSTALS- DILITHIUM, FALCON, and Rainbow.”. Except for the Classic McEliece and Rainbow, all algorithms are lattice-based schemes, and NIST states in its latest report that ”The structured lattice schemes appear to be the most promising general-purpose algorithms for public-key encryption/KEM and digital signature schemes ”[2].

So, actually we distinguish three cryptographic generations:

- The first generation concerns the classical cryptosystems based on mathematical problems (Factorization, Discrete logarithm ...) like RSA, ECDH, El GAMAL. They will die in the near future.
- The second-generation concerns the post-quantum cryptosystems. They also based on mathematical problems (Lattices based cryptography, Code-Based Cryptography...) [4], But judged able to resist quantum computer attacks (like NTRU, RLWE, McEliece...). This generation will be ready soon.
- The third generation concerns quantum cryptosystems. They are not based on mathematical problems; they are based on Quantum Mechanic theory and its principles (entanglement, no-cloning...), and some QKD(Quantum Key Distribution) [3] protocols like the BB84, BB82, and EPR. This generation will be ready in the far future..

### 1.1 Our research domain:

Cryptographers in our laboratory are working on post-quantum cryptography. Particularly, we focus on lattice-based cryptosystems such NTRU and Ring-LWE which are the important candidates for the NIST post-quantum cryptography standardization project.

The schemes constructed from lattice-based cryptography typically enjoy a worst-case hardness of solving mathematical problems on point lattices in  $\mathbb{R}^n$ . All the public-key cryptosystems are based on a ”One-Way function”, so it is easy to encrypt but it is very hard to decrypt without the right private key. Another argument in favor of lattice-based cryptography is that it is currently not known how to exploit quantum computing to solve standard lattice problems significantly more efficiently than with classical computers.

We cite here some realized works by the **ACSA Laboratory**:

1. We create a new release of NTRU (submitted to NIST) with performance greater by factor up to 100 times compared to NTRU release, which is a candidate for the NIST competition. We used NTT algorithm combined with the Montgomery algorithm for speeding-up the multiplication in the polynomial ring (This work is under process for **Patent filing**);
2. We create a new release of NTRU that uses our own Fast Modular Multiplication Algorithm(FMMA) ( **NTRUrobust Key Exchange**). We got a drastic result by increasing the performance of the cryptographic process by a factor up to 100 times. Our NTRUrobust warrant a high-security level and perfect correctness. This work will be published in *International Journal of Theoretical and Applied Information Technology -ISSN 1817-3195, Volume 98 December 2020 Issues.*

3. We create a new release based on Ring-LWE Lattice-Based scheme using the FMMA algorithm and the NTT algorithm. Our release is about 2 times faster than NewHope (candidate submitted to NIST), *submitted to Journal of Cyber Security and Mobility- ISSN 2245-1439*.
4. We construct a new Fully Homomorphic Encryption (FHE) Protocols over NTRU post-quantum cryptosystem. FHE is a significant field of research, this modern technology allows us to carry out a random computations on cipher-texts without decrypting it. FHE is very useful for protecting the companies sensitive data stored and used in the cloud services. This allows the cloud server to operate over encrypted data without access to the secret key, alone the clients can decrypt data. *The paper is in the writing process*.
5. We developed two new Quantum Attack algorithms over NTRU, namely KA\_ NTRU and PA\_ NTRU inspired by Grover's Algorithm, targeted to find the Private Keys and the Plaintext. This work was published in *proceeding conference EMENA-ISTL 2019 . "Learning and Analytic in Intelligent Systems. Innovation in Information Systems and Technologies to Support Learning Research"*.

## 1.2 Outline

The remainder of this work is organized as follows: Section 2: We give the notations used through this paper, and we recall the necessary background on the Lattice-Based-Cryptography.

Section 3: We give an overview of the NTRU post-quantum cryptosystem;

Section 4: We present our two attacks algorithms KA\_NTRU and PA\_NTRU against NTRU to recover respectively the private keys and the plaintext.

Section 5: We present the principal specification of our attack implementations and our new release NTRU\_Attack implementations.

Section 6: We give a description of the quantum cryptography.

Section 7: We draw conclusions and some topics that may provide interesting research areas.

## 2 PRELIMINARIES

### 2.1 Notations

In the remainder of this paper, we use the following notations:  $\mathbf{R} = \mathbb{Z}[X]/(X^n - 1)$  the polynomial ring with coefficients in  $\mathbb{Z}^n$ ;  $R_q$  the polynomial quotient ring with coefficients in  $\mathbb{Z}/q\mathbb{Z}$ ;  $\|\mathbf{v}\|$  the norm of the vector  $\mathbf{v}$ ;  $\|\mathbf{v}\|_s = \max|v_i|$  the low-norm;  $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots)$  upper-case the elements of  $\mathbf{R}$ ;  $(a, b, \dots)$  lower-case the coefficients of elements of  $\mathbf{R}$ ; the  $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle$  the inner product of  $\mathbf{v}$  and  $\mathbf{u}$ ; we refer to sampUFD (seed) the polynomial sampled according to Uniform Distribution.

We refer to *ternary polynomials*  $T(d_1, d_2) = a(x) \in R$  with the polynomial  $a(x)$  has  $d_1$  coefficients equal to 1;  $d_2$  coefficients equal to  $-1$  and the rest of coefficients equal to 0.

## 2.2 Lattice-Based Cryptography

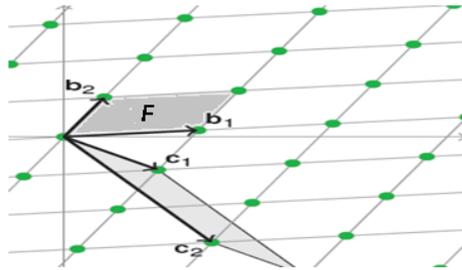
In 1996, Miklos Ajta proved that with the richer algebraic structures, it is possible to construct cryptosystems whose security could be based on the hardness to solve some mathematical problems on lattice points in  $\mathbb{R}^n$ , like Short Vector Problem (SVP), and Closet Vector Problem (CVP), and Short Integer Solutions (SIS). Those problems are at least as hard to solve as a worst-case lattice problem [Cynthia Dwork]. After a time, In 1998, the tree mathematician Jeffrey Hoffstein, Jill Pipher, and Joseph H. Silverman created NTRU cryptosystem, which is based on lattice problems and warrant strong security, right now it is resisted on much cryptanalysis (over 20 years). In 2005, Oded Regev introduced the Learning with Errors problem (LWE) based on worst-case hardness assumptions, and since its first creation they are several improved releases and schemes. In 2010, Craig Gentry created a new scheme inspired from LWE and NTRU called Ring-Learning With Error described in the following sections.

### Mathematical background

*Definition.1 (Lattice):* Let  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \in \mathbb{R}^m$  be a set of linearly independent vectors. The **lattice**  $L$  is a set generated by a basis  $\mathbf{B}(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$  with all coefficients are in  $\mathbb{Z}$ .

$$L_{(B)} = \{a_1\mathbf{e}_1 + \dots + a_n\mathbf{e}_n : a_1, \dots, a_n \in \mathbb{Z}\}. \quad (1)$$

The **dimension** of  $L$  is the vectors number of the basis  $B$ . We obtain a regular mesh of space, like the figure below, the points of the lattice are represented by the small balls. We note that a lattice can be defined by multiple bases as



**Fig. 1.** Presentation of two lattice bases  $B(b_1, b_2)$ ,  $C(c_1, c_2)$  and the fundamental domain  $F$  in  $\mathbb{R}^2$

presented in figure 1, and the definition is as follow:

*Definition.2 (Equivalent Lattices):* We say that two lattices  $L_{(B)}$  and  $L_{(C)}$  are equivalent if and only if there exists a uni-modular matrix  $U \in \mathcal{M}_n(\mathbb{Z})$  such that  $C = B.U$  and  $\det(U) = \pm 1$ . Either lattice  $L_{(B)}$  generated by the basis  $\mathbf{B} = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  and a lattice  $L_{(C)}$  generated by the base  $\mathbf{C} = (\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n) \in$

$\mathbb{R}^{n \times n}$  with  $(a_{11}, \dots, a_{nn}) \in \mathbb{Z}^n$  we have:

$$\begin{cases} \mathbf{e}'_1 = a_{11}\mathbf{e}_1 + \dots + a_{1n}\mathbf{e}_n \\ \vdots \\ \mathbf{e}'_n = a_{n1}\mathbf{e}_1 + \dots + a_{nn}\mathbf{e}_n \end{cases} \quad \text{with } U = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{then } C = B.U \quad (2)$$

In lattice based cryptography, Ajtai and Micancio have suggested the construction of a Good Basis ( $\sim$  orthogonal) to serve as Private Key and a Bad Basis to serve as Public Key. Originally, GGH[9] suggested a method which randomly chooses a set B of short linearly independent vectors to serve as the "Good basis" of Lattice  $L_{(B)}$ , then applies a "random uni-modular transformation" U (having large coefficients) To obtain a "Bad basis"  $C = B.U$  of  $L_{(B)}$ .

**Lattices Problems:** Lattice-Based Cryptography (LBC) is one of the most attractive areas of post-quantum cryptography. It is based on mathematical concepts and theories to encrypt and decrypt, as well as to demonstrate the complexity and the difficulty of breaking those cryptosystems by posing problems hard to solve. The principal lattice problems are SVP and CVP and their approximate versions defined:

*Shortest Vector Problem (SVP)*[9]: Finding (SVP) in Lattice  $L_{(B)}$  is finding a non-zero vector that minimizes the Euclidean norm. Formally, the problem SVP is to find a non-zero vector:

$$\mathbf{v} \in \mathbf{L}_{(B)} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{L}_{(B)} \quad \text{we have} \quad \|\mathbf{v}\| \leq \|\mathbf{x}\|. \quad (3)$$

*The Closest Vector Problem (CVP)*: Given the Lattice  $L_{(B)}$  and a vector  $\mathbf{w} \in \mathbf{R}^m$ , to find a vector  $\mathbf{v} \in \mathbf{L}_{(B)}$  "Closest" to  $\mathbf{w}$  is to find a vector  $\mathbf{v} \in L_{(B)}$  that minimizes the Euclidean norm  $\|\mathbf{w} - \mathbf{v}\|$  where:

$$\|\mathbf{w} - \mathbf{v}\| = \min\{\|\mathbf{w} - \mathbf{v}\| / \mathbf{v} \in \mathbf{L}_{(B)}\}. \quad (4)$$

## 3 NTRU

### 3.1 Overview of NTRU

In 1996, the three mathematicians J. Hofstein, J. Pipher, and J. H. Silverman created NTRU cryptosystem. NTRU is the first cryptosystem that is completely LBC. The authors defined NTRU in the polynomials Ring of the form  $R_q = \mathbb{Z}_q[X]/(X^n + 1)$  or  $R_q = \mathbb{Z}_q[X]/(X^n - 1)$ . NTRU was considered reliable by the IEEE P1363.1 standard, and in April 2011, it was accepted in the X9.98 standard [9].

Since its first creation, they are several improved versions, and the latest NTRU scheme is now a candidate for the NIST post-quantum standardization project. For more detail, the reader can see the author's original document[3] available at the NIST competition website.

### 3.2 NTRUhs Post-Quantum Cryptosystem

In this work, we concentrate on the NTRUhs scheme where the polynomial coefficients of the private keys  $f, g$  and the plaintext  $m$  are codified in  $\{-1, 0, 1\}$  (called ternary polynomials). In this subsection, we tell the leading cryptographic functions of the NTRU cryptosystem. For further details, the reader can see the seminal document [3]. The domain of NTRUhs is the polynomials ring  $\mathbf{R}_q = \mathbb{Z}_q[X]/(X^N - 1)$  [5]. We describe the cryptographic algorithms of NTRU as follows:

**Algorithm.1: Keys Generation:**

**Input :** the Integer parameters  $\{N, q, p\}$  and *seed*.

1.  $f, g \leftarrow \text{sample}(\text{seed})$  ; (with coefficients  $\in \{-1, 0, 1\}$ )
2.  $F_q \leftarrow \text{inverse}(f \pmod{q})$ ;
2.  $F_p \leftarrow \text{inverse}(f \pmod{p})$ ;
3.  $h \leftarrow p * (g.F_q) \pmod{q}$ ;

**Output:** the public key  $h$  and the private key  $F$ .

**Algorithm.2: Encryption:**

**Input:** The public key  $h, m, \text{seed}$  (with  $m_i \in \{-1, 0, 1\}$ ).

1.  $r \leftarrow \text{sample}_r(\text{seed})$  ;
2.  $c \leftarrow r.h + m \pmod{q}$  ;

**Output:** The ciphertext  $c$ .

**Algorithm.3: Decryption:**

**Input:** The private keys  $F, F_p$  and the ciphertext  $c$ .

1.  $M \leftarrow F.c \pmod{q}$  ; with  $M_i \in \{\frac{-q}{2}, \frac{q}{2}\}$
2.  $M \leftarrow M = M.F_p \pmod{p}$  ;

**Output:** The plaintext  $M$ .

## 4 Our Quantum Attack Algorithms

In this paper, we contribute by the cryptanalysis of NTRU. We develop two quantum attack algorithms **KA\_NTRU** and **KA\_NTRU** inspired from Grover algorithm[13]. These attacks aim to break the NTRU cryptosystem by finding the private key and the plaintext when they are codified in ternary polynomials, so their coefficients are in  $\{-1, 0, 1\}$ . An attacker with a quantum computer can use our algorithms by sampling simultaneously the polynomial coefficients of  $f$  and of  $r$  until cracking the system. It is achievable to store all possibilities of polynomial  $f$  and of  $r$  in the quantum registers, and the quantum computer checks simultaneously the assumptions until finding the right values. It depends on the technology development and capability of the quantum computer.

#### 4.1 Quantum Algorithm

The quantum computer can use the quantum algorithm to solve some mathematical problems by modeling the problems in the quantum system and trying to search for the solution. For example, we can solve the factorization problem and discrete logarithm problem in polynomial times in complexity  $O(\sqrt{n})$  of systems in dimension  $n$ .

*Definition 5 (Quantum algorithm):* The information in a quantum computer is in a superposition of states, therefore, the quantum algorithm performs simultaneously multiple treatments. Most quantum algorithms (like Shor's and Grover's algorithms) are defined by three consecutive steps:

1. Creating a configuration in which the amplitude of the system is in any of the  $2^n$  basic states of the system are equals;
2. The Walsh-Hadamard transformation operations (is an example of a generalized class of a Fourier transform) transforms  $N$  qubits initialized with  $(|0\rangle)$  into a superposition of all  $2^n$  orthogonal states expressed in the basis  $(|0\rangle |1\rangle)$  with equal weighting [13].
3. The selective rotation of different states. When a classical algorithm finds an element in a list of  $N$  randomly selected elements with a probability of  $\frac{N}{2}$ , the quantum algorithm of Grover does so with a probability of  $O(N^{\frac{1}{2}})$ .

#### Grover's Algorithm Principle

1. Problem: Search some solutions in an unstructured database ;
2. Classical: Essential problem  $N$  entries  $\rightarrow$  in average  $N/2$  tests;
3. Grover's Quantum algorithm can perform the search in polynomial time with complexity  $O(\sqrt{N})$ . It can speed up all classical algorithms by using a heuristic search.
4. Formulation of the problem:  $N$  elements indexed from  $0$  to  $N-1$ ,  $N = 2^n$ ;  
 $|X\rangle_x$  search register elements repertoires via their index;

The search problem admits  $M$  solutions. The idea of the algorithm is to calculate several solutions and using the previous operators and other quantum properties that allow partial measurements via quantum parallelism [13].

#### 4.2 NTRU assumptions

In this subsection, we recall the NTRU assumption on which we base our attacks.

1. Given the public key  $h$  with  $h = p * g / f \leftarrow$  It is hard to find  $f, g$
2. Given the ciphertext  $c$  with  $c = r * h + m \leftarrow$  It is hard to find  $m$

### 4.3 Our Attacks Algorithms description

**Algorithm 4: *KA\_NTRU*** .

**Input:** the public key  $h$ , the modulus  $q$ , and  $n$

1. *Repeat* :
2.  $f' \leftarrow \text{sampUD}(\text{seed})$  ;
3.  $g' \leftarrow \frac{1}{p}(f' * h) \pmod{q}$ ;
4. *if*  $g'_i = q - 1 \rightarrow g'_i = -1$ ;
5. *Until* :  $g' \in \{-1, 0, 1\}$ ;

**Output :**  $f = f'$  and  $g = g'$ .

**Comment:** For the algorithm.4 *KA\_NTRU* the attacker samples simultaneously the polynomial coefficients of  $f'$  (line 2) and computes  $g' = 1/p(f' * h) \pmod{q}$  (line 3) until the coefficients of  $g'$  are in  $\{-1,0,1\}$  (line 5) and then he finds the private keys  $f = f'$  and  $g = g'$  . We note that if a coefficient polynomial equal to  $q - 1$  we must replace it by  $(-1)$  because  $-1 \pmod{q} = q - 1$  as in (line 4).

**Algorithm 5: *PA\_NTRU*** .

**Input:** the public key  $c$ , the modulus  $q$ , and  $n$ .

1. *Repeat* :
2.  $r \leftarrow \text{sampUFD}(\text{seed})$  ;
3.  $c' \leftarrow p * r * h \pmod{q}$ ;
4.  $M' \leftarrow c - c' \pmod{q}$ ;
5. *if*  $M'_i = q - 1 \rightarrow M'_i = -1$ ;
6. *Until* :  $M' \in \{-1, 0, 1\}$

**Output :** The plaintext  $M = M'$ .

**Comment:** the same for the algorithm.5 *PA\_NTRU*, the attacker samples simultaneously the polynomial coefficients of  $r$ (line 2) and computes a polynomial  $c' = p.r * h \pmod{q}$  as in line 4 and computes a  $M' = c - c' \pmod{q}$  (line 5) until the coefficients of polynomials  $M'$  are in  $\{-1,0,1\}$  as in line 6, then he finds the plaintext  $M = M'$ . We known that if a coefficient polynomial equal to  $q - 1$  we must replace it by  $(-1)$  because  $-1 \pmod{q} = q - 1$  as in (line 5).

## 5 Implementations

Our implementation of *KA\_NTRU* algorithm and *PA\_NTRU* algorithm and our *NTRU\_Attacks* were implemented on C++ and performed in PC-TOSHIBA -Satellite, Processor Intel, Core™i7 -2630QM CPU, 2GHz, RAM 8 GO, under Windows 7-32 bits platform and Dev-C++ 4.9.9.2. development environment. For *NTRU\_Attacks* we keep all the reference implementation functions of *NTRU*, with few modifications [19]. For testing the *KA\_NTRU* and *PA\_NTRU* attack algorithms, we integrate their implementation functions in *NTRU\_Attacks* as follows:

- The program performs the keys generation function and encryption function and checks the decryption function;
- The  $KA\_NTRU(.)$  function receives the public key  $h$  and returns the private keys  $f, g$ ;
- The  $PA\_NTRU(.)$  function receives the ciphertext  $c$  and returns the plain text  $m$ .

### 5.1 Result

In this subsection, we present the result got by using our  $NTRU\_attacks$  release implementation. Unfortunately, we don't have a quantum computer, then we are going to try our algorithms in a classical computer with small parameters just for knowing the attacks' performance. The algorithms generate ternary polynomials with parameters  $d$  the number of coefficients in ternary polynomial equal to (1) and equal to (-1) chosen respectively in  $\{2,3,4,5,6\}$ , the dimension  $n$  chosen respectively in  $\{7,11,13,17,19\}$  and we chose also small modulus  $q = 127$ . In the **table1** we give the cost of the  $KA\_NTRU$  attack to find the private keys, and in the **table2** we give the cost of  $PA\_NTRU$  attack to find the plaintext.

**Table 1.** Cost of  $KA\_NTRU$  attack against  $NTRU$

Attacks	n:7	n:11	n:13	n:17	n:19
Times(ms)	46	69	$4,7 \cdot 10^3$	$98 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^6$
Operations	346	690	$95 \cdot 10^3$	$2,3 \cdot 10^6$	$5,6 \cdot 10^6$

**Table 2.** Cost of  $PA\_NTRU$  attack against  $NTRU$

Attacks	n:7	n:11	n:13	n:17	n:19
Times(ms)	5	$1,5 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^3$	$29 \cdot 10^3$	$51 \cdot 10^3$
Operations	54	$35 \cdot 10^3$	$65 \cdot 10^3$	$662 \cdot 10^3$	$10^6$

Note: All source implementations of those attacks are available on the website at the link [21].

## 6 Quantum Cryptography

It is based on Quantum Mechanic theory (not cloning, superposition...), and Quantum Key Distribution(QKD) protocols. In 1984 Bennett and Brassara create

BB84 protocol based on QKD. It uses rectilinear  $\oplus$  and diagonal  $\otimes$  bases to pass data from the sender **A** to the receiver **B** over quantum channel. Therefore, we cannot measure a quantum system without disturbing it. It is a consequence of the principle of quantum uncertainty. If a spy tries to measure a photon, it will disrupt the bit at the end of the line. Thus, any information gained by the spy disrupts the line, which allows the protagonists to measure the error rate, and to deduct from it "the spy gathered how much information". Thus, recognitions to the BB84 algorithm, we can get rid of the bits likely to be spied on. The

A's bits	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	1
A's bases	$\otimes$	$\oplus$	$\otimes$	$\otimes$	$\otimes$	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$	$\otimes$	$\otimes$	$\otimes$	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$
A's polarizations	$\nearrow$	$\uparrow$	$\nearrow$	$\searrow$	$\searrow$	$\rightarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\searrow$	$\searrow$	$\searrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\rightarrow$
B's bases	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$	$\otimes$	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$	$\oplus$	$\otimes$	$\oplus$	$\otimes$	$\oplus$	$\otimes$
B's measurements	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\searrow$	$\uparrow$	$\rightarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\rightarrow$	$\searrow$	$\rightarrow$	$\searrow$	$\uparrow$	$\nearrow$
B's bits	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	1	0	0	1
Comparison of bases	$\neq$	$=$	$\neq$	$=$	$\neq$	$=$	$=$	$=$	$\neq$	$=$	$\neq$	$\neq$	$=$	$\neq$
Shared secret bits		0		0		1	0	0		0			0	1

Fig. 2. BB84 Protocol QKD

Principle of this quantum cryptosystem is as follow:

1. Alice prepares a series of photons with random polarizations with basis  $\oplus\{0, 90\}$  degrees and diagonal  $\otimes\{45, 135\}$  degrees. And she sends these photons to Bob over the quantum channel;
2. Bob generates randomly his basis polarization and measures the photons. If he measures is 0 or 45 he records a 1 else, if he measures 90 or 135 he records a 0.
3. Alice and Bob exchange their polarization bases over a normal insecure classical channel;
4. The shared secret key is represented by the bits with compatible polarization of both bases.
5. Finally, Alice and Bob perform error-correcting and check to see if an attacker (Eve) was listening

**(If an attacker tries to measure the photon state, he disturbs its state).**

## 7 Conclusion

The evolutions in quantum computer sciences are quick, whereas the choice of post-quantum cryptosystems for standardization is still in the NIST process to prepare for a smooth migration of classical cryptosystems to post-quantum cryptosystems. A lot of researchers think that: **“Only Quantum Cryptography will resist Quantum computer Attacks.”**

The problem of Quantum cryptography is that the users exchange both bases

over the classical channel. And the question is “Is it possible to construct a measurement apparatus that not disturb the photon state?” We continue our work on the cryptanalysis and improvement of the post-quantum cryptosystems. Our goal is to contribute with the cryptographic community to build more secure and efficient cryptosystems to ensure data confidentiality and users’ privacy by learning from the best actual practices and innovate alternative methods.

#### Works in-process and future works:

1. Combination of Quantum Key Distribution with NTRU Post-quantum Cryptosystem (We will use NTRU for a classical channel);
2. NTRU Fully Homomorphic Encryption Protocol applied to the bank systems.

## References

1. Christine van Vredendaal. Available at "[http://photon.physnet.uni-hamburg.de/fileadmin/user\\_upload/ILP](http://photon.physnet.uni-hamburg.de/fileadmin/user_upload/ILP)".
2. Lily Chen, Stephen Jordan, Yi-Kai Liu, Dustin Moody, Rene Peralta, Ray Perlner, Daniel Smith "NISTIR 8105- Report on post-quantum cryptography", Tone –Avril 2016.
3. Cong Chen, Oussama Danba, Jeffrey Hofstein, Andreas Hülsing, Joost Rijneveld, John Schanck, Peter Schwabe, William Whyte, Zhenfei Zhang "Algorithm Specifications And Supporting Documentation" March 30, 2019.
4. Cong chen, Oussama Danba, Jeffrey Hoffstein, Andreas Hülsing, Joost Rijneveld, John Schanck, Peter Schwabe, William Whyte, Zhenfei Zhang "NIST PQ submission: NTRUencrypt a lattice-based encryption algorithm", Brown University and Onboard security Wilmington USA.
5. Jeff Hofstein, Jill Pipher, John M. Schanck, Joseph Silverman, William Whyte, and Zhenfei Zhang, "Choosing Parameters for NTRUencrypt", Brouwn University USA, Security Innovation Wilmington USA.
6. Martin Albrecht, Amit Deo and Kenneth Paterson, "Cold boot attacks on ring and module LWE Keys under the NTT", Royal Holloway, University of London.
7. Zhe Liu, "FourQ2 on embedded devices with strong countermeasures against side-channel attacks" University of Waterloo, Canada.
8. Scott Fluhrer, "Quantum cryptanalysis of NTRU- cisco systems", July 5, 2015
9. Jeffrey Hofstein, Jill Pipher, and Joseph Silverman, "Introduction Mathematics and Cryptography, NTRU", 1998
10. Michael Hartmann, "Ajtai-Dwork cryptosystem and other cryptosystems based on lattices". Universite de Zurich, 29 October 2015
11. Daniele Micciancio, Oded Regev, "Lattice-based cryptography", July 22, 2008
12. Dupont Fleury. "Probabilités". Vibert prépa, pp 44 – 45. mars 1986
13. Colin P. Williams, "Grover Algorithm Explorations in Quantum Computing", Springer 2011
14. Martin Albrecht, Benjamin Curtis, Amit Deo, alex Davidson, Rachel Player, "Estimate all the fLWE, NTRU schemes", Version: May 2, 2018
15. Chris Peikert, "Lattice cryptography for the Internet", July 16, 2014
16. Yuanmi Chen and Phong Nguyen. BKZ 2.0, "Better lattice security estimates", ENS Paris, 2017.



# QUANTUM ENTANGLEMENT VERSUS CORRELATION CHARGE AND CORRELATION SPIN IN N-QUBITS SYSTEM

*Yahia BOUGHALEB*<sup>1,2,\*</sup>, *S. HARIR*<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> *Laboratory of Bio-Geosciences and Materials Engineering, Ecole Normale Supérieure, Hassan II University, Casablanca, Morocco.*

<sup>2</sup> *LPMC Laboratory, Chouaib Doukkali University, El jadida, Morocco.*

<sup>3</sup> *Department of Physics and Chemistry, CRMEF Casablanca – Settat, Morocco.*

## Abstract

Quantum entanglement is an essential ingredient for development of quantum information processing. In this regard, we have extensively studied the local entanglement in the 1D Extended Hubbard Model (EHM), characterized by on-site coulomb interaction energy  $U$ , off-site coulomb interaction energy  $V$  and exchange spin-spin interaction  $\gamma J$ , where  $\gamma$  is the anisotropy parameter. First, the obtained results show that 1D EHM model exhibit CDW- SDW transition characterized by the coexistence of Charge Density Wave (CDW) and Spin Density Wave (SDW). This allowed us to investigate the conditions for maximizing quantum entanglement by studying its behaviour in the charge phase and the spin phase separately.

In charge phase, the quantum entanglement reaches its maximum value for an optimal interatomic distance that checks the condition  $U = 2V$ . Moreover, in spin phase the quantum entanglement is important for one-dimensional spin-spin interaction ( $\gamma = 1$ ) without any external magnetic field.

## 1. Introduction

The integration of quantum phenomenon in information processing field becomes an extraordinary resource for technological innovations, such as quantum teleportation [1,2], quantum computing [3] and quantum cryptography [4-7]. In this context, the quantum entanglement is considered as a valuable parameter in quantum communication. Initially, the Quantum entanglement notion was introduced by Schrodinger [8]. Few years later, the non-classical features of entanglement have been renewed a regain of interest after the work of Einstein, Podolsky and Rosen (EPR) [9]. While initially the discussion about quantum entanglement was motivated by conceptual and philosophical considerations, recently the focus has shifted to their practical aspects and applications. In the last two decades, quantum entanglement represents an important quantum phenomenon for quantum technologies [10-12], where, it constitutes an essential ingredient for development of computation architectures.

In classical processor, the information processing is insured by bits manipulating characterized by two states  $|0\rangle$  and  $|1\rangle$ . However, a quantum calculator uses qubits whose values can be  $|0\rangle$  and  $|1\rangle$  simultaneously. The simultaneous values allow quantum calculator to perform parallel computations, a property that is fundamental to quantum computing. Thus, the superposition principle of quantum states gives robust processor for quantum processing and quantum memory. For instance, a quantum calculator with 100 qubits has a storage capacity of  $10^{19}$  information, where it is able to treat, simultaneously,  $2^{100}$  information. The actual calculators are systems of 16 qubits, generally, these qubits are fermions of 1/2 spin. Thus, the superposition of quantum states up and down ensures the existence of a quantum calculator which able to treat, simultaneously,  $2^{16}$  information. Moreover, if one takes into account the entanglement between quantum states, the capacity of execution becomes more important.

The connection between quantum information theory and condensed matter physics has been the subject of many studies [13]. Particularly, the quantum entanglement in one-dimensional Extended Hubbard Model attracts special

attention for describing nonlocal correlations and quantum critical phenomena in quantum systems [14-16]. In second quantification, the Hubbard model describes the competition between electronic kinetic and electron-electron interaction [17]. Despite the apparent simplicity of Hubbard model, it displays many features that are close to real properties of quantum systems with electron-electron correlations. For instance, an analytical diagonalization of two-dimensional Extended Hubbard Model with off-site interaction electron-electron allows us to show that this long-range interactions can significantly influence the emergence of conductor - insulator transition [18]. Moreover, an exact diagonalization for finite square lattice of two-dimensional Extended Hubbard Model with spin-spin interaction shows the existence of competition between Spin Density Wave (SDW) and Charge Density Wave (CDW) with the possibility to have a phase transition CDW – SDW at a critical value  $V_C$  [19].

To verify whether one-dimensional Hubbard model can exhibits CDW-SDW separation, we propose to analyse the behaviour of quantum entanglement of  $N$  qubits system as a function of correlation charge and spin correlation modelled by an extended version of the Hubbard model which takes into account the spin-spin interaction parameterized by exchange interaction  $J$ . On the other hand, a very important part of this paper aims to examine the conditions for maximizing quantum entanglement in favour of improving the performance and memory of a quantum computer based on fermions.

## 2. Model and Formalism

We consider a system of  $N$  fermion spin 1/2 distributed in a one-dimensional chain:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \sigma'} V_{i,j} n_{i,\sigma} n_{j,\sigma'} + H_s$$

The first term of this Hamiltonian describes the kinetic energy of electrons, where each electron has a possibility of hopping to nearest neighbour sites with kinetic term  $t$ .  $c_{i,\sigma}^+$  and  $c_{j,\sigma}$  are creation and annihilation operators, respectively, of fermion with spin  $\sigma$  at lattice site  $i$ . The second term represents on-site interaction, where  $n_{i,\sigma}$  is the number operator of fermion with spin  $\sigma$  at lattice site  $i$ . Whereas, the third term takes into account off-site interaction between two fermions of nearest neighbour sites, where  $\langle i, j \rangle$  runs over nearest neighbor sites. On-site and off-site interactions are parameterized, respectively, by the energies  $U$  and  $V_{ij}$ . The energy  $V_{ij}$  decreases with interatomic distance  $R_{ij}$  where  $V_{ij} \sim \frac{1}{R_{ij}}$ .

The Hamiltonian  $H_S$  describes spin-spin interaction with

$$H_S = -J_x \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^y S_j^y - B \sum_i S_i^z$$

The first and second term of  $H_S$  represents, respectively, spin-spin interaction following x and y-axis, where  $S^a$  ( $a = x, y$ ) are the Pauli matrices.  $J_x$  and  $J_y$  are the exchange interaction between neighbor spins. The last term describes the interaction between spins and the magnetic field that tends to align the moments in its direction.

Many theoretical and experimental studies have argued that spin-charge separation occurs in the 1D Extended Hubbard Model. According to the theory of a Tomonaga-Luttinger liquid, in a one-dimensional (1D) system of interacting electrons at low energies, excitations of spin and those of charge travel independently [20-21]. Very recently, experimental results show that spin-charge separation persists even beyond the low-energy regime in an electrostatically gated 1D system. Thus, it is interesting to study the behavior of quantum entanglement in charge phase and spin charge separately.

In charge phase, the spin density takes the form [22]:

$$\rho_j = z|0\rangle\langle 0| + u^+|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + u^-|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + w|\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow|$$

where

$$\begin{aligned} w &= \langle n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} \rangle = Tr(n_{j\uparrow}n_{j\downarrow}\rho_j) \quad ; \\ u^+ &= \langle n_{\uparrow} \rangle - w \quad ; \quad u^- = \langle n_{\downarrow} \rangle - w \quad ; \\ z &= 1 - u^+ - u^- - w \end{aligned}$$

Thus, the quantum entanglement of 1D Extended Hubbard Model in charge phase is giving by the following equation:

$$E_v = -z \log_2 z - u^+ \log_2 u^+ - u^- \log_2 u^- - w \log_2 w$$

Whereas in spin phase, the quantum entanglement is [23]:

$$E_v = -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x); \quad x = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1-C^2}$$

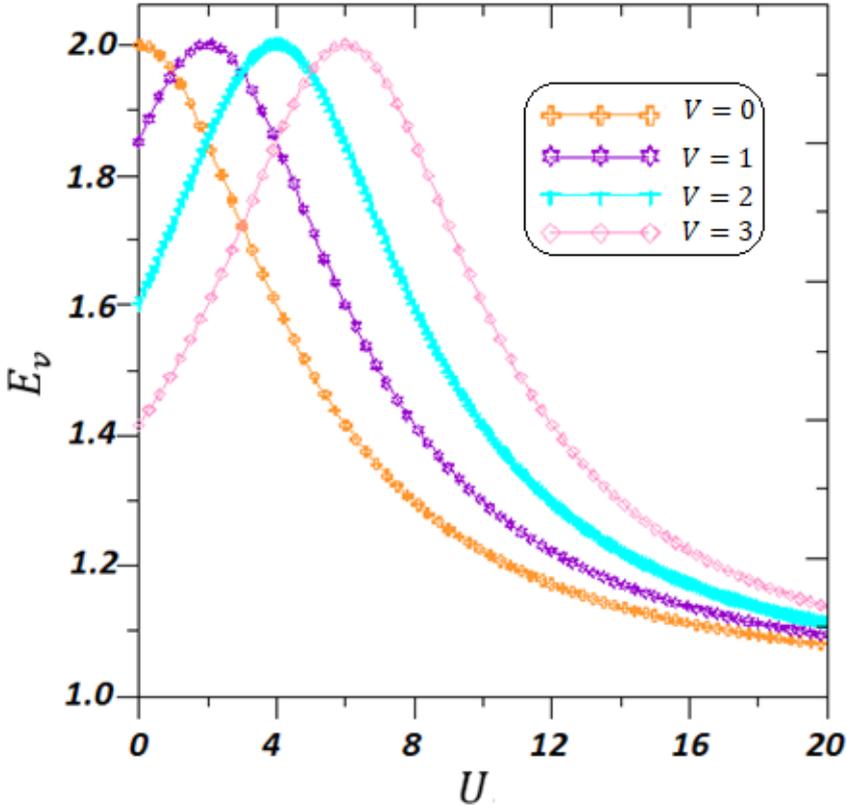
$C$  represents the concurrence which can be calculated as follows:

$$C(\rho) = \max[0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4]$$

where  $\lambda_i$  are the eigenvalues in decreasing order of the Hermitian matrix.

### 3. Results and discussion

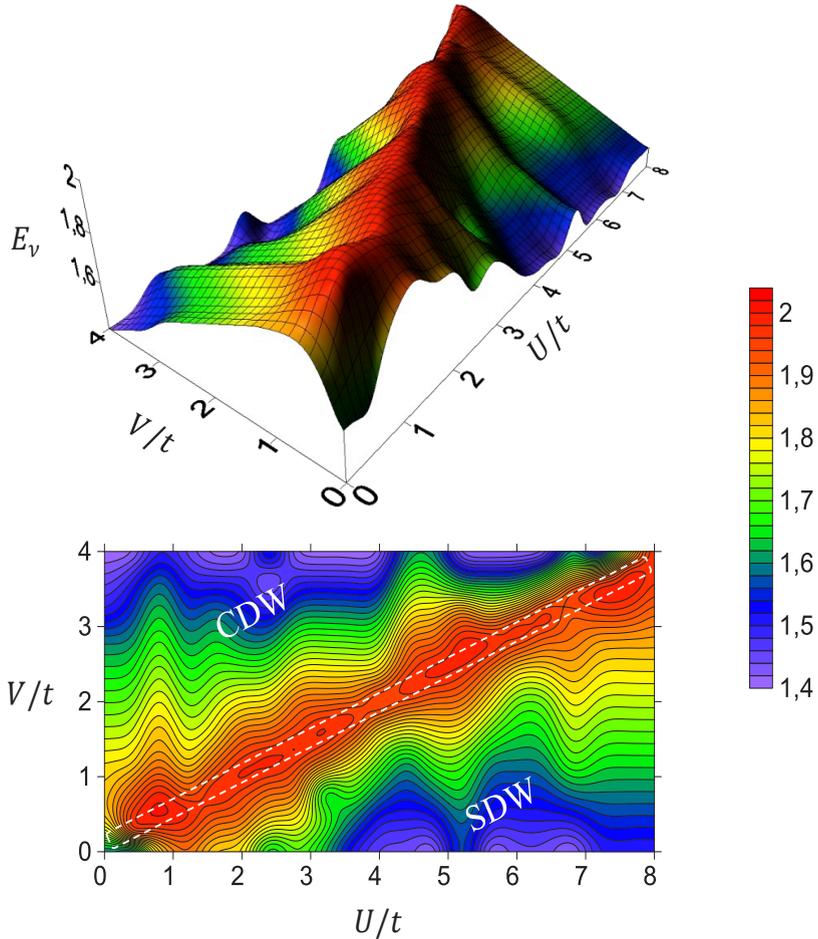
First, to study the effect of long-range interactions on quantum entanglement in the absence of external magnetic field, we plot in Fig. 1 the variations of quantum entanglement  $E_v$  as a function of  $U$  for different values of  $V$ .



**Figure 1** : Quantum entanglement  $E_v$  in the extended Hubbard model as a function of  $U$  for different values of  $V$

The obtained results show that the repulsive Hubbard model can predict the existence of quantum phase transition. Since, for correlated fermions with long-range interactions ( $V \neq 0$ ),  $E_v$  reaches its maximum value at critical point  $U_c \neq 0$ . For instance, in a fermions system governed by on-site interaction energy  $U/t = 2$ , the quantum entanglement is maximum at optimal off-site interaction energy  $V/t = 1$ , which can be achieved by adjusting the inter-site distance. This can be useful in quantum information processing where entanglement plays an important role to have a robust quantum computer.

In order to show the relation between  $U_c$  and  $V$ , the curved surface of  $E_v$ 's dependence on  $(U, V)$  and the corresponding contour map in the  $E_v = 0$  plane are shown in Fig. 2.



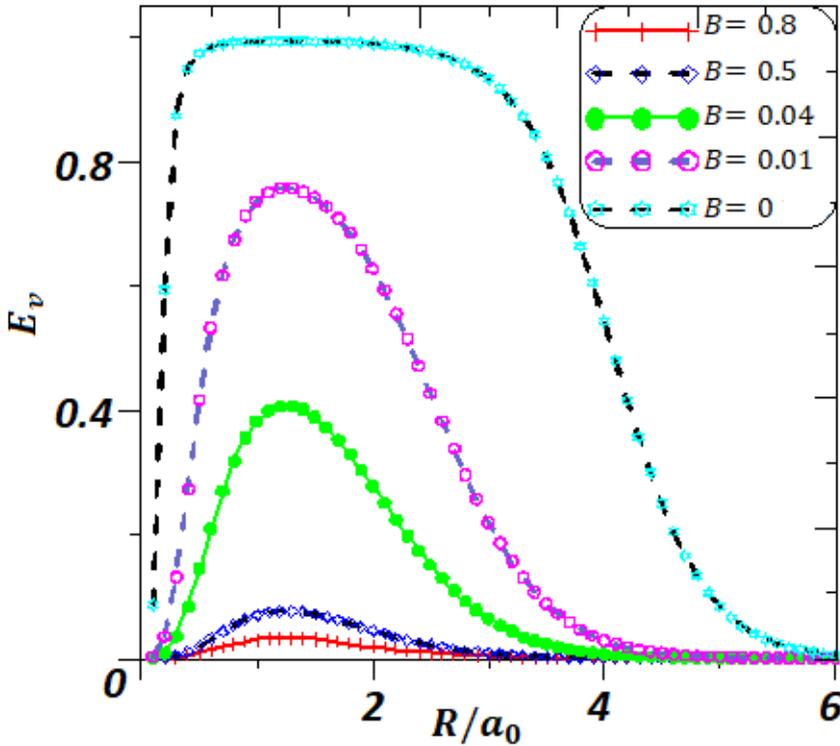
**Figure 2** : Curved surface and Contour map of  $E_v$ 's dependence on  $(U, V)$ .

The curved surface of Fig. 2 shows that the maximum value of quantum entanglement is  $E_v = 2$  whatever  $U$  and  $V$ , where it reaches its maximum value along a straight line. In this context, the contour map shows that the equation of this straight line is  $U = 2V$ . The contour map shows also the coexistence of Charge Density Wave CDW and Spin Density Wave CDW separated by the same straight line. The Extended Hubbard Model with first coulomb off-site interaction gives the possibility to indicate that a one-dimensional fermions at half-filling exhibits separation SDW – CDW near  $U = 2V$ . This result is in agreement with others ones that show that the CDW-SDW transition occurs for  $U = 2V$ , where it is the first-order in the strong interaction regime [24,26] and is the second-order in the weak interaction regime [27].

CDW-SDW transition has important properties that can be exploitable in the quantum information field. Thus, to have a quantum computer based on  $N$ -fermions with high performance, it is enough to choose an optimal interatomic distance which verifies the condition  $U = 2V$ . In this case, the quantum entanglement reaches its maximum value. Thus, the corresponding quantum computer can treat, simultaneously, up to  $2^N$  information.

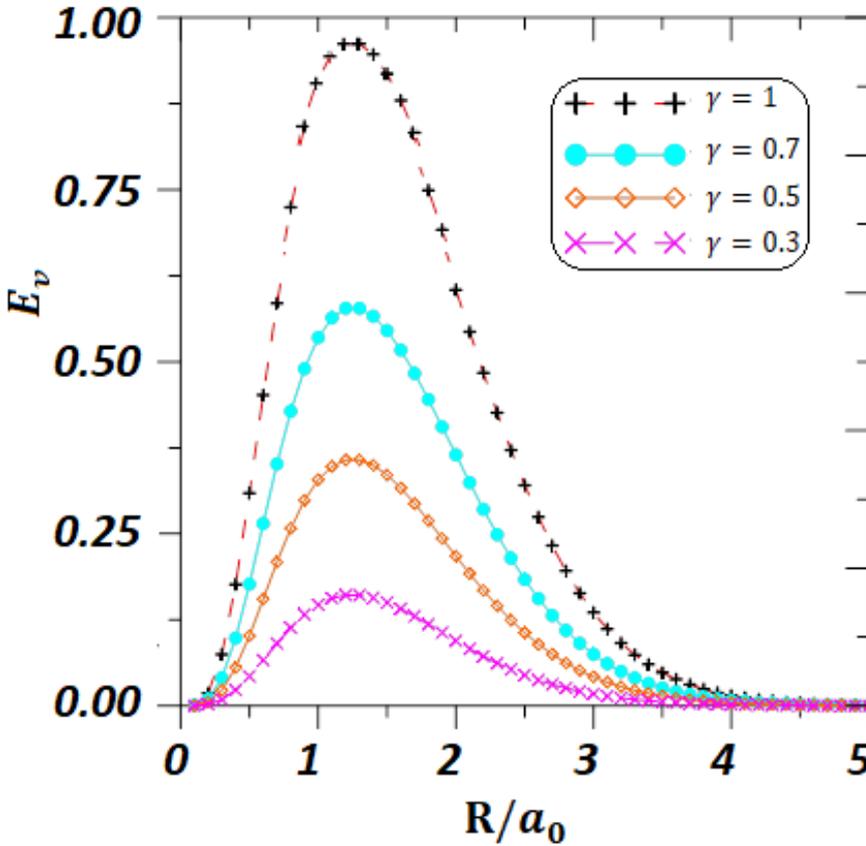
In order to examine other conditions for maximizing quantum entanglement, we analyse its behaviour in spin phase with transversal external magnetic field. In this case, the correlation charge is negligible in front of correlation spin. Thus, the corresponding model is parametrized by external magnetic field magnitude  $B$  and anisotropy parameter  $\gamma$  with  $J_x = \frac{J}{2}(1 + \gamma)$ ,  $J_y = \frac{J}{2}(1 - \gamma)$  where  $J$  is exchange spin which is a function of interatomic distance  $R$  according to the equation  $J \sim R^{5/2}e^{-2R}$  [28].

In Fig. 3, we plot the variations of quantum entanglement  $E_v$  for isotropic model ( $\gamma = 0$ ) as a function of interatomic distance  $R/a_0$  for different values of magnetic field  $B$ , where  $a_0$  is Bohr radius.



**Figure 3 :** Quantum entanglement  $E_v$  as a function of the interatomic distance  $R/a_0$  for different magnetic field values  $B$  with  $\gamma = 0$ .

The obtained curves show that quantum entanglement vanishes for small and large values of interatomic distance ( $\frac{R}{a_0} \sim 0$  and  $\frac{R}{a_0} \sim 6$ ). But, for optimal interatomic distance ( $R \sim 1.25a_0$ ), the quantum entanglement reaches its maximum value. Especially, it reaches  $E_v = 1$  for a weak magnetic field. The curves show also that this maximum value decreases with  $B$ . In short, it is interesting to keep a quantum calculator outside any magnetic field so that its quantum entanglement is important.



**Figure 4 :** Quantum entanglement  $E_v$  as a function of the interatomic distance  $R/a_0$  for different values of the anisotropy parameter  $\gamma$  with  $B = 0$

Finally, to study the effect of the anisotropy of spin-spin interaction on quantum entanglement, we plot in Fig. 4, the variations of  $E_v$  as a function of  $\frac{R}{a_0}$  for different values of the anisotropy parameter  $\gamma$ . For a fixed of  $B$ , the quantum entanglement  $E_v$  is maximal for optimal interatomic distance ( $R \sim 1.25a_0$ ) and  $\gamma = 1$ . Thus, the quantum entanglement is important for a one-dimensional spin-spin interaction ( $J_x = J$  and  $J_y = 0$ ).

## 4. Conclusion

In this paper, we have studied the behavior of quantum entanglement versus correlations charge and correlations spin modeled by 1D Extended Hubbard Model. Assuming that this model exhibits critical separation between Charge Density Wave (CDW) and Spin Density Wave (SDW), we have discussed the obtained results in CDW and SDW separately.

In CDW, the considered model is parametrized by on-site interaction energy  $U$  and off-site interaction energy  $V$ . The obtained results show that quantum entanglement reaches its maximum value  $E_v = 2$  for  $U = 2V$ . For optimal qubit - qubit distance that checks the condition  $U = 2V$ , quantum computer based on  $N$  qubits can treat, simultaneously, up to  $2^N$  information. In SDW, the considered model is parametrized by spin-spin coupling parameter  $J$ , anisotropy parameter  $\gamma$  and external magnetic field  $B$ . The behavior of quantum entanglement as a function of qubit - qubit distance  $R$  shows that it vanishes for small and large values of  $R$ . But, for an optimal distance, it reaches its maximum value which decreases with external magnetic field. Moreover, the behavior of quantum entanglement as a function of anisotropy parameter  $\gamma$  shows that quantum entanglement is important for a one-dimensional spin-spin interaction ( $\gamma = 1$ ).

In short, we found the conditions for maximizing quantum entanglement in qubits system by studying its behavior as a function of correlation charge and correlation spin. Thus, the perspectives of this work is to test the possibility of achieving one of these conditions experimentally in qubits system in order to improve the performance of quantum calculator based on fermions

## References

- [1] D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, *Nature* 390, 575 (1997).
- [2] A. Furusawa, J. L. Sørensen, S. L. Braunstein, C. A. Fuchs, H. J. Kimble, and E. S. Polzik, *Science* 282, 706 (1998).
- [3] R. Raussendorf and H. J. Briegel, *Phys. Rev. Lett.* 86, 5188 (2001).
- [4] A. Kent, R. Beausoleil, W. Munro, and T. Spiller, US patent US20067075438 (2006).
- [5] R. A. Malaney, *Phys. Rev. A* 81, 042319 (2010).
- [6] A. Kent, W. J. Munro, and T. P. Spiller, *Phys. Rev. A* 84, 012326 (2011).
- [7] H.-K. Lau and H.-K. Lo, *Phys. Rev. A* 83, 012322 (2011).
- [8] E. Schrodinger, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 31 (4): 555563. (1935).
- [9] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, *Phys. Rev.* 47 (10): 777780 (1935).
- [10] M.A. Man'ko and V.I. Man'ko, *J. Russ. Laser Res.* 37, 1 (2016).
- [11] M.A. Man'ko and V.I. Man'ko, *J. Russ. Laser Res.* 35, 301 (2014).
- [12] I.Ya. Doskoch and M.A. Man'ko, *J. Russ. Laser Res.* 36, 503 (2015).
- [13] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.*, 80, 517 (2008).
- [14] S.-S. Deng, S.-J. Gu, and H.-Q. Lin, *Phys. Rev. B* 74, 045103 (2006).
- [15] D. Larsson and H. Johannesson, *Phys. Rev. Lett.* 95, 196406 (2005).
- [16] X. Deng and L. Santos, *Phys. Rev. B* 84, 085138 (2011).

- [17] J. Hubbard, Proc. R. Soc. Lond. A 276, 238-257 (1963).
- [18] S. Harir, M. Bennai, Y. Boughaleb, Int.J. Mod. Phys. B 26 (29) 1250156 (2012).
- [19] S. Harir, A. Zouhair, M. Bennai, Y. Boughaleb, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 628, 162 - 166 (2016).
- [20] Y. C. Chen, A. Moreo, F. Ortolani, E. Dagotto, and T. K. Lee, Phys. Rev. B 50, 655(R) (1994).
- [21] F. D. M. Haldane, J. Phys. C Solid State Phys. 14, 2585 (1981).
- [22] P. Zanardi, Phys. Rev. A 65, 042101 (2002).
- [23] W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. 80, 2245 (1998).
- [24] R. A. Bari, Phys. Rev. B 3, 2622 (1971).
- [25] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. 53, 2327 (1984).
- [26] P. G. J. van Dongen, Phys. Rev. B 49, 7904 (1994).
- [27] J. Solyom, Adv. Phys. 28, 201 (1979).
- [28] C. Herring and M. Flicker, Phys. Rev. 134, A362 (1964).



**SÉANCE II**  
**SIMULATION QUANTIQUE**



# APPLICATION OF QUANTUM CHEMISTRY MODELLING TO DIFFERENT FIELDS

*Najia KOMIHA*

*Equipe de Chimie Théorique et Modélisation, Centre de recherche en Eau,  
Ressources Naturelles, Environnement, développement Durable,  
Département de chimie, Faculté des Sciences Université Mohammed V, Rabat*

## I- INTRODUCTION

Nous présentons ici un florilège des travaux récemment effectués par notre équipe.

Rappelons auparavant ce qu'est la chimie quantique. La base étant la physique quantique, il s'agit donc de résoudre l'équation de Schrödinger pour des systèmes chimiques. Ces systèmes chimiques sont constitués par les noyaux et les électrons des atomes, ions ou molécules et leurs interactions sont alors étudiées. La résolution de l'équation de Schrödinger nous fournit la fonction d'onde du système et son énergie:

$$\mathbf{H} \Psi = \mathbf{E} \Psi$$

$\Psi$  : la fonction d'onde contient l'information nécessaire à la description de la structure électronique et conduit donc à la structure géométrique, la densité électronique, les charges et transferts de charges.

$\mathbf{E}$  : toutes les grandeurs énergétiques sont accessibles à partir de là. La spectroscopie, et l'étude des énergies d'interactions inter et intra moléculaires peuvent ainsi être étudiés.

Différentes méthodes de résolution plus ou moins précises sont disponibles, il s'agit alors d'adopter la méthode idoine, compromis entre précisions des résultats et coût des calculs.

## II- Les différents champs d'application de la chimie quantique:

Nous appliquons, dans notre équipe de recherche, les méthodes de la chimie quantique à différents domaines de la chimie, de la physique et de la biologie, à savoir :

- La synthèse de molécules organiques d'intérêt biologique ou pharmacologique.
- En science des matériaux, pour lesquels on étudie les structures et les caractérisations par spectroscopies.

- Dans le domaine de l'environnement et en astrophysique, en étudiant, par exemple, la dissociation et la formation de molécules atmosphériques ou interstellaires.

## II-1. Modélisation en synthèse organique

Nous présentons ici l'exemple d'une étude théorique de la synthèse d'un composé hétérocyclique par cycloaddition. Le but est d'élucider et de comprendre le mécanisme, d'étudier les intermédiaires réactionnels, les états de transitions et les profils réactionnels et in fine conclure quant à la régiosélectivité, stéréosélectivité ou à la chemosélectivité.

### La cycloaddition [3+2] :

Cette réaction implique :

- un système à trois centres, un dipôle -1,3, avec deux sites d'attaque, un électrophyle et un nucléophile en position 1 et 3 respectivement, et un dipolarophile, système à deux centres [1-4]. Soit par exemple, la réaction suivante, synthèse d'isoxazolidine [1] :

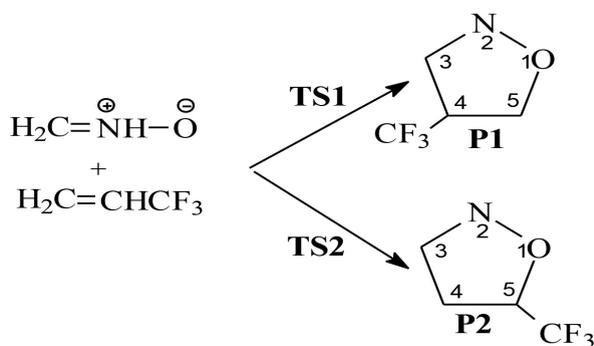


Figure 1 : Exemple de réaction de cycloaddition [1]

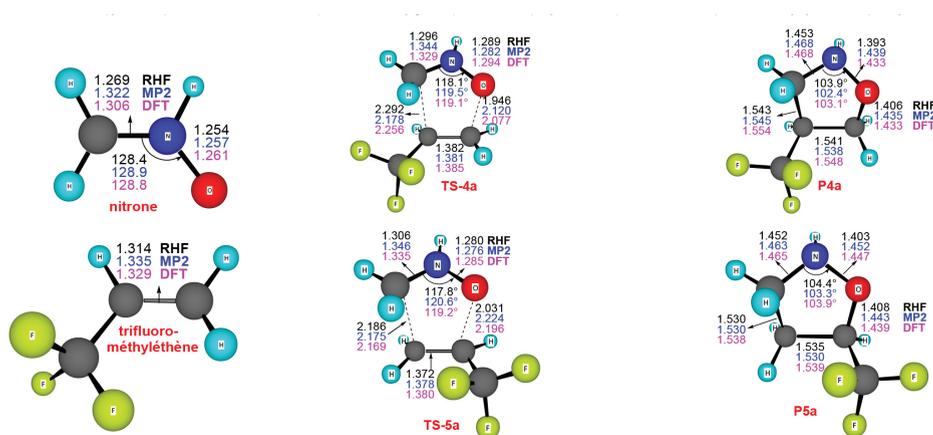


Figure 2 : Structures des réactifs, états de transitions et produits

La structure des états de transition montrent qu'il s'agit d'un processus synchrone et concerté aboutissant à la synthèse de deux produits possibles.

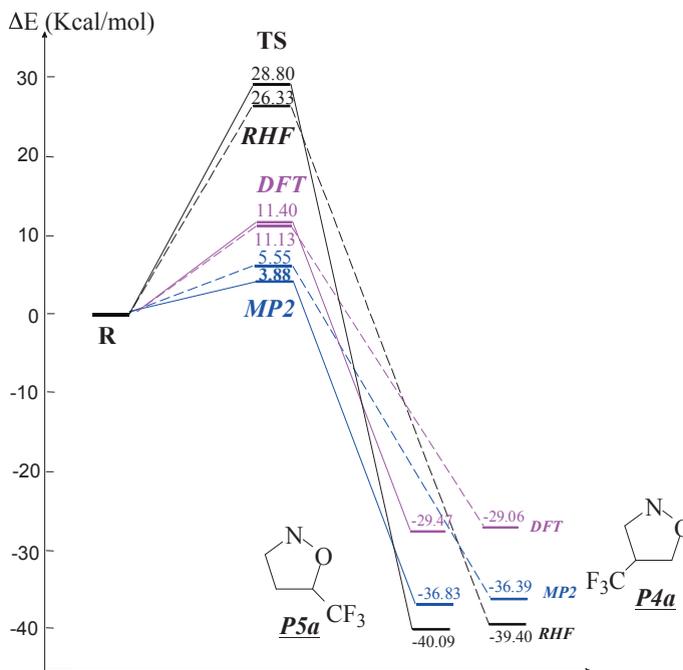
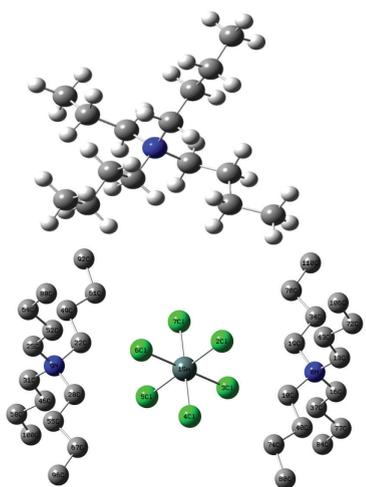


Figure 3 : Profils réactionnels de la cycloaddition selon les 3 méthodes quantiques RHF, MP2 et DFT

D'après le profil réactionnel établi figure 3, les deux stéréoisomères sont equi-probables.

## II-2. Etude de matériaux : Le tetrabutylammonium hexachlorostanate $[(C_4H_9)_4N]_2SnCl_6$

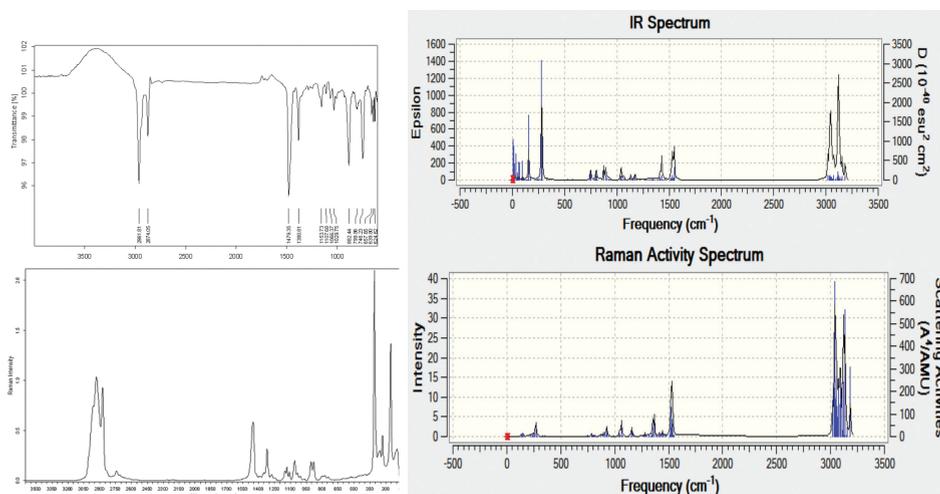
La structure et la caractérisation par spectroscopies Infra-rouge et Raman [5] ont été étudiées.



	CEP-121G	All e-6-31G	X Ray parameters
Sn-Cl (A)	2.539	2.536	2.416
N-Cl (A)	1.547	1.524	1.528
C-C (A)	1.543	1.526	1.513
CNC (°)	106.5	106.4	107.
NCC (°)	116.2	116.6	112.5

Figure 4 : Structure du tetrabutylammonium hexachlorostanate  $[(C_4H_9)_4N]_2SnCl_6$

Les spectres théoriques et expérimentaux (B3LYP/CEP-121G\*) sont donnés figure 5. On observe un très bon accord entre théorie et expérience.



**Figure 5 :** Spectres IR et Raman théoriques et expérimentaux du tetrabutylammonium hexachlorostanate

### II-3. Modélisation et environnement

Dans le domaine de l'environnement, on s'intéresse à la chimie atmosphérique et interstellaire. En général, les molécules d'intérêt sont de petites tailles et donc des méthodes quantiques très précises peuvent être utilisées. Les interactions faibles peuvent aussi être calculées telles que les interactions gaz-gaz, gaz-solide, molécule-solide ou molécule-surface.

#### II-3.1. Courbes de potentiel et spectroscopie électronique de CP, PO and PN

CP, PO et PN sont des molécules diatomiques phosphorées observées dans l'espace interstellaire, dans des atmosphères de planètes, poussières d'étoile ou dans des enveloppes d'étoile telles que IRC+10216, Orion-KL, Sgr B2, W51A, TMC-1.

Des données expérimentales sont disponibles pour ces molécules. Du fait de leur petite taille, des méthodes quantiques très précises ont pu être utilisées (SA-CASSCF, MRCI+Q, CCSD(T), CCSDT-F12) avec des bases d'orbitales atomiques étendues, (aug-cc-pV5Z basis sets). Les états électroniquement excités très hauts, jusqu'à 10 eV au-dessus de l'état fondamental, ont pu être décrits [6-8].

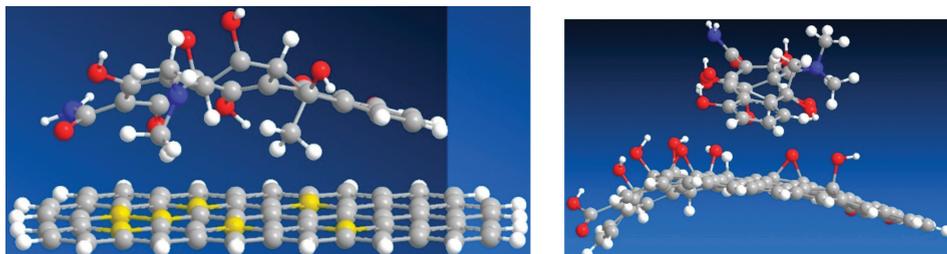


Ce spectre est dominé par la transition  $X^2\Sigma^+ \rightarrow A^2\Pi$  qui est observée expérimentalement.

La transition  $X^2\Sigma^+ \rightarrow B^2\Pi$ , observée expérimentalement aussi, est beaucoup moins intense. Une transition  $X^2\Sigma^+ \rightarrow 2^2\Pi$ , non observée, a été identifiée. Les différentes raies ont ainsi pu être assignées.

### II-3.2. Exemple d'interaction molécule-surface: Interaction de l'oxytétracycline (OTC) avec l'oxyde de graphène dopé au Bore.

La présence d'antibiotiques dans les eaux usées est un véritable problème environnemental, nous avons étudié ici l'interaction de l'oxytétracycline avec une surface de graphène dopée.



**Figure 8 :** Structure la plus stable de l'OTC adsorbée sur l'oxyde de graphène et l'oxyde de graphène dopé

L'énergie d'interaction trouvée, dans les deux cas, est suffisante pour provoquer une adsorption spontanée. Elle est de  $-32.03$  Kcal/mol pour l'oxyde de graphène et de  $33.10$  Kcal/mol pour l'oxyde de graphène dopé au Bore. Ce matériau peut donc être intéressant pour débarrasser les eaux usées des antibiotiques dans un but de dépollution.

### II-3.3. Exemple d'interaction molécule-solide

Depuis que la structure de la protéine Spike du covid-19 a été publiée, un grand nombre d'études de l'interaction de cette protéine avec des molécules potentiellement thérapeutiques ont été menées. Nous avons étudié ici, l'interaction de cette protéine avec des molécules issues de substances naturelles et l'avons comparée à celle de la fameuse hydroxychloroquine.



**Figure 9 :** Conformation de l'hydroxychloroquine adsorbée sur la protéine Spike du covid-19

Il ressort de notre étude que l'énergie d'adsorption de la Crocine (issue du Safran), (-8.1 Kcal/mol), et de la Digitoxigénine (issue du Laurier) (-7.4 Kcal/mol), est plus importante que celle de l'hydroxychloroquine (-5.4 Kcal/mol). Ce résultat pourrait être intéressant à exploiter.

### III- Conclusion

Pour conclure, il convient de dire que la chimie quantique est un moyen qui permet de rentrer dans l'intimité des mécanismes, d'étudier les espèces transitoires de faible durée de vie, non accessibles par l'expérience et s'avère un bon outil pour assister la synthèse organique et l'expérience de manière générale.

Elle permet de comprendre et prédire les phénomènes en spectroscopies et réactivité chimique; Les méthodes quantiques doivent être adaptées au problème étudié. Soit à titre d'indication :

- La DFT pour la réactivité chimique organique;
- La DFT, CCSD(T) pour l'étude de structures;
- Les MRCI, CCSD(T)-F12 pour la spectroscopie.

Remarque : Notre équipe de recherche est constituée de 4 membres permanents, 6 membres associés, et deux doctorants.

Plusieurs projets internationaux sont à notre actif :

- CAPZEO : projet FP7 Marie Curie-IRSES-4552 : **2012-2017** dont la thématique : est la capture du CO<sub>2</sub> par les Zéolites;
- **CSIC i-coop** 2018 COOPB20364 : **2018-2021** dont la thématique est la chimie interstellaire;
- ATMOS H2020-MSCA-RISE-2019-872081, **2020-2024**, dont la thématique est la chimie atmosphérique, la pollution et les gaz à effet de serre.

### Bibliographie

- [1] Marakchi, K., Abou El Makarim, H., Kabbaj, O.K., Komih, N., Physical and Chemical News, 2010, 52, pp. 129-137.
- [2] Abbiche, K., Acharjee, N., Salah, M., (...), Komih, N., Marakchi, K. Journal of Molecular Modeling 2020.
- [3] Salah, M., Zeroual, A., Jorio, S., (...), Marakchi, K., Komih, N. Journal of Molecular Graphics and Modelling 2020.
- [4] Salah, M., Komih, N., Kabbaj, O.K., Ghailane, R., Marakchi, K. Journal of Molecular Graphics and Modelling 2017.
- [5] Berradi, O., Ghailane, R., Belfaquir, M., Elyoubi, M.S., Phys. Chem. News 2014.

- [6] Abbiche, K., Marakchi, K., Komaha, N., (...), Linguerri, R., Hochlaf, M., Molecular Physics 2014.
- [7] Abbiche, K., Salah, M., Marakchi, K., Kabbaj, O.K., Komaha, N., Molecular Physics, 2014.
- [8] Izzaouiha, S., Abou El Makarim, H., Komaha, N., Lahmar, S., Ghalila, H., Computational and Theoretical Chemistry, 2014.
- [9] El Hadki, A., Ulucan-Altuntas, K., El Hadki, H., Dahchour, A., Kabbaj, O.K., Komaha, N., Debik, E., Zrineh, A. à paraitre.
- [10] El Hadki, H., El Hadki, A., Tazi, R., Komaha, N., Zrineh, A., Kabbaj, O.K. à paraitre.

## CHIMIE QUANTIQUE & THÉORIE DE LA MODÉLISATION MOLÉCULAIRE

*Habib EL ALAOUI EL ABDALLAOUI*

*Laboratory of Physics of Condensed Matter (LPMC),  
Faculty of Science, Chouaib Doukkali University, El Jadida*

La chimie quantique consiste à appliquer le formalisme de la mécanique quantique aux systèmes chimiques, et à adopter ainsi l'équation de Schrödinger pour décrire un système moléculaire, et ceci pour comprendre la nature fondamentale des molécules, prévoir leurs propriétés physico-chimiques, et calculer les propriétés :

- Structurales : géométrie, fréquence de vibration...;
- Energétiques : énergie de liaison, énergie d'excitation...; pour estimer les stabilités relatives des molécules, de calculer les propriétés des intermédiaires réactionnels...
- Réactionnelles : barrière d'activation, liaison chimique...; pour justifier les interactions moléculaires et étudier les mécanismes des réactions chimiques...

Ces paramètres sont calculés en appliquant des modèles théoriques basés sur les lois de la mécanique ondulatoire aux électrons. Grâce à l'arrivée d'outils informatiques puissants; des simulations quantiques se sont développées permettant de mieux explorer et comprendre ces propriétés structurales. Ainsi l'application de logiciels de chimie quantique qui sont basés sur de nombreuses méthodes approchées va permettre une résolution à chaque problème posé.

Le champ de recherche de notre Equipe de Modélisation Moléculaire et Spectroscopie (EMMS) est très diversifié, allant de l'étude de la Réactivité Chimique, Spectroscopie, Catalyse, phénomène de l'interaction molécules-surfaces, ...; Grâce à ce bagage théorique très riche dont dispose notre équipe de recherche, elle a pu tisser des liens étroits avec son entourage scientifique que ça soit en chimie, en physique ou avec des biologistes intéressés par la modélisation des protéines et des ligands. Les modèles théoriques utilisés sont adaptés à la nature des problématiques traitées. Généralement, il y'a trois grandes catégories qu'on peut classer par ordre de précision décroissante pour décrire la matière à l'échelle moléculaire :

1. les modèles ab initio;
2. les modèles semi-empiriques;
3. les modèles empiriques.

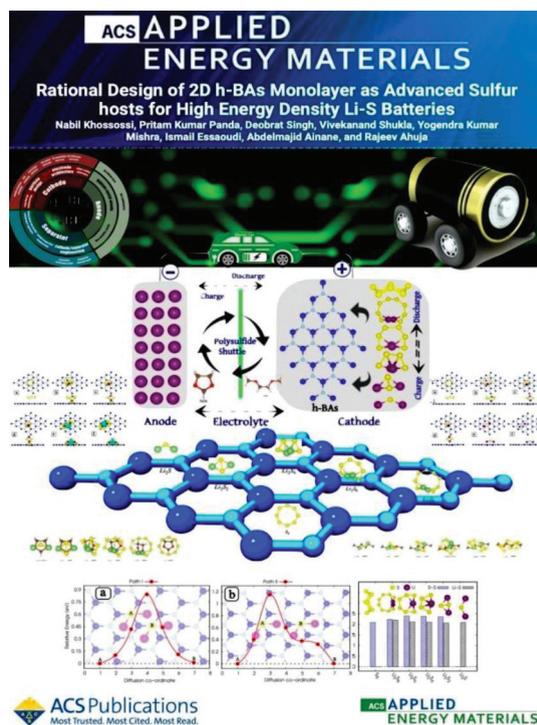
Durant ces jours difficiles, où la pandémie de COV-19 fait des ravages à travers le monde entier, l'outil quantique s'avère très promoteur pour la compréhension de l'interaction ligand-protéine de virus afin de développer des substances capable d'éradiquer ce fléau viral, dans cette objectif notre équipe s'est lancé dans cette recherche et des articles dans ce sens sont en cours. En effet la société scientifique est convaincue plus que jamais que l'outil quantique en chimie ouvre des horizons inestimables pour les chercheurs afin de mieux comprendre et maîtriser les phénomènes chimiques qui nous entourent.

## APPLICATION OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) CALCULATIONS

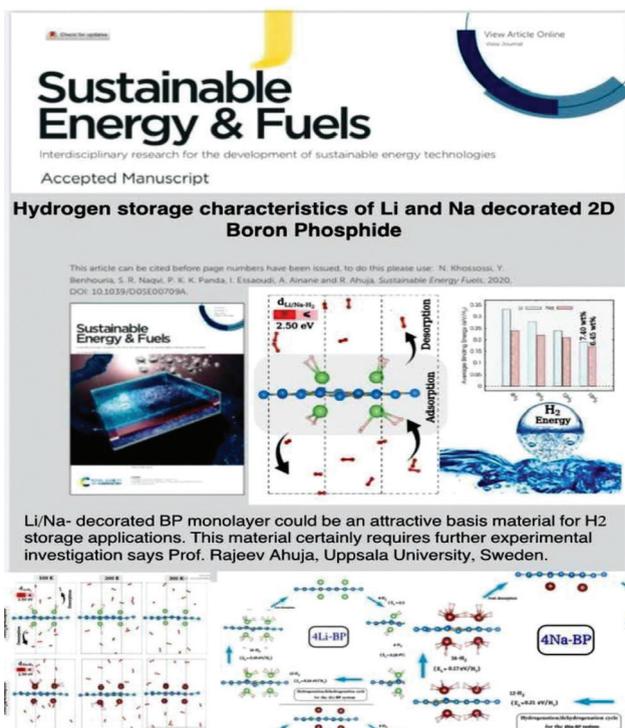
*Abdelmajid AINANE*

*Physics of Materials and System Modelling Laboratory (LP2MS)  
Physics Department, Faculty of Sciences, Moulay Ismail University,  
Meknes - Morocco*

The rise of the human population, along with the parallel development of the living conditions, should result in a rapidly increasing global demand for energy, and the negative effects on the atmosphere in the form of pollution and global warming are becoming increasingly apparent. It is therefore of the utmost importance to take action now and to focus on an ambitious quest for alternatives to our present fossil fuel environment. The general consensus is that only renewable energy sources can provide a long-term sustainable energy supply. We ought, however, to remember that, if fossil fuels are taken out of the picture, an appropriate alternative energy carrier is needed for mobile applications. Applications of such materials will be widely viewed in the fields of rechargeable battery, supercapacitors, thermoelectric, spintronics, photocatalysis, and fuel cells. We in our research group, doing extensive research in all of the above fields having a common platform to highlight the latest findings, all of which will be connected through a specific string called Energy. 2D ultrathin materials are commonly used in different energy technologies. Main efforts have been made over the last decades towards the production of high-quality, atomically thin, and substantial-scale 2D materials. These new materials also require a large amount of study in order to make a significant change from disclosing fundamental properties and conceptual proof-of-concept (feasibility) to technology development and validation. Our main goal is to promote the recent cutting-edge research and development of new 2D ultrathin materials for energy storage applications. It will illustrate the main practical applications of 2D materials in the field of energy storage and demonstrate how these materials are used to manufacture new, highly efficient energy storage systems. In all these works discussed in this presentiaon, mainly density functional theory (DFT), Basin-hopping and Climbing-Image Nudged Elastic Band (CI-NEB) based methods have been used to investigate the structural, electronic and electrochemical properties of 2D materials and their applications in rechargeable battery electrode, hydrogen storage and gas sensing.



In the development of next-generation battery beyond lithium-ion technologies, the emergence of compact lithium-sulfur (Li-S) batteries with improved performances is becoming nowadays one of the most desirable aspects of future energy technologies. Li-S is of great relevance to follow as it adapts to the specificity of each application. It is among the most suitable elements for high-performance energy storage systems, given its high theoretical capacity ( $1674 \text{ mA h g}^{-1}$ ) and energy density ( $2600 \text{ W h kg}^{-1}$ ) relative to Li-ion batteries ( $300 \text{ W h kg}^{-1}$ ). Nevertheless, the high-cell polarization and the shuttle effect constitute an enormous challenge toward the concrete applications of Li-S batteries. In the framework of this work, density functional theory calculations have been carried out to analyze the potential of h-BAs nanosheets as a promising host cathode material. Binding and electronic characteristics of LiPSs on h-BAs surface have been discussed. Our findings highlight the potential of the h-BAs monolayer as a moderate host S-containing cathode material. The analysis of the complex binding mechanisms is also discussed by investigating the components of van der Waals physical/chemical interactions. The defected surface of the h-BAs monolayer has optimum binding energies with LiPSs. Our findings in this work provide valuable insights into the binding and electronic characteristics of the h-BAs monolayer as a moderate host material for Li-S batteries.

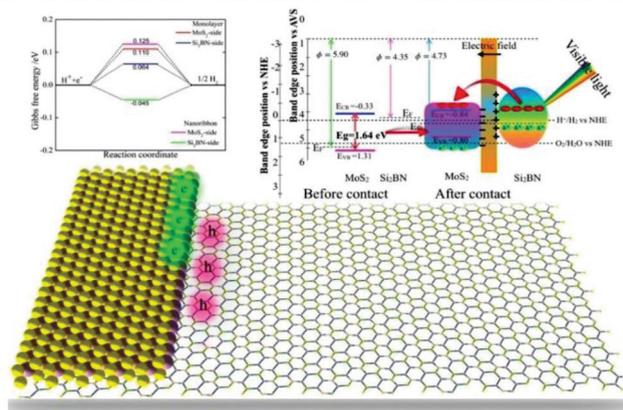


On the other hand, The Use of the hydrogen (H<sub>2</sub>) as an energy carrier can also promise energy sustainability, economic viability, as well environmental friendliness. H<sub>2</sub> represent a very abundant in nature and delivers the highest energy density compared to all types of fossil fuels. However, his gaseous nature makes its storage difficult for practical applications. Previously employed H<sub>2</sub>-storage strategies (liquefaction and pressurized storage) suffer from economic/safety issues. H<sub>2</sub>-storage in solid-state materials via non-dissociative adsorption represent the great suitable approach. However, adsorption energies of the H<sub>2</sub> with the storage medium are typically very weak therefore operations under ambient working conditions are not possible. In this work we have systematically studied the Li/Na decorated 2D boron phosphide (BP) monolayer as a potential candidate for hydrogen storage due to its lightweight and structural stability. The thermodynamic stabilities of BP monolayer in cases of 4Li@BP and 4Na@BP systems were evaluated at room temperature using *ab initio* molecular dynamics (AIMD) simulations. It was found that the dispersed Li and Na atoms on the monolayer surface significantly increase both the hydrogen binding energies and the hydrogen storage capacities. With one-sided coverage of Li and Na atoms, four H<sub>2</sub> molecules were adsorbed with a gravimetric capacity of 4.917 and 4.558 wt%, respectively. For double-sided adatom coverage, a total of 16H<sub>2</sub> molecules was captured around 4Li@BP and 4Na@BP complex with a gravimetric capacity of 7.402 and 6.446 wt%, respectively. Which suggest that 2D boron phosphide (BP) monolayer can act as an effective substrate for H<sub>2</sub> storage by carefully engineering it with metal decoration.



### Impact of edge on interfacial interactions and efficient visible-light photocatalytic activity of metal-semiconductor hybrid 2D materials

This article can be cited before page numbers have been issued, to do this please use: D. Singh, P. K. Panda, N. Khossossi, Y. K. Mishra, A. Amane and R. Ahuja, *Catal. Sci. Technol.*, 2020, DOI: 10.1039/D0CY00420K.



rsc.li/catalysis

In Addition, Hydrogen is also a renewable and clean energy source and the mechanism to generate hydrogen and oxygen through photocatalytic water splitting bears significant challenges that include light harvesting, separation, migration of photogenerated electrons and holes, and the hydrogen evolution reaction (HER) and oxygen evolution reaction (OER) on the surface of photocatalysts. To achieve that, the redox potential of water must lie in between the CBM and VBM, where the CBM should be higher than the reduction potential of  $H^+/H_2$ , and the VBM should be lower than the oxidation potential of  $H_2O/O_2$ . In this study, we systematically studied the structural, electronic, and optical properties of a MoS<sub>2</sub>/Si<sub>2</sub>BN vdW heterostructure. The charge transport and optoelectronic properties of MoS<sub>2</sub> and Si<sub>2</sub>BN heterostructures separately are discussed in detail. We noticed that the positions of the valence and conduction band edges of MoS<sub>2</sub> and Si<sub>2</sub>BN change with the Fermi-level and form a Schottky contact heterostructure with superior optical absorption spectra. Furthermore, the charge density difference profile and Bader charge analysis indicated that the internal electric field would facilitate the separation of electron-hole ( $e^-/h^+$ ) pairs at the MoS<sub>2</sub>/Si<sub>2</sub>BN interface and restrain the carrier recombination. The idea of using this vdW heterostructure provides an insightful understanding about the physical mechanism for the better photocatalytic performance and offers an adequate instructions for fabricating superior Si<sub>2</sub>BN-based heterostructure photocatalysts.

## References

- Rational Design of 2D h-BAs Monolayer as Advanced Sulfur Host for High Energy Density Li–S Batteries.
- Nabil Khossossi, Pritam Kumar Panda, Deobrat Singh, Vivekanand Shukla, Yogendra, Kumar Mishra, Ismail Essaoudi, Abdelmajid Ainane and Rajeev Ahuja.  
ACS Appl. Energy Mater. 2020, 3, 8, 7306–7317.
- Hydrogen storage characteristics of Li and Na decorated 2D boron phosphide
- Nabil Khossossi, Younes Benhouria, Syeda R. Naqvi Pritam K. Panda, Ismail Essaoudi, Abdelmajid Ainane and Rajeev Ahuja.
- Sustainable Energy & Fuels, (2020) <https://doi.org/10.1039/D0SE00709A>.
- Impact of edge structures on interfacial interactions and efficient visible-light photocatalytic activity of metal–semiconductor hybrid 2D materials.
- Deobrat Singh, Pritam Kumar Panda a, Nabil Khossossi, Yogendra Kumar Mishra, Abdelmajid Ainane and Rajeev Ahuja  
Catal. Sci. Technol., 2020, 10, 3279-3289  
DOI: 10.1039/D0CY00420K



# IMPLICATION DES CHERCHEURS MAROCAINS EN PHYSIQUE DES HAUTES ÉNERGIES ET EN ASTRO-PARTICULES : DÉTECTEURS ATLAS ET KM3NET

*Rajaâ CHERKAoui EL MOURSli*

*Académie Hassan II des Sciences et Techniques*

Au nom du Réseau Universitaire de Hautes Energies (RUPHE)

*Pr. A. Arhrib: Université Abdelmalek Essaadi, FST Tanger; Pr. D. Benchekroun: Université Hassa II, Casablanca; Pr. R. Benbrik: Université Cadi Ayyad, Marrakech; Pr. M. Chabab: Université Cadi Ayyad, Marrakech; Pr. R. Cherkaoui El Moursli: Université Mohamed V, Rabat; Pr. J. Derkaoui Université Mohammed Premier Oujda; Pr. F. Fassi: Université Mohamed V, Rabat; Pr Gouighri Université Ibn Tofail, Kénitra; Pr. A. Hoummada: Université Hassa II, Casablanca; Pr. M. Kacimi: Université Cadi Ayyad, Marrakech; Pr. Y. Khoulaki: Université Hassan II, Casablanca; Pr A. Moussa, Université Mohammed Premier Oujda; Pr. M. Ouchrif (Université Mohammed Premier Oujda; Pr. L. Rahili : Université Ibn Zohr; Pr. Y. Tayalati: Université Mohamed V, Rabat.*

## **I. Introduction**

La recherche universitaire se mondialise plus que jamais. Que ce soit pour avoir accès à de l'équipement spécialisé ou à de nouvelles sources de financement, ou pour trouver de nouvelles idées, les chercheurs tendent la main à leurs collègues du monde entier, et leurs travaux en bénéficient. La science est indéniablement un projet mondial.

Dans cet esprit, le Maroc est devenu officiellement membre de deux internationales collaborations ATLAS et KM3NeT. Il est important de souligner que dans la recherche scientifique, pour intégrer les collaborations internationales, il faut l'accord et le soutien de toutes les parties, donc dans notre cas, celui de notre ministère de tutelle.

Le Maroc a eu le privilège, grâce à la compétence de ses chercheurs dans ce domaine, de rejoindre la collaboration internationale ATLAS au CERN depuis 1995 en contribuant à la construction et à l'analyse des données du détecteur ATLAS (acronyme de A Toroidal LHC ApparatuS) au CERN et actuellement dans la mise à niveau de ce détecteur. ATLAS est l'un des deux détecteurs polyvalents du Grand collisionneur de hadrons (LHC). Il étudie des domaines de physique très variés, de la recherche du boson de Higgs, aux

dimensions supplémentaires de l'espace-temps, en passant par les particules qui pourraient former la matière noire. Le Maroc est le seul pays Arabe participant à cette expérience et il a été le seul pays Africain jusqu'en 2009.

En 2016, le Maroc a également rejoint la collaboration KM3NeT. Le détecteur KM3NeT, acronyme de *Cubic Kilometre Neutrino Telescope*, est un projet européen d'observatoire de neutrinos qui doit être installé en Mer Méditerranée et dont les travaux ont débuté en avril 2013. ANTARES est le premier télescope neutrino opérationnel en Méditerranée. Il est situé à proximité du site KM3NeT-Fr, au large de Toulon, France. Depuis son achèvement en 2008, le télescope prend continuellement des données et a publié de nombreux résultats. Il s'agit de l'un des trois projets pilotes précédant la conception de l'infrastructure de recherche KM3NeT. Les deux autres projets pilotes étaient NEMO, off-shore Sicile, Italie et NESTOR off-shore Pylos, Grèce. Le KM3NeT-It est situé sur l'ancien site NEMO. L'ancien site NESTOR est considéré pour KM3NeT-Gr. Les chercheurs marocains vont contribuer à la fois à la construction de ce nouveau détecteur et à la simulation et l'analyse des données.

L'expérience ATLAS se situe au CERN, l'organisation européenne pour la recherche nucléaire. Au CERN, le travail de recherche vise à mieux comprendre de quoi est fait l'Univers et comment il fonctionne. Pour cela, un complexe unique au monde d'accélérateurs de particules est mis à la disposition des scientifiques leur permettant de repousser les limites de la connaissance humaine. Le CERN travaille dans le cadre d'une stratégie, fruit de longues discussions sur les pertinences scientifiques des différents projets en fonction de l'état des connaissances de la discipline et ses questions ouvertes. Cette stratégie montre la nécessité d'investir dans de vigoureux programmes de coopération entre le CERN et d'autres instituts de recherche situés dans les États membres et au-delà. Le Maroc étant membre de deux expériences, ATLAS et KM3NET, s'intéresse étroitement à cette stratégie.

Les expériences dans ce domaine scientifique ne sont possibles que grâce à la collaboration mondiale de nombreux scientifiques. Les détecteurs sont conçus, construits et exploités par de grands groupes de recherche et les résultats scientifiques sont une réussite commune à de nombreux scientifiques. Le temps requis depuis la première idée sur l'expérience, la conception, la construction, la prise de données et l'analyse de données s'étend généralement sur plus de dix ou vingt ans. Pendant cette période, les contributions continues de tous les participants - experts en matériel de détection, en étalonnage et en analyse de données - sont essentielles à la publication des résultats scientifiques.

Avec la découverte du boson de Higgs, l'étude de ses propriétés ainsi que la recherche de la physique au-delà du modèle standard sont les premiers objectifs scientifiques. Pour cela, une série de mise à niveau du complexe d'accélérateurs et des détecteurs va permettre d'atteindre une plus grande sensibilité à des interactions rares.

Nous allons décrire tout d'abord le contexte scientifique en général de ce domaine, présenter les expériences ATLAS et KM3NeT, donner une rapide vue et un bref historique de la stratégie du CERN et terminer par les thèmes auxquels participent les chercheurs marocains.

## II. Contexte Scientifique

### a. Les lois de la physique

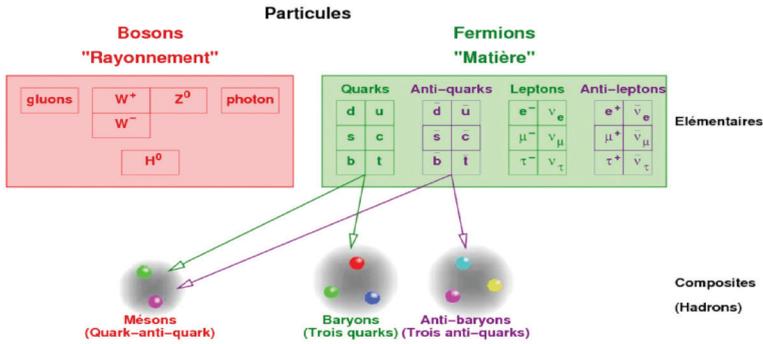
La théorie classique s'applique dans le domaine du quotidien et des conditions non extrêmes. C'est le domaine de la mécanique classique et de l'électromagnétisme qui régissent notre environnement immédiat.

Le domaine de la relativité restreinte puis générale a révolutionné le concept d'espace et de temps, celui des grandes structures de l'univers, des grandes vitesses, des phénomènes extrêmement violents (macroscopiques autant que microscopiques). L'une des lois fondamentales qui en est issue est l'équivalence énergie-matière qui joue un rôle déterminant au moment du Big Bang. La détection directe récente d'une onde gravitationnelle (au moyen de l'antenne LIGO aux USA) prédite par Einstein dans le cadre de cette théorie il y a un siècle en est une nouvelle preuve indiscutable.

Le domaine de la mécanique quantique est certainement le moins connu et le plus difficile à appréhender: c'est le domaine de la théorie quantique des champs qui régit le monde des particules élémentaires et des systèmes de très petites dimensions. La mécanique quantique révolutionne le concept de continuité et de mesure: Par exemple, avec le principe d'indétermination de Heisenberg qui énonce qu'il y a une limite inférieure à la précision avec laquelle on peut connaître l'énergie d'une particule lorsque l'on ne dispose que d'un créneau temporel pour la mesure (plus ce créneau est faible, plus l'indétermination sur l'énergie sera grande); Par exemple aussi le concept d'interaction entre particules interprétée comme étant l'échange d'une particule dite de jauge. La mécanique quantique relativiste introduit de plus la notion de spin qui est une propriété intrinsèque de la particule; le spin est caractérisé par un nombre quantique entier (boson) ou demi-entier (fermion). La matière est constituée de fermions qui obéissent, contrairement aux bosons, au principe d'exclusion de Pauli qui est fondamental dans la structuration de la matière car il interdit à deux fermions d'occuper le même état quantique (d'où l'apparition des niveaux d'énergie de l'atome).

### b. Le modèle Standard de la Physique des particules

Pour décrire le monde qui nous entoure, on dispose du Modèle Standard des particules (MS). Le cadre théorique du modèle standard est la théorie quantique des champs qui permet de décrire les interactions fondamentales des particules élémentaires en respectant les principes de la relativité restreinte et ceux de la mécanique quantique. C'est une représentation qui s'applique à des objets quantiques et qui tente d'expliquer leurs interactions. Elle est bâtie sur le triptyque *particule, force, médiateur*, c'est-à-dire qu'elle distingue des familles de particules par les forces auxquelles elles sont sensibles, chaque force s'exerçant au moyen de médiateurs échangés par les particules qui y sont soumises. Ces médiateurs sont connus comme étant des bosons, alors que les particules constituant la matière sont appelés fermions (quarks et leptons).



### Le Modèle Standard de la physique des particules

Trois familles de briques élémentaires constituent la matière connue de l'univers, qui ont presque toutes une masse. Il existe quatre forces fondamentales dont trois seulement sont à considérer dans ce modèle standard. Ces forces (ou interactions) sont dues à l'échange d'un messenger ou médiateur de la force, nommé boson de jauge, de spin entier. Les bosons de jauge obéissent à la statistique de Bose-Einstein ; ils sont de spin entier et peuvent coexister entre eux dans le même état quantique. Chaque particule a une antiparticule de charge électrique opposée.

Dans le modèle physique standard, les particules élémentaires sont classées selon leur nombre de spin en fermions et bosons. Les fermions (spin demi-entier) constituent la matière; les bosons (spin entier) sont les médiateurs des forces; ce sont le photon (interaction électromagnétique), les gluons (interaction nucléaire forte) et les bosons (interaction nucléaire faible). De même que Maxwell a unifié le magnétisme et l'électricité dans l'électromagnétisme, les physiciens ont tenté d'unifier l'interaction électromagnétique et l'interaction faible. Sur le plan théorique, cette unification, connue sous le nom de «théories de jauge», a été proposée par Glashow, Weinberg et Salam dans les années 1960. Seule difficulté, cette théorie prédisait l'existence d'un boson de masse nulle, alors que les bosons connus à l'époque étaient tous des bosons massifs : 80 GeV pour les bosons  $W^\pm$  et 91 GeV pour le boson  $Z^0$ . De manière à lever la difficulté, les physiciens ont imaginé un nouveau champ, le champ de Higgs, avec sa particule associée, le boson de Higgs. Ce champ confère une masse aux particules de jauge, dont les bosons  $W^\pm$  et  $Z^0$ , lesquels acquièrent leur masse en interagissant avec le champ de Higgs. Les particules qui n'interagissent pas, comme le photon, ont une masse nulle. L'hypothèse du champ de Higgs a été formulée au début des années 1960 par deux physiciens de l'Université Libre de Bruxelles. Robert Brout et François Englert publient leur article dans les Physical Review Letters le 31 août 1964 (Brout et Englert, 1964).

Le boson de Higgs n'est pas un médiateur de force, et n'appartient donc pas à la classe des bosons de jauge. Le boson de Higgs de spin 0, est un champ scalaire, et il confère leur masse aux autres particules par un mécanisme de brisure spontanée de symétrie appelé dans ce cadre le mécanisme de Higgs.

D'après la mécanique quantique, pour observer une structure microscopique, il est nécessaire de lui transférer une énergie, d'autant plus élevée que la résolution souhaitée est élevée. Mais d'après la théorie de la relativité, ce transfert d'énergie peut se transformer en l'apparition de particules qui n'étaient pas présentes dans l'état initial : les fermions – constituants de la matière – peuvent être produits ou annihilés par paires particule/antiparticule, les bosons – messagers des forces – peuvent l'être en nombre arbitraire.

### c. Limite de la théorie

Le Modèle standard, la théorie qui décrit le mieux les forces et les particules connues, est incroyablement robuste et il a été couronné par la découverte du boson de Higgs en 2012. Toutefois, on dispose de beaucoup d'éléments qui donnent à penser qu'il est incomplet. Tel qu'il est ce modèle dans sa version minimale a besoin d'être complété. Le modèle standard n'apporte pas de justification théorique à la gravitation, telle que la décrit la relativité générale. Il ne rend pas compte de l'accélération de l'expansion de l'Univers (qui pourrait être expliquée par une énergie sombre). Il ne contient aucune particule qui pourrait composer la matière noire, possédant toutes les propriétés requises par les observations cosmologiques. Il ne décrit pas non plus correctement l'oscillation des neutrinos ni leur masse. Il n'explique pas la prédominance de la matière sur l'antimatière.

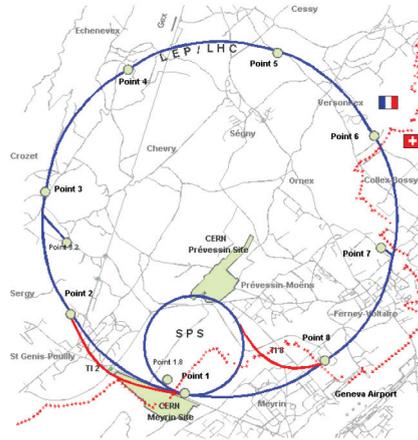
Pour le moment la mécanique quantique et la relativité générale, toutes deux confirmées avec une grande précision par l'expérience, ne peuvent être intégrées dans une théorie fondamentale unique. On ne sait pas faire, bien que l'on sache que chacune d'elle intervient dans des conditions extrêmes. Le LHC et l'expérience ATLAS

## III. Le LHC, l'expérience ATLAS et la grille de calcul

### a. Le LHC

Le collisionneur LHC (Large Hadrons Collider) est un double anneau de 27km de circonférence, vers 100m sous terre, dans lequel on fait tourner en sens inverse des «paquets de protons» avant de les faire se percuter les uns contre les autres. Le but est de transformer de l'énergie en matière selon l'équation très connue d'Einstein  $E=mc^2$ ; D'un côté nous avons l'énergie  $E$  et de l'autre la masse  $m$ . Cette équation montre l'équivalence masse-énergie.

Dans le LHC, ce qui compte, c'est concentrer de l'énergie en un point extrêmement petit afin de créer de la matière à partir de l'énergie. Cette matière ou plutôt ces particules sont les mêmes que celles qui ont existé dans les tous premiers instants après le Big Bang, l'explosion initiale dont est né l'univers, il y a plus de 13 milliards d'années.



Map of CERN sites and LHC access points

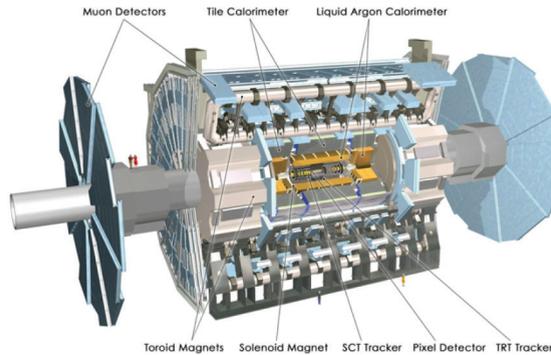
## b. ATLAS

Autour d'un des quatre points de collisions du LHC se trouve le détecteur géant Atlas (A Toroidal LHC Apparatus). L'expérience ATLAS est donc l'une des expériences qui équipent le Grand collisionneur de hadrons LHC.

Le détecteur est construit dans le but de découvrir des nouvelles particules élémentaires comme le boson de Higgs, particule découverte en 2012, trouver des particules supersymétriques ou accéder à des dimensions supplémentaires de l'espace!

Mesurant 46 m de long, 25 m de haut et 25 m de large, et pesant 7.000 tonnes, ATLAS est le détecteur de particules le plus volumineux jamais construit. Il se situe dans une cavene, à 100 m sous terre, afin d'être au niveau du croisement des deux faisceaux de protons de l'accélérateur LHC.

ATLAS a été conçu comme un détecteur polyvalent qui cherche à identifier et à mesurer précisément les caractéristiques (énergie, vitesse, direction) des particules produites lors des collisions. Il est construit comme un assemblage de détecteurs qui sont empilés selon une structure en oignon, caractéristique des expériences installées sur un anneau de collision et consacrées à la physique des particules. L'intégration de tous les sous-détecteurs dans l'infrastructure d'Atlas est une tâche très difficile, compliquée par l'implantation de tous les services (câbles, fibres optiques, tuyaux, accessibilité au personnel, sécurité...). ATLAS est un défi technique et scientifique sans précédent. Le détecteur Atlas se compose des parties suivantes: les détecteurs centraux conçus pour identifier les traces très près du point d'interaction des protons; le calorimètre électromagnétique permettant d'identifier et de mesurer l'énergie des photons et des électrons; et le calorimètre hadronique pour; le tout entouré par des détecteurs à muons.



### Le détecteur ATLAS

ATLAS comprend environ 3000 auteurs scientifiques issus de 183 institutions du monde entier, représentant 38 pays de tous les continents peuplés. Les auteurs sont cités par ordre alphabétique. C'est l'une des plus grandes collaborations jamais tentées en science. Environ 1200 doctorants sont impliqués dans le développement de détecteurs, la collecte de données et l'analyse. La collaboration dépend des efforts d'innombrables ingénieurs, techniciens et personnels administratifs.

ATLAS élit ses dirigeants et dispose d'une structure organisationnelle qui permet aux équipes de s'autogérer et aux membres de participer directement aux processus de prise de décision. Les scientifiques travaillent généralement en petits groupes et choisissent les domaines de recherche et les données qui les intéressent le plus. Tout résultat de la collaboration est partagé par tous les membres et est soumis à un processus d'examen et de vérification des faits rigoureux avant que les résultats ne soient rendus publics. Le succès de la collaboration est lié à l'engagement individuel envers la physique et à la perspective de nouveaux résultats excitants qui ne peuvent être atteints qu'avec un effort de collaboration complet et cohérent.

Les collaborations doivent se doter de règles internes claires pour désigner les auteurs éligibles pour chaque publication. Ces règles de signature doivent être publiques et transparentes et suivre la recommandation que «la paternité doit être limitée à ceux qui ont apporté une contribution significative à l'idée, à la conception, à l'exécution et à l'interprétation de l'étude en cours. Tous ceux qui ont eu une contribution significative devraient pouvoir être reconnus comme auteurs» Pour obtenir sa qualification d'auteur, un physicien doit : (1) avoir été membre d'ATLAS pendant un an; (2) ne pas être membre d'une autre collaboration du LHC; (3) avoir consacré 50% du temps de recherche de l'année, et au moins 80 jours pleins, à une mission technique sur ATLAS. La candidature d'un nouvel entrant est présentée par le directeur d'équipe au président du comité de signature (Authorship Committee) qui transmet la candidature au porte-parole de la collaboration (Spokesperson), lequel décide en dernière instance de cette recevabilité, éventuellement après avis du conseil de la collaboration, en fonction du travail fourni. Pour les doctorants, le contenu de ce travail peut être tout à fait différent de leur sujet de thèse.

### c. Grille de calcul

L'accès aux données du LHC passe nécessairement par la grille de calcul LCG. Un effort est fourni dans ce sens par les établissements membres du RUPHE et devra aboutir à la mise en place de nœuds de grille, disposant d'importants moyens de calcul et de stockage, permettant aux différents laboratoires d'être connectés à la grille marocaine MaGrid et par la suite à la grille LCG ou à d'autres grilles internationales dédiées à d'autres disciplines.

Il est important de rappeler que les applications des grilles de calcul ne sont pas limitées à la physique des hautes énergies mais s'étendent à d'autres disciplines telles que la physique médicale, la bio-informatique, la météorologie, les sciences de l'espace, la médecine... Le RUPHE dans ce contexte a joué un rôle primordial dans la généralisation et la vulgarisation de l'utilisation du concept de grille au niveau du Maroc.

## IV. Le détecteur KM3NeT

KM3NeT est une infrastructure de recherche abritant les télescopes à neutrinos de nouvelle génération. Une fois terminés, les télescopes auront des volumes de détecteur compris entre mégatonnes et plusieurs kilomètres cubes d'eau de mer claire. Situé dans les mers les plus profondes de la Méditerranée, KM3NeT ouvrira une nouvelle fenêtre sur notre Univers, mais contribuera également à la recherche des propriétés des particules de neutrinos insaisissables.

L'observation de l'Univers se fait traditionnellement grâce aux photons. Ces particules, neutres, ne sont pas déviées par les champs magnétiques intergalactiques et permettent ainsi d'étudier des sources ponctuelles précises. Mais plus leur énergie augmente (domaine gamma), plus leur pouvoir de pénétration diminue : seules les couches externes des objets sont visibles et ce sur des distances de moins en moins grandes. Le ciel lointain de haute énergie, celui des phénomènes cataclysmiques de l'enfance de l'Univers, se dérobe à l'astronome. Mais un nouveau messenger, le neutrino, pourrait bientôt lui arracher ses mystères. Neutre et léger, le neutrino possède les mêmes qualités que les photons. Son avantage réside dans son caractère pénétrant lié à sa faible section efficace d'interaction avec la matière. Ce qui lui confère à la fois la possibilité de s'extraire des zones les plus denses de l'Univers et de parcourir des distances cosmologiques sans souffrir la moindre altération. Le neutrino est donc très difficile à capturer. Les estimations ont montré qu'il fallait construire un télescope d'environ 1 km<sup>3</sup> pour en détecter quelques-uns, et l'enfouir profondément dans la mer pour se protéger des gerbes de particules atmosphériques. La collaboration européenne ANTARES a choisi de placer à 2.500 m au fond de la mer une version plus modeste, pour se convaincre de la faisabilité d'une telle expérience. Ce télescope comporte 12 lignes de détection harnachées de photomultiplicateurs destinés à repérer le sillon de lumière laissé par les neutrinos après leur interaction alentours. Le télescope est achevé depuis 2008, mais la prise de données a débuté dès l'immersion, en 2007, de la première ligne de détection

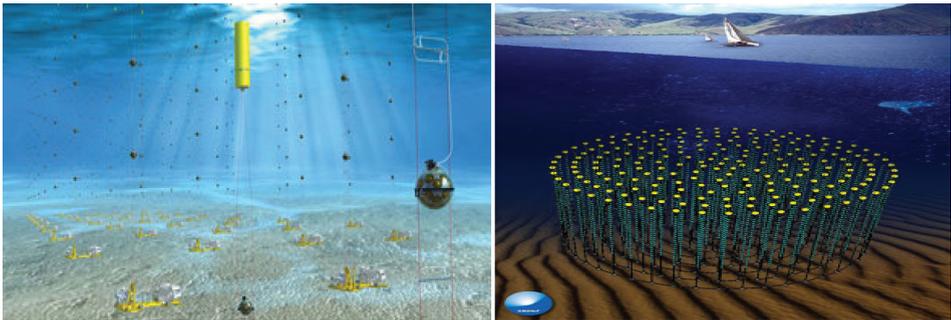
La Collaboration KM3NeT comprend 57 instituts et groupes dans 18 pays sur 4 continents.

KM3NeT englobe en fait deux télescopes à neutrinos gigantesques en cours d'installation sur les fonds de la mer Méditerranée. Le premier est situé au large de Toulon, et s'appelle ORCA (Oscillation Research with Cosmics in the Abyss). Immergé à près de 2.500 mètres

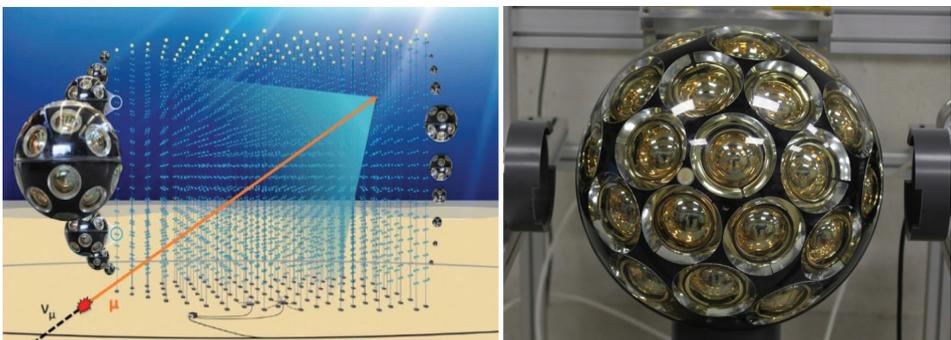
de profondeur. Le second télescope de KM3Net est ARCA (*Astroparticles Research with Cosmics in the Abyss*). Il sera situé à 3.500 mètres de profondeur en Sicile, avec des espacements plus larges entre les lignes (90 mètres) qui seront aussi plus longues (700 mètres) et deux fois plus nombreuses. Avec le télescope ARCA, les scientifiques de KM3Net rechercheront des neutrinos provenant de sources astrophysiques éloignées telles que des Supernovae, des explosions de rayons gamma ou des étoiles en collision. Le télescope ORCA est l'instrument des scientifiques de KM3Net qui étudient les propriétés des neutrinos en exploitant les neutrinos générés dans l'atmosphère terrestre

KM3Net comprend un réseau de plusieurs centaines de lignes de détection, ancrées au fond de la mer et maintenues par une bouée immergée. Chaque ligne contient 18 modules optiques répartis sur toute sa longueur qui sont des détecteurs de lumière, baptisé DOM (Digital Optical Module). Chaque DOM constitue donc l'élément de base du projet de télescope à neutrinos KM3Net et rassemble 31 photomultiplicateurs pour détecter la lumière produite par l'interaction entre un neutrino et la matière. Ces sphères de 47 centimètres de diamètre (dont presque 2 centimètres d'épaisseur !) sont conçues pour résister à des pressions de 350 bars.

Des réseaux de milliers de capteurs optiques détecteront la faible lumière dans la mer profonde des particules chargées provenant de collisions des neutrinos et de la Terre. L'installation abritera également des instruments pour les sciences de la Terre et de la mer pour la surveillance à long terme et en ligne de l'environnement des grands fonds marins et du fond marin à plusieurs kilomètres de profondeur.



**Illustration du système de détection de KM3Net  
(échelles non respectées) (KM3Net Collaboration)**



**Module optique DOM de KM3Net**

## V. La stratégie du CERN

L'établissement de la stratégie du CERN tient compte du paysage mondial de la physique des particules et des développements dans des domaines connexes. Le processus a été mis en place à l'initiative du Conseil du CERN dans le but de coordonner les activités menées au sein d'une vaste communauté internationale, en constante évolution, afin d'optimiser l'efficacité de l'activité scientifique. En juillet 2006, le Conseil du CERN adopte lors d'une session spéciale à Lisbonne, la première stratégie européenne pour la physique des particules (ci-après dénommée «la stratégie»), qui comptait dix-sept prises de position. En mai 2013, une première mise à jour de la stratégie avait été adoptée par le Conseil du CERN lors de sa session spéciale à Bruxelles. La deuxième mise à jour de la stratégie a été élaborée par le Groupe sur la stratégie européenne (ESG) lors de sa réunion de six jours tenue à Bad Honnef en janvier 2020. La résolution du Conseil relative à la mise à jour 2020 de la stratégie européenne pour la physique des particules a été adoptée lors de la 199<sup>e</sup> session du Conseil du CERN tenue le 19 juin 2020.

Dans cette dernière stratégie, la première décision souligne l'importance réitérée de la haute luminosité : Projet HL-LHC. La transformation du grand collisionneur de hadrons LHC (Large Hadron Collider) en machine de haute luminosité HL-LHC, dont les travaux sont en cours au CERN, devrait rester l'axe central de la physique des particules en Europe. Le projet LHC haute luminosité HL-LHC, approuvé en juin 2016, devra démarrer en 2027 pour une douzaine d'années environ. La mise à niveau de ses détecteurs, tout en poursuivant l'effort d'innovation en matière de techniques d'expérimentation, les technologies à l'étude (aimants à champ élevé, les supraconducteurs à haute température, les structures d'accélération par champ de sillage plasma ...etc...) vont entraîner un développement très important.

la stratégie énonce une autre recommandation importante, selon laquelle l'Europe, en collaboration avec la communauté mondiale, devrait entreprendre une étude de faisabilité technique et financière d'un collisionneur de hadrons de prochaine génération à la plus haute énergie atteignable, avec un collisionneur électron-positon comme première étape possible.

Une «usine à Higgs» dont le démarrage est prévu entre 2035 et 2040 pour une période de 10 à 15 ans est prévue. Cette production importante de Higgs permettra de mesurer précisément l'intensité du couplage aux différentes particules, les couplages aux bosons W et Z et aux fermions lourds sont déterminés avec le LHC à une précision de 17 à 20% près. Le HL-LHC permettra de les déterminer avec une précision entre 2 à 10% alors qu'une usine à Higgs permettra d'atteindre une précision de 0,1% à 1%».

Quatre projets sont proposés : Deux au CERN: le Futur collisionneur circulaire (FCC) électron-positon dans un tunnel de 100 km de circonférence (Higgs Factory) et ou le Clic, un accélérateur linéaire ; l'ILC - linéaire - porté par le Japon (International linear collide) et enfin le CEPC un collisionneur circulaire proposé par la Chine (Circular Electron Positron Collider).

Au CERN, L'exploitation du futur collisionneur FCC pourrait commencer dans un délai inférieur à dix ans, après la pleine exploitation du LHC à haute luminosité (HL-LHC), qui devrait cesser de fonctionner en 2038.

En effet, en produisant de très grandes quantités de bosons de Higgs, cette «usine de Higgs» augmentera la qualité et la précision des mesures et permettra de consolider le modèle standard de la physique des particules et surtout repérer la moindre anomalie.

Le CERN devra entamer des discussions avec de potentiels partenaires majeurs dans le cadre de l'étude de faisabilité concernant la réalisation d'un tel projet au CERN. Dans le cas d'un projet mondial réalisé en dehors de l'Europe, auquel il participerait, le CERN devra jouer le rôle de pôle régional européen, assurant une coordination stratégique et un appui technique.

A plus long terme, la décision pourra être prise de construire le FCC electron-positon dans un tunnel de 100 km de circonférence pour accueillir dans un premier temps le «Higgs Factory» et qui pourra servir par la suite à accélérer des hadrons à l'horizon de la seconde moitié du XXI<sup>e</sup> siècle –2055 par exemple– un grand collisionneur à Hadrons avec une énergie de 100 TeV, là où le LHC actuel ne développe que 13 TeV.

La prochaine stratégie européenne en physique des particules aura lieu en 2025 où sera peut-être décidé la construction de ce futur grand collisionneur.

Le progrès de la discipline dépend d'une collaboration intense entre les communautés théorique et expérimentale. La physique théorique est un élément moteur essentiel de la physique des particules, ouvrant des perspectives de recherche nouvelles, encourageant ainsi des recherches expérimentales. Donc il est nécessaire de continuer à soutenir vigoureusement un vaste programme de recherche théorique.

La physique des particules utilise des techniques qui ne se limitent pas à une discipline particulière. Les résultats de disciplines voisines, telles que la cosmologie, la physique nucléaire, l'astrophysique, la physique atomique, la physique de la matière condensée, le calcul et l'information quantique, nourrissent le dialogue scientifique. Donc il faut absolument favoriser des passerelles vers ces domaines et exploiter des synergies de manière à renforcer l'efficacité du processus de développement et à accroître les possibilités de transfert de technologie au bénéfice de la société dans son ensemble.

Les logiciels et les infrastructures informatiques à grande échelle gérant de gros volumes de données constituent un élément essentiel des programmes de recherche en physique des particules. C'est grâce à la mise en place d'une infrastructure logicielle et informatique efficace qu'il est possible d'obtenir les résultats scientifiques des expériences de physique des particules. Le développement des infrastructures logicielles et de calcul doivent tenir compte des récents progrès réalisés dans le domaine des technologies de l'information et de la science des données.

Enfin le CERN s'associe à un mouvement mondial, en plein essor, tendant à une «deuxième révolution quantique». Les propriétés quantiques telles que la superposition et l'intrication, qui font qu'un objet peut se trouver à deux endroits en même temps ou influencer de manière instantanée sur un autre objet, seront exploitées pour fabriquer de nouveaux appareils de calcul, de communication, de détection et de simulation. Notons bien que le CERN est ensemble diversifié de compétences et de technologies (logiciels, informatique et science des données, théorie, capteurs, cryogénie, électronique et science des matériaux) nécessaires à une approche multidisciplinaire.

La stratégie met également l'accent sur deux autres aspects essentiels : l'environnement et l'importance de la science ouverte (Open Science). Les technologies mises au point en physique des particules dans le but de limiter le plus possible l'impact environnemental des futures installations peuvent également trouver des applications plus générales dans le domaine de la protection de l'environnement.

## VI. Participation marocaine à ATLAS et KM3NeT

Conscients de l'importance de la recherche scientifique en Physique des Hautes Energies pour le développement socio-économique, technologique et culturel aussi bien en sciences fondamentales qu'appliquées et considérant les nombreuses retombées technologiques et industrielles de ces recherches, les physiciens de différents établissements marocains de ce domaine se sont regroupés en réseau, **Reseau Universitaire de Physique des Hautes Energies (RUPHE)**, reconnu depuis 1997 comme pôle de compétence par Le Ministère de l'Enseignement Supérieur de la Formation des Cadres et de la Recherche Scientifique. Le Maroc a pu ainsi grâce à l'aide du Ministère et du CNRST adhérer officiellement à l'expérience ATLAS. Et c'est ce réseau RUPHE qui représente officiellement le Maroc.

En 1998, le RUPHE a été admis à participer officiellement à l'expérience ATLAS, après un vote à l'unanimité des représentants des 147 institutions de 32 pays, constituant à cette période la collaboration internationale ATLAS.

Des chercheurs marocains ont participé au télescope à neutrinos ANTARES, prédécesseur de KM3NeT. Cette participation très positive a permis au Maroc de rejoindre officiellement la collaboration KM3NeT.

### a. Participation à la construction d'un sous-détecteur d'ATLAS

La participation marocaine à ce projet a été principalement dédiée au départ à la construction et aux tests de l'un des sous-détecteurs d'ATLAS, au développement de l'électronique du détecteur ainsi qu'à la simulation de processus physiques susceptibles de se produire au LHC.

Entre 1996 et 2003, des équipes marocaines vont effectuer un travail colossal : participer à la construction d'un détecteur du LHC d'Atlas en collaboration avec le laboratoire de physique subatomique et de cosmologie (LPSC) de Grenoble et le Royal Institute of technology de Stockholm. Plus de 50 000 électrodes ont été réalisées par des chercheurs des Facultés des sciences de Casablanca et de Rabat et les ingénieurs du CNESTEN.

Le groupe marocain est très actif dans l'analyse des données ATLAS ainsi que dans la mise à niveau (upgrade) du détecteur ATLAS.

Pour l'analyse physique, le groupe est actuellement impliqué dans plusieurs recherches dans le but et d'exploiter la physique au-delà du Modèle Standard (MS)

## **b. Participation à l'analyse des données d'ATLAS**

### ***Optimization of the ATLAS Electromagnetic End-cap performances and LHC luminosity determination using the End-Cap high-voltage system:***

Ce travail présente une nouvelle approche développée pour déterminer la luminosité ATLAS en utilisant la mesure du courant à haute tension du calorimètre électromagnétique bouchon ATLAS. Le courant injecté par le système de haute tension du EMEC - pour compenser les pertes d'ionisation des événements de polarisation minimum- est corrélé à l'intensité du flux des particules. Ce flux est proportionnel à la vitesse d'interaction, et par conséquent donne un aperçu direct sur la mesure de luminosité ATLAS. A partir de ce concept, Le travail consiste en une étude complète de la luminosité BCM (Beam Condition Monitor) de ATLAS en utilisant le système de la haute tension du calorimètre électromagnétique bouchon EMEC «End - Cap» (EMEC HV). En s'appuyant sur le courant de lecture mesuré sur les lignes haute tension (HV) du EMEC, il est possible de les calibrer en tenant compte de la luminosité absolue déterminé par le moniteur BCM (Beam Condition Monitor). Cette technique est complémentaire dans la détermination relative de la luminosité avec un accord parfait avec les résultats officiels de la surveillance de la luminosité ATLAS. Des contrôles de qualité ont été effectués afin d'assurer une performance optimale du calorimètre, capable de fournir une détermination de luminosité fiable et précise.

### ***Recherche des résonances $\bar{t}t$ dans l'état final lepton + jets fortement boosté dans les collisions proton-proton à $\sqrt{s} = 13$ TeV***

Une recherche de nouvelles résonances  $\bar{t}t$  est menée dans ce travail, en utilisant l'ensemble de données 2015 à partir des collisions proton-proton produites par le Large Hadron Collider (LHC) avec une énergie de faisceau de 13 TeV dans le centre de masse et avec une luminosité intégrée de  $3.2 \text{ fb}^{-1}$  recueillie par le détecteur ATLAS. La signature de l'état final recherché est caractérisée par la présence d'un électron ou d'un muon, d'un certain nombre de jets de hadrons et de l'énergie transverse manquante. La masse invariante des système  $\bar{t}t$  ( $m_{t\bar{t}}$ ) est la principale observable sur cette recherche, et est utilisée pour tester la compatibilité des données avec l'hypothèse MS seule. Pour la région à grand  $m_{t\bar{t}}$ , les quarks top sont produits avec une grande impulsion et leurs produits de désintégration soient agglomérés au sein du même jet. Dans cette région, la sous-structure des jets doit être utilisée pour identifier les paires résonnances  $\bar{t}t$ , scénario "boosted", tandis que pour de basses valeurs de  $m_{t\bar{t}}$ , les produits de désintégration des quark top sont bien séparés, scénario "resolved".

### *Recherche des résonances se désintégrant en paires de bosons WZ*

Grâce à une collaboration avec le groupe ATLAS du CEA de Saclay, le groupe marocain c'est impliqué dans la recherche des résonances se désintégrant en paires de bosons WZ dans les canaux leptoniques. L'étude a été évaluée en utilisant des données collectées par l'expérience ATLAS au CERN au cours des périodes 2015-2016 avec une luminosité intégrée de 36,1 fb<sup>-1</sup> correspondant à des collisions proton-proton à  $s=\sqrt{13}$  TeV d'énergie de centre de masse. Des limites supérieures du rapport de section efficace de la production de WZ multiplié par le taux d'embranchement d'une particule vecteur lourde produite soit par fusion entre quark et antiquark (qq), soit par fusion entre bosons vecteurs (VBF) ont été calculées. Des contraintes sont également obtenues sur la masse et les couplages d'un boson de Higgs chargé dans le modèle théorique de Georgi-Machacek, produit par fusion des bosons vecteurs. Les résultats pour qq annulation sont interprétés dans le contexte du modèle-A et du modèle-B des vecteurs triplets lourds (HVT), sur lesquels la limite supérieure est extraite dans un intervalle de confiance de 95%. Aucune déviation significative par rapport aux prévisions du modèle standard n'a été observée. Les masses inférieures à 2260 GeV peuvent être exclues pour le modèle-A et 2460 GeV pour le modèle-B. En ce qui concerne le mode de production VBF, des excès locaux par rapport à la prédiction du SM sont observés à une masse de résonance autour de 450 GeV pour les deux modèles théoriques HVT, et Georgi-Machacek, avec des écarts-types locaux de 2.9 et 3.1, respectivement.

### *Observation de la diffusion lumière par lumière ( $\gamma\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ )*

Le groupe Marocain a participé intensivement aussi à l'observation de la diffusion lumière par lumière ( $\gamma\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ ) dans les collisions d'ions lourds avec les données collectées par le détecteur ATLAS en 2018 correspondants à une luminosité totale de 1,2 nb<sup>-1</sup>. Le nombre d'événements observés est de 59 tandis que  $30 \pm 4$  événements de bruit de fond sont attendus. L'excès observé des événements sur le bruit de fond attendu ont une signification de 8,2 écarts types. La section efficace fiducielle mesurée est  $78 \pm 13$  (statistique)  $\pm 7$  (systématique)  $\pm 3$  (luminosité). Une deuxième analyse a été faite en utilisant les données de 2015 et 2018 correspondants à une luminosité totale de 2,2 nb<sup>-1</sup>. Le nombre d'événements observés est de 97 tandis que  $27 \pm 5$  événements de fond sont attendus. La sections efficaces fiducielle trouvée est  $126 \pm 19$  (stat.)  $\pm 17$  (syst.)  $\pm Z$  (lumi.). La mesure de la section efficace différentielle est également effectuée. La distribution de masse invariante des deux photons mesurés est utilisée pour rechercher des particules de type axion et fixer de nouvelles limites d'exclusion sur leur production en supposant une désintégration de 100% en photons.

### *Recherche des limites sur le rapport de branchement $BR(H \rightarrow \gamma\gamma D)$*

Avec les données complètes de Run-2 du LHC, le groupe marocain cherche à obtenir des limites sur le rapport de branchement  $BR(H \rightarrow \gamma\gamma D)$  du couplage du boson de Higgs à un photon du SM et une nouvelle particule: le photon «sombre» ( $\gamma D$ ) qui pourrait exister dans la matière noire. Cette mesure pourrait se traduire en sensibilité pour les modèles théoriques prédisant un  $\gamma D$  et tester leurs contraintes astrophysiques et cosmologiques. L'analyse de données de détecteur ATLAS nécessite des études approfondies utilisant

des simulation MC pour tous les processus physiques de bruit de fond afin de pouvoir les séparer du signal du  $\gamma D$ . Les ingrédients expérimentaux et théoriques validés, le travail actuel consiste à développer des algorithmes d'analyse statistiques, fondés sur les principes de «Machine Learning» pour extraire un possible signal provenant du processus  $H \rightarrow \gamma\gamma D$  et ainsi tester l'existence de  $\gamma D$ .

### ***Recherche de nouvelles résonances se désintégrant en paires de bosons WWW/WZ***

Une recherche de nouvelles résonances se désintégrant en paires de bosons WWW/WZ dans le canal semi-léptonique est en cours. Une première étude est publiée avec les données des Run 1 et Run 2. Le travail actuel s'intéresse au développement des outils nécessaires pour l'estimation des bruits de fonds pour les futurs Run de LHC.

### ***Étude de la Production de paires de bosons de Higgs neutres dans le canal $bbVV^*$***

**Implication dans la recherche du boson de Higgs dans son mode invisible**, cela par l'étude des combinaisons statistiques d'une telle recherche via sa désintégration en mode VBF (Vector Boson Fusion).

### ***La recherche de la résonance $Z'$ ,***

Un nouveau boson de Jauge lourd au-delà du Modèle Standard, dans un évènement à quatre quarks top et dans un état final totalement hadronique.

### ***La comparaison des résultats du «pseudotracking» et de la reconstruction standard (normal tracking)***

D'autre part, en termes d'analyse des données, la comparaison des résultats du «pseudotracking» et de la reconstruction standard (normal tracking) est en cours. À partir des graphiques de validation, il s'agit d'évaluer si les performances sont suffisamment proches pour utiliser le «pseudotracking» pour la généralisation de cette méthode à toutes les analyses physiques D'ATLAS. En cas de différences significatives, nous déterminons la cause et, si possible, mettre à jour le code du «pseudotracking» pour améliorer l'accord avec la reconstruction standard.

Une application directe de cette contribution est dédiée à l'étude de la super-symétrie (SUSY) dans ATLAS. Dans la mesure où les données sont jugées conformes au modèle standard, la recherche des limites à un niveau de confiance de 95% sur les masses des particules hypothétiques étudiées sont fixées pour les différents modèles considérés pour cette analyse.

### **c. Participation à la mise à niveau d'ATLAS**

Dans le cadre des études menées pour l'améliorations du détecteur ATLAS, le groupe marocain a participé à une étude qui concerne une mise à niveau du calorimètre à l'avant (FCal) d'ATLAS à haute luminosité prévue pour le HL-LHC, afin de réduire l'impact de la luminosité instantanée très élevée au LHC de phase-II. En collaboration avec le

groupe de physique des particules de l'institut royal de technologie de Stockholm, une étude du super-Calorimètre à l'avant (sFCal) en tant que proposition de remplacement du FCal à haute luminosité du LHC a été réalisée, en se basant sur la simulation de FCal et sFCal. Les résultats obtenus montrent que la résolution en énergie pour les électrons et les pions est légèrement plus dégradée dans le sFCal que dans le FCal en raison de la fraction d'échantillonnage qui donne une augmentation du terme constant dans le sFCal, d'un facteur de 1,12 pour les électrons et de 1,03 pour les pions. De plus, les résultats montrent que la méthode logarithmique fournit les meilleures corrections par rapport à l'interpolation linéaire en termes de résolution en position pour les deux calorimètres. En outre le sFCal dispose d'une résolution spatiale plus fine.

Une autre contribution concerne l'implication dans le calorimètre électromagnétique par l'amélioration et revitalisation des codes (ECAL) qui sont nécessaires pour suivre d'une manière automatique la production des plots qui couvrent la stabilité électronique dans des longues périodes cela facilitera la maintenance et traitement des mauvais canaux, ainsi que le développement des algorithmes nécessaires (au niveau d'Athena) pour étudier la symétrie de l'énergie reconstruite en ZeroBias et MinBias.

Toujours dans le cadre de la préparation de la phase 2 du programme de mise à niveau de ATLAS pour la future exploitation du LHC à haute luminosité (HL-LHC). La haute luminosité attendue représente un véritable défi pour tous les composants du détecteur ATLAS en raison de l'environnement de l'empilement, avec jusqu'à 200 interactions par croisement de faisceau. Cela produira un nombre record de particules, ce qui entraînera une forte occupation et des niveaux de rayonnement extrêmes dans la partie interne du détecteur. Le HGTD (High Granularity Timing Detector) est un détecteur à base de silicium hautement segmenté avec une très bonne résolution temporelle. Ses capteurs sont faits de la technologie des détecteurs d'avalanche à faible gain (LGAD) permettant une résolution temporelle d'environ 20-30 ps. Les chercheurs marocains ont pris en charge des parties de développement de ce nouveau détecteur en contribuant à des études de performance et la caractérisation de plusieurs capteurs silicium en utilisant différents modèles de lecture et différents taux d'irradiations. L'analyse des données, prises en 2018-2019 avec des faisceaux incidents de pions d'énergie entre 40GeV et 120GeV, a permis d'étudier la charge collectée pas les LGADs, la résolution temporelle par capteur et par tension de polarisation pour tester leurs performances dans des conditions réalistes.

L'analyse des tests en faisceau, les tests des cartes électroniques et leurs réponses aux signaux ainsi que l'implication dans le système de control du détecteur (DCS) sont aussi une partie du travail des chercheurs marocains.

Ces derniers efforts ont été consolidés dernièrement par l'adhésion de la fondation MAScIR (Moroccan Foundation for Advanced Science, Innovation and Research) au projet ATLAS. Le centre Digitalization & Microelectronics Smart Devices de MAScIR participera à la production d'une partie de la solution qui sera montée au niveau du détecteur HGTD d'ATLAS. Le centre MAScIR fera ainsi partie des 6 sites identifiés choisis pour cette phase finale pour la production et le contrôle de qualité de MAScIR sera en charge de produire, grâce à la plateforme technologique de la Fondation 16% du volume globale du HGTD.

Dans le projet «HGTD in ATLAS», les équipes marocaines se préparent à contribuer à l'amélioration du détecteur qui consiste à exploiter la dispersion temporelle des interactions pour faire la distinction entre des collisions produites très proches dans l'espace mais bien séparées dans le temps. Leur contribution se focalisera sur le «Redout electronics» de l'expérience. De point de vue informatique, vu la montée en demande du temps CPU pour la simulation et le traitement des données en vue de la reconstruction des événements ATLAS. Ils participeront à la préparation des nouvelles plateformes de simulation et d'analyse des données de l'expérience et cela en se basant sur de nouveaux concepts tel que les réseaux de neurones, le multithreading, la TBB de intel,

Les équipes se préparent pour participer au futur Runs (Run 3 et Run 4) avec le groupe egamma pour la préparation des algorithmes qui permettront une reconstruction des électrons (forward et central électrons). Cette reconstruction joue un rôle assez important pour plusieurs signatures physique à hautes luminosités.

Les équipes ATLAS-Maroc s'occupe d'une part de l'étalonnage du TileCal. Ceci consiste en l'étude de la réponse des cellules E1, E2, E3 et E4 du calorimètre à tuiles scintillantes intermédiaires de l'expérience ATLAS, en utilisant les muons issus des collisions proton-proton de l'expérience ATLAS pendant les dernières années de son fonctionnement. Cette étude va nous permettre d'avoir une vision précise sur l'uniformité des cellules du TileCal lors des nouvelles prises des données pour faire une analyse fine et précise de ces données.

Enfin, une participation est à souligner concernant le software du projet. La contribution récemment à un projet qui consiste à la migration du service du champ magnétique Atlas Magnetic Field Service (AMFS) aux nouvelles conditions de données pour l'accès Multi-Threading (MT). Le problème MT du service AMFS est qu'il est dépendant des conditions de données pour le courant du champ magnétique et pour un petit redimensionnement du champ qui varie en fonction du temps. Le modèle proposé pour la sécurité multithreading du « Field Services » consiste à déplacer le cache hors du Service. Le cache contient les facteurs d'échelle (SF) actuels et une zone de champ magnétique et fournit la fonction qui donne le champ et qui applique les SF actuels au champ de la zone. Un objet «Conditions object» est utilisé pour contenir les SFs actuels pour le solénoïde, le torride et le cache. Un algorithme de conditions est utilisé pour mettre à jour l'objet de condition, il ne fonctionne que lorsque les SF changent. En utilisant le contexte d'événement «Event Context», les clients doivent donner l'accès au cache correspondant à l'événement sur lequel ils travaillent et ils utiliseront simplement le cache pour accéder au champ magnétique et non plus via le service du champ magnétique. Le service de champ magnétique a été migré vers la version MT-safe, où le service est remplacé par des objets de conditions contenant la carte et le facteur d'échelle actuel qui peut varier en fonction du temps. Les clients ayant besoin du champ magnétique recevront désormais un cache avec le champ dans une zone, qui est mis à jour à partir de la carte si nécessaire.

#### d. Physique du Higgs théorique : contribution Marocaine.

La recherche en physique des particules a connu une intense activité ces dernières années, tant sur le plan théorique que sur le plan expérimental, l'accent portant sur l'établissement du phénomène de brisure de la symétrie électrofaible du SM ainsi que sur la recherche d'une nouvelle physique au-delà du SM. Grâce aux expériences CMS et ATLAS au CERN, on espère mieux comprendre l'épineux phénomène de brisure de la symétrie électrofaible dont le puzzle commence à être élucidé. Ainsi, après la découverte d'une particule scalaire qui ressemble au boson de Higgs prédit par le SM, et la mesure de certains de ses couplages aux différentes particules du SM, la question qui reste à résoudre est la mesure de l'auto-couplage de cette particule et voir si c'est compatible avec les prédictions du SM. La mesure de l'auto-couplage du boson de Higgs est primordiale afin de pouvoir reconstruire le potentiel scalaire du boson de Higgs responsable de la brisure spontanée de la symétrie électrofaible du SM. Les travaux de recherche des établissements universitaires marocains s'inscrivent pleinement dans cette ligne et ont pour but de contribuer par des études théoriques et phénoménologiques à l'interprétation des résultats expérimentaux qui seront obtenus par CMS et ATLAS et plus tard par le futur ILC (International Linear Collider). L'étude précise des propriétés de cette particule nous permettra de se prononcer sur l'origine de cette nouvelle particule :

- Est-ce que c'est le fameux boson de Higgs du SM?
- Est-ce que c'est un **boson de** Higgs d'une extension non triviale du SM comme le modèle super-symétrique?
- Est-ce que c'est un boson de Higgs d'un modèle avec secteur de Higgs étendu?

Récemment, après la découverte de la particule scalaire, les efforts des théoriciens se sont focalisés à apporter des éléments de réponse aux questions précédentes. Les chercheurs Marocains ont eux aussi contribué à cet effort soit dans le cadre Super-symétrique ou du secteur de Higgs étendus avec un doublet de Higgs et/ou avec un triplet de Higgs. Même avec tous ses efforts déployés il reste certes de nombreuses investigations à raffiner et à améliorer afin de pouvoir se prononcer de façon précise et non ambiguë sur la nature de cette particule scalaire.

Les enseignants chercheurs théoriciens marocains possèdent plusieurs expertises :

- Une expertise dans les études phénoménologiques en physique du Higgs du SM et au-delà du SM, y compris les scénarios super-symétriques et autres modèles à secteur de Higgs étendus comme le modèle avec triplet de Higgs, modèle avec doublet et singlet de Higgs
- Une expertise dans la physique du Higgs chargé qui serait un signal clair d'une physique au-delà du SM. Noter qu'à cet égard, nous avons été parmi les premiers à proposer le canal de désintégration «bosonic» du boson de Higgs chargé chose que nous comptons étudier et approfondir dans les modèles à secteur de Higgs étendu.

- Une expertise sur les techniques des corrections radiatives et de renormalisation dans le SM et au-delà du SM. Cette expertise en corrections radiatives serait d'une grande utilité lors de la tentative de réconciliation entre les prédictions théoriques et les mesures expérimentales.
- Une expertise dans le domaine informatique et la maîtrise des outils de physique des hautes énergies. Certains chercheurs ont récemment mis à disposition des fichiers de modèles complets pour le secteur de Higgs étendus à deux doublets de Higgs avec et sans violation explicite de CP ainsi que pour les modèles à triplets de Higgs (HTM), qui sont très utiles pour les calculs au premier ordre de perturbation pour le LHC et le futur collisionneur électron-positon.

Certains enseignants chercheurs ont également travaillé sur : les contraintes de Veltman, les contraintes des mesures de précisions électrofaibles sur le secteur scalaire des modèles de Higgs étendus et sur le calcul des courants neutres changeant la saveur (FCNC) dans diverses extensions du SM, ainsi que sur la phénoménologie des quarks vecteurs lourds en présence d'un secteur de Higgs étendus.

#### **e. Participation à KM3NeT**

##### *Recherche de monopoles magnétiques*

Coté KM3NeT, il faut signaler la participation marocaine à la recherche de monopoles magnétiques avec le télescope à neutrinos ANTARES, prédécesseur de KM3NeT. Ces particules hypothétiques introduites par Dirac en 1931 ont une charge magnétique unique, et leur mise en évidence peut expliquer la quantification de la charge électrique.

Le passage des monopoles dans un milieu transparent peut donner lieu à l'émission d'une lumière à base de l'effet Cherenkov, et cette lumière peut être détectée par un télescope à neutrinos comme ANTARES. Un lot de cinq ans de données collectées par le télescope ANTARES a été analysé. Aucun signal de monopoles magnétiques n'a été détecté au-delà du bruit de fond atmosphérique, et de nouvelles limites sur le flux ont été trouvées pour une large gamme de vitesse des monopoles allant de  $0.57c$  jusqu'à  $0.99c$ , avec  $c$  étant la vitesse de la lumière dans le vide.

##### *Participation à la construction des DOM de KM3NeT*

Le 7 février 2018, lors de la réunion de collaboration KM3NeT à Rabat, une convention a été signée entre le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique du Maroc, l'Université Mohammed V de Rabat, l'Université Mohamed premier d'Oujda, Université Cadi Ayyed de Marrakech et la Collaboration KM3NeT pour la mise en place d'une ligne de production de modules optiques pour la construction des télescopes KM3NeT en Méditerranée.

Deux sites sont déjà prêts aux facultés des sciences de Rabat et Oujda. La contribution des équipes marocaines va porter sur trois tâches. Premièrement, l'installation d'une chaîne de production pour assurer la fabrication des modules optiques du futur télescope. Par la suite, sera effectuée l'opération d'assemblage de ces modules avec la réalisation de l'ensemble des tests nécessaires pour s'assurer de leur bon fonctionnement en tenant en considération des contraintes du site qui sera situé à une profondeur de près de 3.000 mètres en Méditerranée au large de la Sicile. Une fois tout ce travail réalisé, les équipes marocaines vont participer à l'insertion de quelques lignes de détection du futur télescope. Ce projet prévoit un total de 6.000 lignes de détection. La partie marocaine est chargée de produire et de mettre en place environ un tiers de ces lignes. Les activités de R&D au sein de l'Université marocaine sont diversifiées et incluent des aspects scientifiques et techniques tels que l'électronique, l'étude des milieux marins (océanographie, biologie marine, etc...), la physique des neutrinos, la géophysique, l'instrumentation, le grid-computing et big data, le transfert et l'analyse des données.

## Conclusion

Les projets dans ce domaine exigent souvent d'immenses infrastructures coûteuses qu'aucun pays ne peut financer seul. Rares sont les pays qui peuvent acquérir un Grand collisionneur de hadrons. La collaboration devient indispensable pour avoir les moyens de faire avancer la science.

Les chercheurs dans ce domaine ont donc mis au point une culture de collaboration unique et mènent leurs travaux dans le monde entier. Cette collaboration entre membres du milieu scientifique crée un terreau extrêmement fertile pour la création d'idées. Les nouvelles idées naissent des échanges avec des gens de différents horizons. Cette interaction nous pousse à voir les choses différemment et à établir des liens qui nous échappaient jusque-là.

Ces collaborations internationales nous ont permis d'établir plusieurs coopérations bilatérales.

C'est également un tremplin pour accéder à des niveaux supérieurs de la recherche scientifique et technique, tout en bénéficiant des transferts technologiques et des savoirs pointus.

La recherche fondamentale en physique des particules repousse les limites de notre connaissance de l'Univers, catalyse des développements technologiques innovants. Ses détecteurs nécessitent des technologies et des performances qui dépassent le savoir-faire industriel disponible.

Les trois piliers technologiques de la physique des particules et en l'astroparticules-accélérateurs, détecteurs et outils informatiques - ont tous trouvé leur chemin dans le domaine médical. Les accélérateurs sont couramment utilisés dans les hôpitaux pour la radiothérapie conventionnelle du cancer à l'aide de rayons X et d'électrons. Environ 60 centres dans le monde traitent les tumeurs avec une technique avancée de radiothérapie connue sous le nom de thérapie hadronique, qui utilise des faisceaux de protons et d'autres

particules de hadrons. Le développement de conceptions d'accélérateurs innovantes est crucial pour une thérapie hadronique abordable, car les accélérateurs utilisés aujourd'hui sont grands et coûteux. Des accélérateurs sont également nécessaires pour la production de radio-isotopes, qui sont utilisés en médecine nucléaire pour le diagnostic et le traitement.

La recherche en physique subatomique et cosmologie pousse les détecteurs de particules et l'électronique de lecture au-delà de l'état de l'art pour atteindre la résolution, la vitesse et la granularité nécessaires. Ces progrès ont augmenté les nouveaux développements en imagerie médicale comme les nouveaux détecteurs et les nouveaux outils d'imagerie. Celles-ci ne sont pas seulement liées au diagnostic, mais aussi à la thérapie, car des détecteurs plus rapides et plus sensibles peuvent permettre une surveillance in vivo pendant l'irradiation. Les détecteurs nécessitent des technologies et des performances qui dépassent le savoir-faire industriel disponible.

Côté informatique, les grilles de calcul sont des outils idéaux pour un large éventail de domaines biomédicaux, du dépistage des candidats médicaments à l'analyse d'images, en passant par le partage et le traitement des dossiers de santé.

Les outils de simulation développés pour la physique des particules sont couramment utilisés dans un large éventail d'applications médicales et industrielles, car ils peuvent modéliser avec précision les géométries et les interactions des particules avec la matière.

Un axe majeur de développement de cette technique est d'améliorer les performances de la tomographie dont la résolution intrinsèque de la machine (directement liée à la géométrie du système, la taille et le type du cristal, la collecte de la lumière et de l'électronique nécessaire au traitement des signaux, etc.) et enfin la technique de reconstruction des données, nécessaire à l'obtention des images. Plusieurs chercheurs marocains travaillent actuellement autour de ces sujets. La recherche en physique médicale est connue et développée depuis dans plusieurs universités au Maroc.

En 2007, nous avons créé le premier Master de Physique Médicale. C'est important d'avoir des professionnels qualifiés dans ce domaine. Actuellement, les centres de radiothérapie et de médecine nucléaire couvrent toutes les régions du Maroc et sans nos jeunes physiciens médicaux, il serait impossible d'ouvrir ces centres.

L'impact de cette contribution est certainement positif du fait qu'elle va permettre la formation des doctorants de nos universités et renforcer leur savoir-faire dans certaines disciplines scientifiques de pointe avec une opportunité de s'ouvrir davantage sur l'international. Cette formation par la recherche leur permettra d'intégrer des entreprises publiques ou privées.

Les chercheurs marocains vont maîtriser des outils informatiques et d'analyse des données et acquérir des compétences leur permettant de contribuer à la mise à niveau de notre système de production. Ils côtoient des compétences reconnues à l'échelle International et disposent des derniers développements en physique expérimentale et en informatique.

## Références

1. François Englert et Robert Brout, «*Broken Symmetry and the Mass of Gauge Vector Mesons*», *Physical Review Letters*, vol. 13, n° 9, 1964, p. 321-323 (DOI [10.1103/PhysRevLett.13.321](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.13.321)).
2. Peter W. Higgs, «*Broken Symmetries and the Masses of Gauge Bosons*», *Physical Review Letters*, vol. 13, no 16, 1964, p. 508-509 (DOI [10.1103/PhysRevLett.13.508](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.13.508)).
3. Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC, G Aad et All., *Physics Letters B* 716 (1), 1-29.
4. The ATLAS experiment at the CERN large hadron collider, G Aad et All., *Jinst* 3, S08003.
5. Combined Measurement of the Higgs Boson Mass in Collisions at 7 and 8TeV with the ATLAS and CMS Experiments, G Aad et All, *Physical review letters* 114 (19), 191803.
6. Letter of intent for KM3NeT 2.0, KM3Net Collaboration, Jan 27, 2016, 130 pages, Published in *J. Phys.G* 43 (2016) 8, 084001
7. Search for invisible Higgs boson decays with vector boson fusion signatures with the ATLAS detector using an integrated luminosity of 139 fb<sup>-1</sup> ATLAS-CONF-2020-008. ATLAS Collaboration. April 2020.
8. "Reinterpretation of LHC Results for New Physics: Status and Recommendations after Run 2", DOI:10.21468/SciPostPhys.9.2.022, arXiv:2003.07868. *SciPost Phys.* 9, 022 (2020).
9. "Beyond the Standard Model in Vector Boson Scattering Signatures", arXiv:2005.09889, (2020)
10. ATLAS data quality operations and performance for 2015–2018 data-taking. ATLAS Collaboration. *INST* 15 (2020) 04, P04003. e-Print:1911.04632
11. AEDGE: Atomic Experiment for Dark Matter and Gravity Exploration in Space. Yousef Abou El-Neaj et al. *EPJ Quant. Technol.* 7 (2020) 6. e-Print: 1908.00802
12. "Searches for heavy resonances decaying to top quarks with the ATLAS detector", *Eur. Phys. J. C* volume 78, Article number: 565 (2018) 2018.15
13. "Search for heavy particles decaying into top-quark pairs using lepton-plus-jets events in proton–proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV with the ATLAS detector", *Eur. Phys. J. C* (2018) 78 :565
14. "Search for heavy particles decaying to pairs of highly-boosted top quarks using lepton-plus-jets events in proton–proton collisions at using  $\sqrt{s} = 13$  TeV with the ATLAS detector". ATLAS-CONF-2016-014. July 2017.
15. "How to keep the Grid full and working with ATLAS production and physics jobs". *J. of Phys. : Conf. Series* 898 (2017) 052001.

16. "Computing shifts to monitor ATLAS distributed computing infrastructure and operations" J. Phys. : Conf. Ser. 898 (2017) 092004.
17. "Higgs portal vector dark matter interpretation: review of Effective Field Theory approach and ultraviolet complete models" Is still under reviewed
18. Observation of Light-by-Light Scattering in Ultraperipheral Pb+Pb Collisions with the ATLAS Detector, G. Aad et al., Phys. Rev. Lett. 123 (2019) 052001.
19. Search for resonant WZ production in the fully leptonic state in proton-proton collisions at  $\sqrt{s}=13$  TeV with ATLAS detector, A. Albert et al., Phys. Lett. B 787 (2018) 68.
20. Search for relativistic magnetic monopoles with five years of the ANTARES detector data, A. Albert et al., JHEP 07 (2017) 54.
21. [https://inspirehep.net/literature?sort=mostrecent&size=25&page=1&q=cherkaoui%20El%20Moursli%20&earliest\\_date=2005--2020&doc\\_type=published](https://inspirehep.net/literature?sort=mostrecent&size=25&page=1&q=cherkaoui%20El%20Moursli%20&earliest_date=2005--2020&doc_type=published)
22. A. Arhrib, R. Benbrik, M. ElKacimi, L. Rahili and S. Semlali, "Extended Higgs sector of 2HDM with real singlet facing LHC data", Eur. Phys. J. C80 (2020) no.1, 13; doi:10.1140/epjc/s10052-019-7472-2.
23. B.A. Ouazghour, A. Arhrib, R. Benbrik, M. Chabab and L. Rahili, Theory and phenomenology of a two-Higgs-doublet type-II seesaw model at the LHC run 2", Phys.Rev.D100 (2019) no.3, 035031; doi:10.1103/PhysRevD.100.035031
24. A. Arhrib, R. Benbrik, H. Harouiz, S. Moretti and A. Rouchad, "A Guidebook to Hunting Charged Higgs Bosons at the LHC", Published in: Front. Phys., 10 March 2020; doi:10.3389/fphy.2020.00039;
25. A. Arhrib, R. Benbrik and S. Moretti "Bosonic Decays of Charged Higgs Bosons in a 2HDM Type-I", Eur. Phys. J. C77 (2017) no.9, 621; doi:10.1140/epjc/s10052-017-5197-7.
26. A. Arhrib, R. Benbrik, J. ElFalaki and W. Hollik, "Triple Higgs coupling effect on  $h \rightarrow b\bar{b}$  and  $h \rightarrow \tau^+\tau^-$  in the 2HDM", Phys. Lett. B774 (2017) 195; doi:10.1016/j.physletb.2017.09.065.
27. A. Arhrib, R. Benbrik, M. Chabab, G. Moulataka, M.C. Peyranere, L. Rahili and J. Ramadan, "The Higgs Potential in the Type II Seesaw Model", Phys. Rev. D84 (2011) 095005; doi:10.1103/PhysRevD.84.095005.
28. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2013/press-release/>
29. [http:// www.atlas.ch](http://www.atlas.ch)
30. <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>
31. <https://www.km3net.org/about-km3net/related-projects/>
32. <http://www.cloudcomputinginfrastructure.net/grid-computing-infrastructure/lhc-grid-fest-virtual-tour-wlwg>.

## Remerciements

Nos remerciements vont pour leur appui constant, au Ministère de l'Education Nationale, de la Formation professionnelle, de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique, au Centre National pour la Recherche Scientifique et Technique (CNRST) et à l'Académie Hassan II des Sciences et Techniques.

Nos remerciements vont également au CERN, CNRS français, l'IN2P3 France, LPSC France, APC France, IFIC – UV Espagne, KTH Suède, ICTP Italie, la Fondation Partage du Savoir.

**SÉANCE III**  
**PHASES TOPOLOGIQUES**  
**ET TRANSITIONS QUANTIQUES**



# MATIERE TOPOLOGIQUE : CONCEPTS ET APPLICATIONS

*Lalla Btissam DRISSI*<sup>1,2,3</sup>

*1- LPHE, Modeling & Simulations, Faculty of Science,  
Mohammed V University, Rabat, Morocco*

*2- Collège des sciences physiques et chimiques,  
Académie Hassan II des Sciences et Techniques, Rabat, Morocco*

*3- CPM, Centre of Physics and Mathematics,  
Faculty of Science, Mohammed V University, Rabat, Morocco*

## Abstract

Dans cette présentation, nous introduisons la phase topologique standard de la matière, comportant entre autres les semi-métaux de Dirac et Weyl, les isolants de Chern et les supraconducteurs topologiques. Ensuite, nous abordons les toutes nouvelles phases topologiques d'ordre supérieur (PTOS). Ces nouvelles phases concernent des matériaux avec des bords non réguliers; elles sont caractérisées par des états de volume et de bords gappés; mais manifestent des états topologiquement protégés en codimension supérieure ou égale à 2. Nous présentons quelques exemples de ces phases et nous illustrons leur réalisation pour des matériaux prototypiques de dimensions 2 et 3. Finalement, nous détaillons la première preuve expérimentale de ces phases avec un accent particulier porté sur le rôle clé que jouerait ce type de phases topologiques pour les technologies quantiques.

**Mots clefs:** Matière de Dirac, phase topologique standard, tableau périodique de Altland-Zirnbauer, matériaux topologiques d'ordre supérieur.

## 1 Introduction

Au cours des deux dernières décennies, des percées théoriques et appliquées spectaculaires ont été obtenues en physique de la matière condensée. Une partie de ces progrès est essentiellement due à l'implémentation dans la modélisation théorique et la simulation numérique de nouveaux concepts de géométrie d'espace et de topologie de la théorie

quantique des champs (TQC<sub>d</sub>). Dans ce cadre, des notions jadis étrange en physique de matière condensée, comme "matière de Dirac" [1] et "matière de Chern", ont permis des interprétations de propriétés physiques exotiques de matériaux. Ceci est le cas par exemple des états quantiques sans gap du graphène et qui se trouvent être associées avec le cône de Dirac; ce dernier à un caractère relativiste qui implique une énergie cinétique  $E$  des états proportionnel à l'impulsion; soit  $E = v_F p$  avec  $v_F$  la vitesse de Fermi jouant un rôle similaire à celui de la célérité  $c$  de la lumière. C'est aussi le cas de la quantification de la conductivité  $\sigma_H = \nu \frac{e^2}{h}$  du système de Hall bi-dimensionnel [2] dont l'effet Hall quantique entier, correspondant à un facteur de remplissage  $\nu = n \in \mathbb{N}$ , est remarquablement décrit par la topologie de bande basée sur la phase de Berry caractérisée par l'invariant topologique de Chern [3, 4].

Plusieurs avancées théoriques de modélisation et de simulation numériques ont été obtenues et des applications technologiques inédites ont été réalisées ou sont en cours suite à l'usage de la matière de Dirac et des signatures topologiques entre autres. Ces développements ont ouvert une fenêtre sur une nouvelle ère allant au-delà de modèles non relativistes typiques des phénomènes critiques comme le modèle Landau-Ginzburg, le modèle Ising, le modèle Heisenberg, le modèle Hubbard, le modèle Potts, etc. Ces avancées trouvent aussi leurs fondements théoriques dans plusieurs prédictions de la TQC<sub>d</sub>, qui est un cadre théorique performant unifiant la mécanique quantique et la relativité, offrant par conséquent un puissant outil pour l'étude des états de la matière de Dirac et son interaction avec le rayonnement.

Notons au passage que les succès de la TQC<sub>d</sub> relativiste et sa version topologique sont nombreux. Pour la première, nous citons le modèle standard des particules élémentaires à très haute énergies (d=1+3) ayant prédit l'existence de la particule de Higgs; nous donnons aussi les récents développements en physique du graphène (d=1+2) dont certains aspects seront commentés dans cette présentation [8]. Pour la QFT topologique, nous mentionnons tout particulièrement la théorie de jauge de Chern- Simons à 3 dimensions qui se trouve derrière la découverte de plusieurs phases topologiques de la matière y compris une interprétation topologique de l'effet Hall quantique fractionnaire [9, 10] avec un facteur de remplissage  $\nu = \frac{1}{2n+1}$ .

Alors que les propriétés physiques des matériaux à l'échelle atomique ont été pour longtemps admises comme un domaine sans partage de la mécanique quantique non relativiste et du spin de l'électron [11], la découverte du graphène en 2004 a complètement changé la donne puisque ses propriétés électroniques ont un comportement quasi-relativiste. Cette caractéristique fondamentale de la matière de Dirac à 2D, dont l'existence n'a jamais été soupçonnée avant 2004, a remis en cause d'anciennes hypothèses, et a ouvert la voie pour un grand chantier de recherche sur le graphène et ses homologues à l'exemple du silicène, du germanène et de leurs analogues [12–15]. Après cette grande percée en sciences des

matériaux à 2D, d'autres découvertes spectaculaires ont vu le jour; à titre d'exemples nous citons l'effet Hall de spin [17], qui est inspiré de l'effet Hall anormal [18], et la chaîne de Kitaev [19]. Ces systèmes constituent les premières phases topologiques découvertes; ils seront commentés davantage dans la suite.

Focussant sur le cas du graphène pur et ses homologues, il est intéressant de souligner que leurs propriétés électroniques sont adéquatement décrites par le modèle des liaisons fortes à 2D qui modélise les états quantiques du réseau de nid-d'abeille et les interactions entre les sites proches voisins en termes des sauts des électrons/trous du crystal. Ce modèle quantique a aussi une généralisation aux réseaux 3D dont les propriétés physiques sont codées par des symétries discrètes. Les empilements de feuilles de graphène, les super-réseaux de Moiré et les hétérostructures sont des exemples parmi d'autres qui ont révélés des propriétés physiques très remarquables bien décrites par la TQC à deux dimensions. Concernant les structures hexagonales 2D du type graphène, des symétries cachées du réseau ont été également exhibées dans [1] ou il a été également montré qu'elles gouvernent la propagation des ondes de matière dans le graphène. Ces symétries donnent aussi des informations sur les corrélations électroniques [5,6], et sur les propriétés de transport des modes associés [7,16].

Dans ce qui suit, nous décrivons quelques aspects des phases topologiques de la matière en sciences des matériaux. Dans un premier temps, nous fixons notre attention sur la phase topologique dite standard allant avec la correspondance volume/surface. Ensuite, nous décrivons des récents développements dans cette direction; en particulier la matière topologique d'ordre supérieur. Nous complétons cette étude par des matériaux topologiques d'ordre 2 et 3.

## 2 Phase topologique standard

Dans la phase topologique de la matière, les propriétés quantiques des bords des matériaux sont étroitement liés aux aspects topologiques du volume. Parmi les phases les plus étudiées, nous citons le système Hall quantique [2] et l'effet Hall quantique de spin déclenché par un couplage spin-orbite fort [17]. En parallèle, une nouvelle classe de matériaux quantiques, ayant des états protégés par des symétries, a été identifiée; les isolants topologiques constituent le premier groupe de cette famille. En général, les isolants sont classés selon la topologie de leurs structures de bande: les isolants conventionnels présentent un écart d'énergie fini séparant les bandes de conduction et de valence. L'inversion des bandes du volume sous l'effet d'un fort couplage spin-orbite (CSO) conduit à un isolant topologique (IT) caractérisé par des états de surface métalliques qu'on observe dans la structure de bande du matériau. Ces états de surface présentent généralement une dispersion de type cône de Dirac. Les ITs ont été observés dans de nombreux matériaux

tridimensionnels tel que HgTe et Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. A 2D, les ITs sont des isolants de Hall quantique de spin. Ils sont caractérisés par un gap isolant dans le volume et des canaux conducteurs sans rétrodiffusion sur les bords, tel que chaque bord contribue à une conductance quantifiée de  $2e^2/h$  [20]. Parmi les premiers isolants topologiques bidimensionnels prédits, nous citons le graphène, dont l'observation expérimentale constitue un grand défi à cause du très faible gap non trivial [21]. Au contraire, le stanene, constitué d'atomes plus lourds, possède un couplage spin-orbite très important [22]. À basse température, ce couplage induit une énergie de gap importante accompagnée d'une inversion de la structure de bande convertissant ainsi les semi-métaux à des isolants dont des états de bord hélicoïdal résident aux limites. Semblables aux ITs, les états de surface topologiques existent également à la

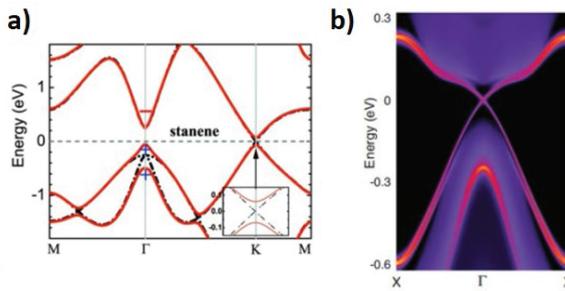


Figure 1: Structure de bande de l'isolant topologique 2D stanene (a) avec/sans CSO et (b) avec un accent sur les états de bord.

surface de nombreux semi-métaux (SM) tel que les semi-métaux de Weyl. Ils sont identifiés par les arcs topologiques de Fermi à la surface ainsi que les effets magnétiques chiraux dans le volume. De plus, leur présence nécessite la rupture de la symétrie d'inversion de temps ou de la symétrie d'inversion du réseau. Lorsque ces deux symétries coexistent, une paire de points de Weyl dégénérés sera identifié, menant à une autre phase topologique: le semi-métal de Dirac qui correspond à deux copies de semi-métaux de Weyl. Dans ces semi-métaux topologiques, le CSO entraîne un gap dans les bandes du volume, sauf aux points de Weyl ou Dirac où la dispersion est linéaire. Ainsi, toutes les bandes sont doublement dégénérées dans les SM de Dirac, tandis que dans un SM de Weyl, la dégénérescence est levée en raison de la rupture de la symétrie d'inversion ou de la symétrie d'inversion du temps ou des deux. Plusieurs matériaux, tel que Y<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> et HgCr<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> ont été proposés comme SMW [23, 24] alors que Na<sub>3</sub>Bi et Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> sont des SMD [25]. La première observation expérimentale des arcs de Fermi a été réalisée dans TaAs, TaP, NbAs, et NbP en utilisant Spectroscopie photoélectronique résolue en angle (ARPES) [26].

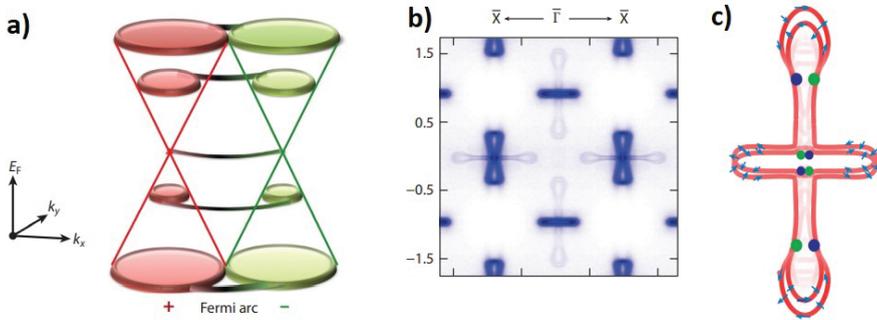


Figure 2: a) Les arcs de Fermi et la paire de cônes de Weyl de chiralité +/- représentée dans la structure de bande, b) Les arcs de Fermi obtenus à partir de ARPES, c) la surface de Fermi avec les deux têtes de cuillère qui correspondent aux arcs de Fermi.

Les concepts topologiques s'appliquent aussi aux supraconducteurs et aux superfluides. Dans ce cadre, les états quantiques sont entièrement gappés dans le volume, mais présentent des modes conducteurs à gap nul sur leurs surfaces. Contrairement aux isolants topologiques, les excitations de surface des supraconducteurs topologiques ne sont ni des électrons ni des trous, mais ce sont des quasiparticules de Bogoliubov. Ces dernières sont définies comme des superpositions cohérentes d'excitations d'électrons et de trous. Par ailleurs, la symétrie particules-trous des supraconducteurs permet aux quasi-particules de Bogoliubov à énergie zéro de contenir des parties égales d'excitations d'électrons et de trous, et être ainsi caractérisée par les propriétés des particules de Majorana. Notons que l'abondance d'exemples des isolants topologiques observés ou prédits, est quasi absente pour les supraconducteurs topologiques qui se font rares à cause de la symétrie d'appariement qui est nécessaire pour un état topologiquement nontrivial [27]. Ceci n'empêche les recherches intenses à ce sujet, en raison de leurs états de surface de Majorana protégés, qui pourraient potentiellement être utilisés comme éléments de base dans la fabrication des ordinateurs quantiques.

Un classement plus large de phases topologiques a été établie dans le tableau périodique d'Altland-Zirnbauer (AZ) qui est basé sur la correspondance entre les invariants topologiques définis dans le volume et les états gappés qui surviennent sur les surfaces [28]. La stabilité de ces états repose sur la présence de symétries locales, notamment le renversement du temps, la conjugaison de charge et la symétrie chirale. La combinaison de ces symétries a généré dix classes de symétrie (AZ) [29]. Depuis cette percée, le concept de structures de bande topologiques non triviales a été étendu aux matériaux pour inclure les phases topologiques cristallines dans lesquels d'autres types de symétries protègent les modes de surface tel que les symétries du réseau.

### 3 Phases topologiques d'ordre supérieur

La récente découverte d'une nouvelle famille de phase topologique a enrichi les propriétés exotiques intrinsèques de la matière quantique [30]. Pour les systèmes de dimension  $d$ , avec  $d = 3$  ou 2 dimensions, la phase topologique d'ordre  $n$  se caractérise par une correspondance  $d/(d - n)$  où  $1 < n < d$ . Dans cette situation, les états topologiques existent le long des bords de dimension  $(d - n)$  qui est 2 ou 3 dimensions plus petite que  $d$  (la dimension du volume). Il découle que cette correspondance  $d/(d - n)$  va au delà de la correspondance conventionnelle volume/surface [ $d/(d - 1)$ ] de la phase topologique standard qui apparait comme une phase topologique d'ordre 1.

Dans la famille des PTOS, les états de bords de dim  $d - n$  sont de gap nul, alors que les modes du volume sont gappés pour les isolants et les supraconducteurs topologiques d'ordre  $n$ . Par ailleurs, quelque soit le type de la phase topologique, les états de bords sont protégés par des symmétries discrètes et non locales telles que la réflexion et l'inversion, la rotation, et leur combinaison. Plus précisément, à 2 dimensions, les états de bords de gap nul sont topologiquement protégés aux coins de la matière polygonale, au détriment des modes

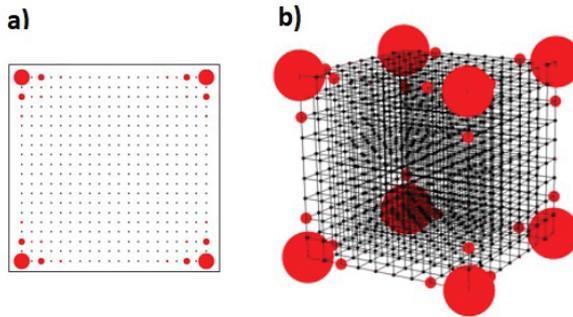


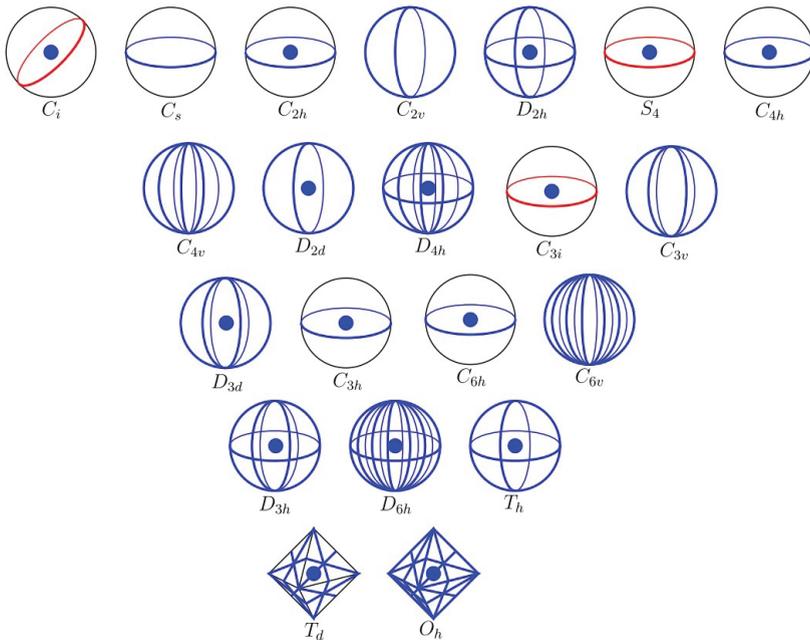
Figure 3: La densité totale des (a) quatre états de coins pour un réseau carré de taille  $20 \times 20$ , et (b) 8 états de coins pour un réseau cubique de taille  $10 \times 10$ .

gappés qui occupent la surface et la bordure. Dans les systèmes tridimensionnels, deux possibilités se présentent: (i) PT d'ordre 2 où les modes d'énergie zéro sont seulement sur les charnières qui correspondent aux murs de domaine à l'intersection de deux bords [31] et (ii) PT d'ordre 3 avec des états de volume, surfaces et charnières sont tous gappés, à l'exception de ceux des coins qui n'ont pas de gap.

Pour le cas des isolants topologiques d'ordre supérieur, deux classifications préliminaires ont été montées en utilisant deux approches complémentaires tenant compte (i) des bords [32] et (ii) du volume [33]. Ensuite, ces classifications furent raffinées dans [34] en employant une méthode algébrique qui n'exige en aucun cas l'analyse de chaque classe de symétrie en détail. Le calcul de l'homologie-K de l'espace réel, a permis une autre classification topologique des isolants cristallins (non) magnétiques invariants par la symétrie du groupe de points [35].

Dans les phases topologiques d'ordre supérieur, la présence et la robustesse des modes des bords dépendent de manière très significative de la façon dont les symétries transforment les degrés de liberté entre les surfaces voisines. Cette transformation des surfaces voisines est codées par certains invariants topologiques définis dans le volume du modèle étudiée. Les boucles de Wilson fournissent une formulation moderne des moments quadripolaires et octupolaires électriques et déterminent les conditions nécessaires pour que les moments multipolaires soient des observables électromagnétiques topologiquement quantifiés [36]. Le centre Wannier a permis de construire des états topologiques de charge fractionnaire  $1/4$

Figure 4: Nontrivial higher-order topological states of spinful fermions under nonmagnetic point groups. Blue and red objects represent the  $\mathbb{Z}^m$  and  $\mathbb{Z}_2^n$ .



aux coins du réseau pyrochlore [37]. La polarisation dipolaire d'enchevêtrement, quantifiée par les symétries de réflexion, décrit la phase topologique pour les quadrupoles [38]. La phase de Berry quantifiée, qui est topologiquement stable pour les interactions electron-electron, garantit un gap non nul et caractérise différentes phases TOS pour des systèmes de dim 3 et 2 [39]. La signature topologique, reportée dans [40], est un autre paramètre clé qui établit la correspondance volume/bord pour PT d'ordre 3.

## 4 Matériaux topologiques d'ordre 2 et 3

Rappelons que la topologie d'ordre supérieur ne repose pas nécessairement sur un réseau régulier sous-jacent, mais elle peut également se manifester dans les quasicristaux invariants par certaines symétries spatiales [41]. Pour les matériaux 3D, l'existence de modes de charnière fut constatée pour la première fois dans le bismuth par l'appui de deux techniques expérimentales complémentaires, notamment la spectroscopie à effet tunnel, qui a sondé les signatures de la symétrie rotationnelle des états unidimensionnels situés sur les cotés de la surface cristalline, ainsi que l'interféromètre de Josephson, qui a permis de démontrer la contribution topologique universelle de ces états au transport électronique [42]. Des états hélicoïdaux de charnière sont détectés, en utilisant microscope à effet tunnel et lithographie à faisceau d'électrons, dans un câble coaxial topologique SnTe [43].

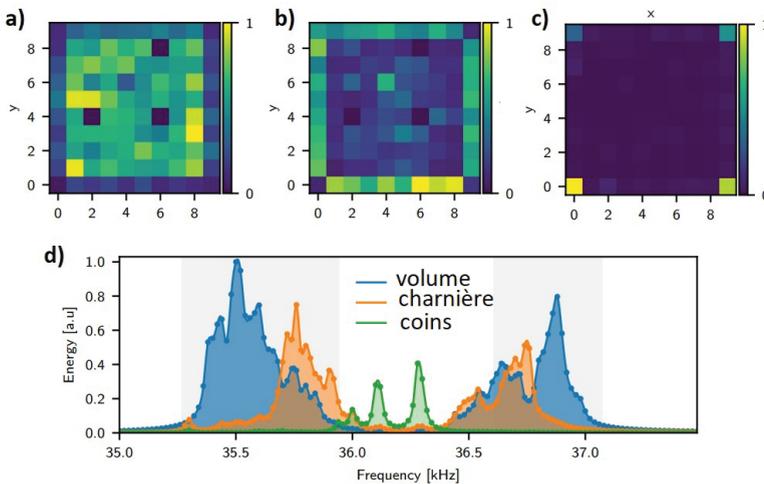


Figure 5: Poids des modes identifiant trois régions de fréquences où les modes associés au (a) volume, (b) charnière et (c) coins sont dominants. (d) Spectre montrant au milieu du gap un fort pic correspondant aux coins pour l'isolant topologique quadrupole phononique.

Par ailleurs, des modes de coin ont également été observés expérimentalement dans quelques métamatériaux. Dans le réseau phononique, les mesures d'un isolant topologique quadrupole ont été établies. De plus, la physique du volume, des cotés et des coins fut caractérisée expérimentalement pour un métamatériau mécanique révélant des états de cotés gappés et des états de coins (in-gap) [44]. Un réseau électronique conçu en manipulant des molécules de monoxyde de carbone sur une surface de Cu(111) à l'aide d'un microscope tunnel à balayage [45]. Les états de coin invariants par une symétrie chirale conduisent à une robustesse importante contre les perturbations. Dans les circuits micro-onde, les mesures spectroscopiques ont identifié des états de coin protégés par la topologie du volume de tout désordre et déformations [46].

**Acknowledgement 1:** *L. B. Drissi remercie le collège des sciences physiques et chimiques de l'académie Hassan II des sciences et techniques et le comité d'organisation du workshop national "Physique quantique et ses applications" qui s'est tenu en ligne les 08 et 09 Octobre 2020.*

## References

- [1] L. B. Drissi, E.H. Saidi, M. Bousmina, Nucl. Phys. B, Volume 829, Issue 3, (2010).
- [2] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Reviews of Modern Physics 82, 3045 (2010).
- [3] M. Onoda and N. Nagaosa, J. Phys. Soc. Japan, 71 :19, 1, 2002.
- [4] M. Onoda and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. , 90(20): 206601, 2003.
- [5] T. Kimura and T. Misumi, Prog. Theor. Phys. 123 (2010) 63–78 523–533.56.
- [6] L. B. Drissi, E. H. Saidi and M. Bousmina, Phys. Rev. D 84 014504 (2011).
- [7] R. Jackiw, A.I. Milstein, S.-Y. Pi, I.S. Terekhov, Phys. Rev. B 80 (2009) 033413.
- [8] L. B. Drissi, E.H. Saidi, M. Bousmina, Journal of Mathematical Physics 52 (02) (2011) 022306.
- [9] R.Ahl Laamaraa, L.B.Drissi, E.H.Saidi, Nuclear Physics B, Volume 743, 2006, Pages 333-353
- [10] R.Ahl Laamaraa, L.B.Drissi, E.H.Saidi, Nuclear Physics B, Volume 749, 2006, Pages 206-224.
- [11] C. Kittel, Introduction to solid state physics, United Kingdom: N. p., 1976.

- [12] L. B. Drissi, E.H. Saidi, M. Bousmina, O. Fassi-Fehri, *J. Phys: Cond. Matter* 24 (2012) 485502.
- [13] L. B. Drissi, K. Sadki, M.H. Kourra, M. Bousmina, *Journal of Applied Physics* 123, 185106 (2018)
- [14] L. B. Drissi, F. Z. Ramadan, E.H. Saidi, M. Bousmina, O. Fassi-Fehri, *Journal of the Phys Soc Jpn* 82 (2013) 104711
- [15] L. B. Drissi, K. Sadki, F. El Yahyaoui, E.H. Saidi, M. Bousmina, O. Fassi-Fehri, *Computational Materials Science* 96 (165), (2015).
- [16] L. B. Drissi, E.H. Saidi, Dirac Zero Modes in Hyperdiamond Model, *Phys. Rev. D* 84, 014509, (2011).
- [17] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* 95, 146802, (2005).
- [18] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* , 61(18) 2015, 1988.
- [19] A. Jason; *Reports on progress in physics* 75, p. 076501 (2012),
- [20] X.-L. Qi, S.-C. Zhang, *Reviews of Modern Physics*, 83 (2011) 1057.
- [21] C. L. Kane, E. J. Mele, *Physical review letters*, 95 (2005) 226801.
- [22] J. Kanga, I. Soukaina, L. B. Drissi, *Computational Materials Science* 155 (2018) pp 63-68.
- [23] X.G. Wan , A. M. Turner, A. Vishwanath , S. Y Savrasov, *Phys. Rev. B* 83 (2011) 205101.
- [24] G. Xu, H. Weng, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011) 186806.
- [25] M. Neupane, S.Y. Xu, R. Sankar, N. Alidoust, G. Bian, et al., *Nat. Commun.* 5 (2014) 37862.
- [26] L. X. Yang, Z.K. Liu, Y. Sun, H. Peng, H. F. Yang , et al., *Nat. Phys.* 11 (2015) 728-3.
- [27] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Science* 346 (2014) 602.
- [28] C.-K. Chiu, J.C.Y. Teo, A.P. Schnyder, and S. Ryu, *Rev. Mod. Phys.* 88, 035005 (2016).

- [29] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Physical Review B* 78, 195125 (2008).
- [30] W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig, and T. L. Hughes, *Science* 357, 61 (2017).
- [31] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* 82, 3045 (2010).
- [32] E. Khalaf, *Phys. Rev. B* 97, 205136 (2018).
- [33] J. Langbehn, Y. Peng, L. Trifunovic, F. von Oppen, and P. W. Brouwer, *Phys. Rev. Lett.* 119, 246401 (2017).
- [34] L. Trifunovic and P. Brouwer, *Phys. Rev. X* 9, 011012.
- [35] N. Okuma, M. Sato, and K. Shiozaki, *Phys. Rev. B* 99, 085127 (2019).
- [36] W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig, and T. L. Hughes, *Phys. Rev. B* 96, 245115 (2017).  
W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig, and T. L. Hughes, *Science* 357, 61 (2017).
- [37] M. Ezawa, *Phys. Rev. Lett.* 120, 026801 (2018).
- [38] Q. Wang, D. Wang, and Q.-H. Wang, *EPL (Europhysics Letters)* 124, 50005 (2018).
- [39] H. Araki, T. Mizoguchi, Y. Hatsugai, *Phys. Rev. Research* 2, 012009 (2020)
- [40] L. B. Drissi and E. H. Saidi, *Journal of Physics: Condensed Matter* 32 (36) (2020).
- [41] D. Varjas, A. Lau, K. Poyh onen, A. R. Akhmerov, D. I. Pikulin, and I. C. Fulga, *Phys. Rev. Lett.* 123, 196401 (2019).
- [42] F. Schindler, Z. Wang, M. G. Vergniory, A. M. Cook, A. Murani, S. Sengupta, A. Y. Kasumov, et al., *Nature physics* 14, 918 (2018).
- [43] F. Schindler, A. M. Cook, M. G. Vergniory, Z. Wang, S. S. Parkin, B. A. Bernevig, and T. Neupert, *Science advances* 4, 0346 (2018).
- [44] M. Serra-Garcia, V. Peri, R. Susstrunk, O. R. Bilal, T. Larsen, L. G. Villanueva, and S. D. Huber, *Nature* 555, 342 (2018).
- [45] S. N. Kempkes, M. R. Slot, J. J. van den Broeke, P. Capiod, W. A. Benalcazar, D. Vanmaekelbergh, D. Bercioux, I. Swart, and C. Morais Smith, *Nat. Mater.* 18, 1292 (2019).
- [46] C. W. Peterson, W. A. Benalcazar, T. L. Hughes, and G. Bahl, *Nature* 555, 346 (2018).



# ASPECTS MODERNES ET DÉVELOPPEMENTS RÉCENTS EN PHYSIQUE QUANTIQUE : ALGORITHMES QUANTIQUES

*Mohamed BENNAI*

*Laboratoire de Physique de la Matière Condensée,  
équipe Physique et Technologie*

*Quantiques, Faculté des Sciences Ben M'sik,  
Université Hassan II de Casablanca, Maroc*

*E-mail: mohamed.bennai@univh2c.ma / mdbennai@yahoo.fr*

Nous nous intéressons aux différents développements modernes de la théorie quantique en physique des hautes énergies, de la matière condensée et en information quantique. En effet, depuis l'introduction par Planck du concept de quantification, la théorie quantique a connu un essor très important avec un impact fondamental sur la compréhension de la structure de la matière à différentes échelles d'énergie et de l'interaction matière-rayonnement.

Récemment, un nouvel aspect de la physique quantique a été développé, celui de la théorie quantique de l'information, où l'élément de base pour le traitement de l'information est le qubit, en se basant sur la propriété fondamentale d'entanglement. Notons que des avancées expérimentales exceptionnelles ont été réalisées, dans la cryptographie quantique et dans la conception des circuits quantiques conduisant à la réalisation des premiers processeurs quantiques.

Un intérêt particulier a été porté sur le calcul logique quantique où nous avons étudié de nouvelles portes logiques quantiques, qui sont à la base de développement des algorithmes quantiques et qui peuvent être implémentées dans des systèmes réels d'interaction matière-rayonnement, décrits par le modèle de Jaynes-commings. Nous avons alors considéré un système de  $N$  qubits en interaction, en Cavité-QED et en Circuit-QED, et nous avons montré que l'introduction de l'interaction dipôle-dipôle peut contribuer à l'amélioration de la fidélité avec un temps plus petit que le temps de décohérence. Plus récemment, nous avons étudié quelques aspects fondamentaux de la théorie quantique d'information en analysant les corrélations quantiques et les diverses propriétés statistiques des modèles de Rabi et de Dicke.

## 1. INTRODUCTION

L'information quantique a pour objectif principal de manipuler des systèmes physiques en exploitant les propriétés de la mécanique quantique, notamment le principe de superposition et l'intrication pour le traitement, le stockage et la transmission de l'information. Cette possibilité a conduit à des applications technologiques révolutionnaires.

Depuis les années 1980, les physiciens ont eu la possibilité de manipuler et d'observer des objets quantiques élémentaires individuels: photons, atomes, ions etc..., qui permettront de construire physiquement les bits quantiques, où cette possibilité est à l'origine de l'information quantique. R. Feynman était le premier à constater et à proposer d'exploiter les lois quantiques pour simuler des systèmes quantiques.

D'autre part, il existe plusieurs algorithmes quantiques, dont les plus célèbres sont l'algorithme de Deutsch-Josza qui se base sur le parallélisme du calcul quantique grâce à des transformations type Hadamard (1992), l'algorithme de Shor (1994) pour la factorisation d'un chiffre en nombres premiers et l'algorithme de Grover (1996), permettant de rechercher un ou plusieurs éléments qui répondent à un critère donné parmi  $N$  éléments non classés en temps proportionnel à  $O(\sqrt{N})$ .

## 2. LA THÉORIE QUANTIQUE DE L'INFORMATION

Le phénomène d'intrication quantique est un concept important au centre de l'information quantique, qui est une des caractéristiques les plus étonnantes de la mécanique quantique dans laquelle l'état quantique de deux objets doit être décrit globalement, sans pouvoir séparer un objet de l'autre, bien qu'ils puissent être spatialement séparés. La notion d'intrication quantique a été introduite par Schrodinger en 1935 et traduit la présence de corrélations non locales entre les sous-systèmes, c'est à dire que les propriétés du système global ne peuvent être décrites en termes de propriétés individuelles de ces sous-systèmes.

Il s'agit d'utiliser des processus quantiques pour réaliser des opérations logiques. Les unités de calcul sont des qubits évoluant dans des superpositions d'états, où l'état d'un qubit est un vecteur dans un espace vectoriel à deux dimensions. Pour manipuler ces données quantiques, on distingue différents types d'opérations suivantes: opérations simples dites portes quantiques simples et algorithmes quantiques dans des systèmes physiques de cavités ou circuits quantiques.

Il est à noter que l'implémentation est un domaine d'intérêt théorique et expérimentale, tel que de nombreuses propositions ont été faites pour l'implémentation de base de qubits de calcul quantique: photons polarisés, spins nucléaires, des ions piégés et la résonance magnétique nucléaire à l'état solide (RMN), des atomes neutres dans des réseaux optiques, des points quantiques et les jonctions Josephson. Dans la technologie de l'informatique quantique évolutive, la majorité des propositions de l'implémentation se basent sur les qubits supraconducteurs, les algorithmes quantiques, les portes logiques quantiques et les circuits quantiques.

### 3. IMPLÉMENTATION DE L'ALGORITHME DE GROVER VIA SYSTÈME QED

Nous proposons un schéma de l'implémentation de l'algorithme quantique de Grover basé sur l'interaction qubit-qubit dans le système QED (cavité QED et circuit QED). Nous montrons comment implémenter l'algorithme de recherche quantique proposé avec: deux atomes via la cavité QED et des qubits supraconducteurs dans une cavité QED, entraînée par un champ fort micro-onde.

#### 3.1. Algorithme quantique de Grover

Lov K. Grover montra l'existence d'un algorithme quantique qui permet de trouver un ou plusieurs éléments parmi des éléments désordonnés avec une probabilité de succès en temps proportionnel à  $\sqrt{N}$ , contrairement à l'algorithme classique qui nécessite  $O(N)$ . Il consiste à proposer deux registres : Le premier est de taille  $\log(N)$ , le seconde est simplement un qubit auxiliaire. On place le premier registre dans un état de superposition de tous les états de base de calcul  $N : \{|0\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$ . L'initialisation du premier registre dans l'état  $|0, \dots, 0\rangle$  et l'application de l'opérateur de Hadamard  $H^{\otimes n}$  donnent

$$|\psi_1\rangle = H^{\otimes n}|0, \dots, 0\rangle = (H|0\rangle)^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N-1} |i\rangle \quad (1)$$

$|\psi_1\rangle$  est donc une superposition de tous les états de base d'égale amplitudes  $\frac{1}{\sqrt{N}}$ .

◦ *L'oracle quantique*

L'algorithme de Grover incorpore deux éléments principaux:

1. La boîte noire appelée Oracle, qui détermine si un état quantique donné en entrée ( $|0, 0, \dots, 0\rangle, |0, 0, \dots, 0, 1\rangle, |0, \dots, 0, 1, 0\rangle \dots |1, 1, \dots, 1\rangle$ ) correspond à un certain critère. C'est cette boîte noire qui permet de caractériser l'algorithme à un problème donné.
2. Un algorithme d'amplification d'amplitude, qui permet de rendre exploitable et mesurable l'information donnée par l'oracle. Cet algorithme est indépendant de l'oracle et c'est cette procédure qui nécessite  $O(\sqrt{N})$  itérations.

Définissons la fonction  $f : \{0, \dots, N-1\} \longrightarrow \{0, 1\}$

$$\begin{aligned} f(i) &= 1 \text{ si } i \text{ est l'élément cherché } i_0 \\ f(i) &= 0 \text{ Sinon} \end{aligned}$$

Cette fonction, utilisée dans l'algorithme classique, permet dans l'algorithme quantique d'assumer qu'il est possible de construire un opérateur unitaire linéaire pour calculer  $f$ ,  $U_f$  :

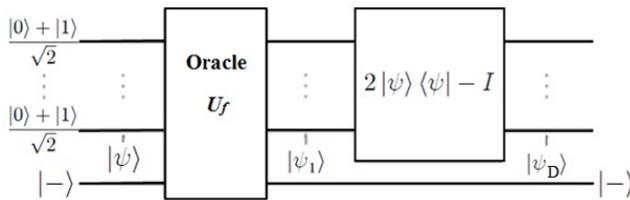
$$U_{f'}(|i\rangle|j\rangle) = |i\rangle|j \oplus f(i)\rangle \quad (2)$$

$U_f$  est dite oracle.

◦ Pendant chaque itération, l'algorithme de Grover effectue deux opérations:

1. Consulter l'oracle  $U_f$ . Après on aura un résultat de  $N$  éléments. On prépare l'état initiale comme une superposition d'égale probabilités ( $\frac{1}{\sqrt{N}}$ ) de  $N$  éléments. Ensuite, l'oracle quantique ( $U_f$ ) reconnaît et marque la solution  $i_0$ ,  $f(i_0) = 1$ , avec un décalage de phase. Nous appliquons ensuite l'algorithme d'amplification d'amplitude qui permet de rendre exploitable et mesurable la solution  $i_0$  à partir de l'utilisation de l'opérateur  $D$  qui augmente l'amplitude de l'élément  $i_0$ .
2. Appliquer l'inversion autour de la moyenne.

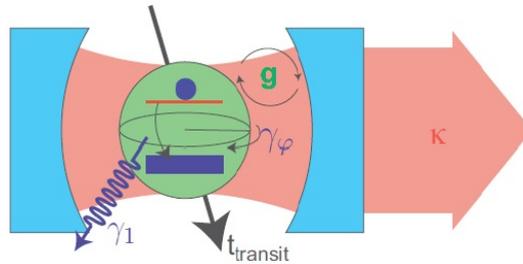
La répétition de ce processus avant de faire une mesure augmente la probabilité de mesurer  $i_0$ . Il est à noter que l'ensemble de ces étapes peut être schématisé dans le diagramme suivant:



Représentation d'une seule itération de l'opérateur de Grover.

### 3.2. Electrodynamique Quantique en Cavité (Cavity QED)

Recemment, l'électrodynamique Quantique en Cavité est devenue un important domaine d'études d'interaction matière-rayonnement:



Représentation schématique d'une cavité QED couplée à un système à deux niveaux

L'atome est représenté comme un système à deux niveaux (qubit). Ses états propres, de valeurs propres  $\omega_{0,1}$  sont notés  $|g\rangle$  et  $|e\rangle$  et son Hamiltonien s'écrit

$$H_q = \frac{\omega_{0,1}}{2} \sigma_z \quad (3)$$

On considère une interaction dipolaire entre l'atome et le champ électromagnétique. On écrit ainsi l'Hamiltonien d'interaction suivant:

$$H_I = g\sigma_x(a^+ + a) \quad (4)$$

où  $g$  est la constante de couplage qui dépend de l'amplitude du moment dipolaire et de l'amplitude du champ électrique. L'Hamiltonien total du système devient

$$H_{Rabi} = \omega_r a^\dagger a + \frac{\omega_{0,1}}{2} \sigma_z + g \sigma_x (a^\dagger + a) \quad (5)$$

Cette Hamiltonien est connue sous le nom d'Hamiltonien de Rabi et a été développé dans le cadre de la résonance magnétique nucléaire. Dans la limite où  $g \ll \omega_r + \omega_{0,1}$ , le terme  $a\sigma - + a^\dagger\sigma_+$  ne conserve pas l'énergie et à négliger. On peut montrer que l'Hamiltonien de Rabi est relié à celui de Jaynes-Cummings par:

$$H_{JC} = \omega_r a^\dagger a + \frac{\omega_a}{2} \sigma_z + g(a^\dagger \sigma_- + a \sigma_+) \quad (6)$$

où  $\sigma_+$  et  $\sigma_-$  sont les opérateurs d'échelle du système à deux niveaux, avec  $\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$  et  $\omega_r$  est la fréquence de résonance du mode du champ électromagnétique et  $g$  la constante de couplage entre ce mode et l'atome. Lorsque la fréquence de l'atome est comparable à celle de la cavité ( $\omega_r \sim \omega_a$ ), un quantum d'énergie peut être transféré de façon résonante de l'atome à la cavité. Ce quantum d'énergie peut ensuite être perdu par la cavité via sa relaxation.

### 3.3. Modèle de Jaynes-Cummings

L'atome est placé dans la cavité optique et le positionner de telle sorte qu'il peut interagir avec le mode optique. L'opérateur qui décrit ce processus  $\sigma_+ a$ , où l'opérateur  $\sigma_+$  prend l'atome de l'état fondamental à l'état excité, et  $a$  un opérateur qui annihile un photon. Il y a un processus inverse également, où l'atome émet un photon et va vers son état fondamental, décrit par l'opérateur  $\sigma_- a^\dagger$ . Ils peuvent être mis ensembles dans un Hamiltonien d'interaction de la forme:

$$H_{int} = \hbar\Omega(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \quad (7)$$

où  $\Omega$  est une constante de couplage qui détermine la force de l'interaction. L'Hamiltonien globale est alors

$$H_{total} = \hbar\omega(aa^\dagger + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z + \hbar\Omega(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \quad (8)$$

Ce modèle est appelé le modèle Jaynes-Cummings. Il s'agit d'un Hamiltonien décrivant toutes les expériences mettant en jeu un oscillateur harmonique couplé à un spin 1/2. Il s'applique aussi dans le cas des ions piégés ou des qubits supraconducteurs par exemple.

**La fidélité:** Il est naturel de se demander quelle peut-être la probabilité d'observer le système dans le fondamental du Hamiltonien  $|\Psi\rangle$ . Celle-ci est donnée par:

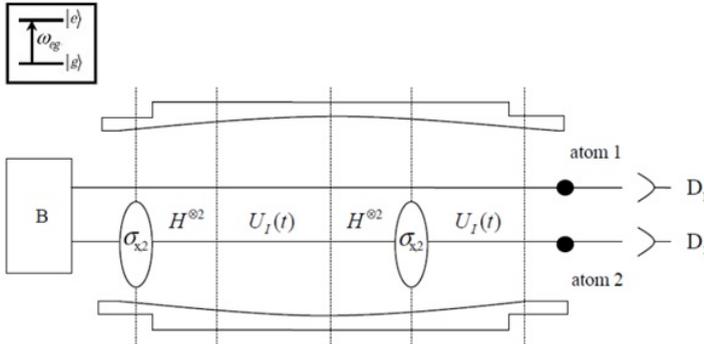
$$f(\Psi, \Psi') = |\langle\Psi|\Psi'\rangle|^2 \quad (9)$$

Une telle quantité est appelée fidélité, elle permet de quantifier à quel point le fondamental d'un système change quand on modifie le paramètre de contrôle  $\Psi$ .

### 3.4. Implémentation de l'algorithme de Grover à deux atomes dans une cavité QED

Nous considérons deux atomes dans une cavité QED, tels que les transitions atomiques ont différentes fréquences pour les deux atomes. Les électrodes sont utilisées pour produire dans la cavité un champ électrique qui est utilisé pour contrôler les transitions atomiques. Dans la suite, nous présentons une méthode de l'implémentation de l'algorithme de recherche de Grover à deux qubits dans une cavité QED avec un fort champ classique.

Tout d'abord, nous préparons les deux atomes simultanément dans l'état fondamental  $|g_1\rangle|g_2\rangle$ , et après  $H^{\otimes 2}U_I(t_2)H^{\otimes 2}$  opération, l'état atomique évolue vers l'état initial.



Les deux atomes sont initialement préparés dans l'état moyen  $|g_1\rangle|g_2\rangle$ , et passés dans la cavité de la gauche vers la droite avec la même vitesse. Les trois opérations  $H^{\otimes 2}U_I(t)H^{\otimes 2}$  constituent la porte de phase conditionnelle  $I_{g_1g_2}$  ou  $I_{e_1e_2}$ , et les deux portes NOT agissant sur l'atome 2 sont ajoutées aux extrémités de trois opérations ci-dessus pour générer  $I_{g_1e_2}$  ou  $I_{e_1g_2}$ , l'opérateur  $U_I(t)$  est utilisé pour construire la transformation de diffusion D.  $D_1$  et  $D_2$  sont des détecteurs pour vérifier les états des atomes 1 et 2 respectivement.

La recherche commence à partir d'un état de superposition  $|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{X=0}^{N-1} |X\rangle$  où les probabilités de ces éléments sont égales pour obtenir le qubit cible, les  $|X\rangle$  sont les états de calcul avec  $X = 0, 1, \dots, N-1$ , dans le registre quantique de  $n$  qubits.

L'Hamiltonien du système (avec  $\hbar = 1$ ) est celui de Jaynes-Cummings, donné par:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \omega_0 \sigma_{z,j} + \omega_a a^\dagger a + \sum_{j=1}^2 [g(a^\dagger \sigma_j^- + a \sigma_j^+) + \Omega(\sigma_j^+ e^{-i\omega t} + \sigma_j^- e^{-i\omega t})] + \Gamma \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^2 \sigma_i^+ \sigma_j^- \quad (10)$$

où  $\sigma_{z,j} = |e_j\rangle\langle e_j| - |g_j\rangle\langle g_j|$ ,  $\sigma_j^+ = |e_j\rangle\langle g_j|$ ,  $\sigma_j^- = |g_j\rangle\langle e_j|$  avec  $|e_j\rangle(|g_j\rangle)$  est l'état excité (fondamental) de l'atome.  $\omega_0, \omega_a$  et  $\omega$  sont les fréquences de transition atomique du mode de la cavité et du champ classique respectivement,  $a^\dagger$  et  $a$  sont les opérateurs de création et d'annihilation du mode de la cavité.  $g$  est la constante de couplage atome-cavité et  $\Omega$  est la fréquence de Rabi du champs classique.

Supposons que  $\omega_0 = \omega$  et  $\omega_0 = \omega_a$ . Dans le cas de la représentation d'interaction, l'Hamiltonien du système s'écrit sous la forme suivante

$$H_I = \sum_{j=1}^2 [\Omega(\sigma_j^+ + \sigma_j^-) + g(e^{-i\delta t} a^+ \sigma_j^- + e^{-i\delta t} a \sigma_j^+)] \quad (11)$$

L'expression  $J_x = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 (\sigma_j^+ + \sigma_j^-)$  permet d'écrire les expressions des Hamiltoniens;  $H_e$  et  $H_0$  sous la forme  $H_0 = 2\Omega J_x$  et  $H_e = 2\lambda J_x^2$ , alors  $U_I(t)$  devient

$$\begin{aligned} U_{I1}(t) &= e^{-i2\Omega t J_x - i2\lambda t J_x^2} = e^{-i2\lambda t J_x^2} e^{-i2\Omega t J_x} e^{[J_x^2, J_x]} \\ &= e^{-i2\lambda t J_x^2} e^{-i2\Omega t J_x} \end{aligned} \quad (12)$$

Dans le sous-espace engendré par  $|e_1\rangle|e_2\rangle, |e_1\rangle|g_2\rangle, |g_1\rangle|e_2\rangle, |g_1\rangle|g_2\rangle$ , nous définissons la porte Hadamard à deux qubits où la porte Hadamard  $H_i$  agissant sur l'atome  $i$ , transformant les états en  $|g_i\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_i\rangle + |e_i\rangle)$ ,  $|e_i\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_i\rangle - |e_i\rangle)$ . Alors,  $U_I(t)$  peut être exprimé dans la même base, où l'état moyen est  $|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|e_1\rangle|e_2\rangle + |e_1\rangle|g_2\rangle + |g_1\rangle|e_2\rangle + |g_1\rangle|g_2\rangle)$  et  $I$  la matrice d'identité  $4 \times 4$ .

$$H^{\otimes 2} U_I(t) H^{\otimes 2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{2i\lambda t(h-1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2\lambda t(h+1)} \end{bmatrix} \quad (13)$$

où  $h = \frac{\Omega}{\lambda}$ . Avec  $\lambda t_1 = \frac{\pi}{4}$ ,  $h = 4m + 1$ ,  $t_1 = \frac{\pi}{4\lambda}$ ,  $\frac{\Omega}{\lambda} = 4m + 1$ , nous avons

$$H^{\otimes 2} U_I(t_1) H^{\otimes 2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = I_{g_1 g_2} \quad (14)$$

ceci nous permet d'obtenir l'état cible suivant  $|g_1\rangle|g_2\rangle$ . D'une manière analogue, en posant  $\lambda t_2 = \frac{\pi}{4}$ ,  $h = 4m + 3$ ,  $t_2 = \frac{\pi}{4\lambda}$ ,  $\frac{\Omega}{\lambda} = 4m + 3$ , l'état cible  $|e_1\rangle|e_2\rangle$  peut être obtenu sous la forme

$$H^{\otimes 2} U_I(t_2) H^{\otimes 2} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I_{e_1 e_2} \quad (15)$$

Pour obtenir les états cibles  $|e_1\rangle|e_2\rangle$  ou  $|g_1\rangle|g_2\rangle$ , on applique les transformations suivantes

$$\sigma_{x,2} I_{g_1 g_2} \sigma_{x,2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I_{g_1 e_2} \quad (16)$$

$$\sigma_{x,2} I_{e_1 e_2} \sigma_{x,2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I_{e_1 g_2} \quad (17)$$

avec la porte NOT  $\sigma_{x,2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ . Par conséquent, étant donnée un  $\lambda$  spécifique, en choisissant  $\Omega$  et le couplage atome-cavité  $g$  approprié, nous pouvons générer toutes les opérations à deux qubits nécessaires dans l'algorithme de Grover à deux qubits.

#### 4. RÉALISATION DE $N$ PORTES DE PHASE VIA CAVITÉ QED

La porte logique NTCP est une porte à  $N$  qubits, avec un qubit contrôlant simultanément  $N$  qubits cibles. Ce travail introduit l'interaction dipôle-dipôle (atome-atome) et l'interaction qubit-cavité dans une cavité QED. Cette porte peut être réalisée en un temps beaucoup plus court que le temps de rayonnement et la durée de vie du photon dans cavité. Dans la suite, nous allons présenter une méthode de réalisation de la porte NTCP, avec un qubit de contrôle qui commande simultanément  $N$  qubits cibles dans la cavité QED en ajoutant un fort champ classique de résonance. L'opérateur unitaire représentant ce type de porte de multi-qubits est donnée par

$$U_p = \prod_{j=2}^{N+1} (I_j - 2|-_1\rangle\langle -_j| \langle -_1| \langle -_j|) \quad (18)$$

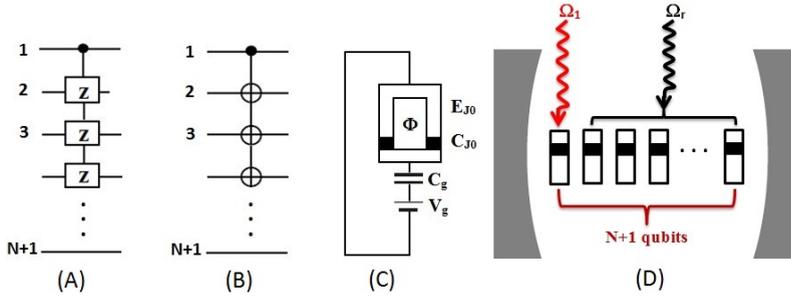
où l'indice 1 représente le qubit de commande 1, alors que  $j$  représente le qubit cible  $j$ , et  $I_j$  est l'opérateur identité de la paire de qubits  $(1, j)$ , donnée par  $I_j = \sum_{rs} |r_1 s_j\rangle\langle r_1 s_j|$ , avec  $r, s \in \{+, -\}$ . A partir de l'opérateur de l'équation 18, on peut voir que l'opérateur  $U_p$  induit une bascule de phase (du signe + au signe -) à l'état logique  $|-$  de chaque qubit cible lorsque le qubit de commande 1 est initialement dans l'état  $|-$ .

##### 4.1. Préparation de la porte NTCP

Dans ce paragraphe, nous allons montrer comment la porte NTCP peut être réalisée avec les opérateurs d'évolution  $U(\tau)$ ,  $U'(\tau')$  et  $U''(\tau)$ . Considérons  $N + 1$  qubits supraconducteurs placés dans la cavité QED. Les opérations de la Réalisation de la porte NTCP et les opérateurs des évolutions après chaque étape de l'opération sont:

*La première étape:* Avec le cas  $\delta < 0$  et  $\varphi = \pi$ , nous appliquons une impulsion résonnante à chaque qubit, où l'impulsion de la fréquence de Rabi est  $\Omega$ . Ainsi,  $U(\tau)$  est l'opérateur d'évolution de système  $(1, 2, \dots, N + 1)$  qubits, tel que le temps d'interaction  $\tau = -\frac{\pi}{2\delta}$ .

*La deuxième étape:* Appliquer une impulsion résonnante à chaque qubit avec le cas  $\delta' > 0$  et  $\varphi = 0$ , où l'impulsion de fréquence de Rabi est  $\Omega'$ . Ainsi, le  $U'(\tau')$  est l'opérateur d'évolution du système de  $(2, \dots, N + 1)$  qubits, où le temps d'interaction  $\tau' = \frac{\pi}{2\delta'}$ . Le temps combiné après ces deux étapes est  $\tau' + \tau = \frac{\pi}{2\delta'} - \frac{\pi}{2\delta}$ .



Circuit proposé d'une porte de phase-contrôlée contrôlant simultanément  $N$  qubits cibles (2, 3, ...,  $N + 1$ ).

Supposons que  $\Omega'\tau' = -\Omega\tau$ ,  $\lambda'\tau' = \lambda\tau$  et  $\Gamma'\tau' = \Gamma\tau$ , qui peuvent être obtenus en ajustant  $\delta$  et  $\delta'$  (changement de  $\omega_c$  et  $\omega_0$ ), la  $\Omega$  et  $\Omega'$  (en changeant l'intensité des impulsions) et  $\Gamma$  et  $\Gamma'$ . Donc  $U(\tau + \tau')$  est

$$U(\tau + \tau') = e^{2i\Omega\tau\sigma_{x,1}} e^{2i\lambda\tau\sigma_{x,1}S'_x} \prod_{j=2}^{N+1} e^{i\Gamma\tau\sigma_{z,1}\sigma_{z,j}} \quad (19)$$

*La troisième étape:* Dans le cas de  $\varphi = 0$ , nous appliquons la fréquence de Rabi d'impulsions  $\Omega_1$  sur le qubit 1. En outre, nous appliquons la fréquence de Rabi d'impulsion  $\Omega_r$  sur les qubits (2, ...,  $N + 1$ ). Alors, nous allons obtenir l'opérateur d'évolution temporelle  $U''(\tau)$  ( $\tau$  est le temps d'évolution).

L'opérateur d'évolution temporelle du système de qubits  $N + 1$  est

$$U_{gate} = e^{-2i\sigma_{x,1}\tau(\Omega_1 - \Omega)} \cdot e^{-2i\Omega_r S'_x \tau} e^{2i\lambda\tau\sigma_{x,1}S'_x} \prod_{j=2}^{N+1} e^{i\sigma_{z,1}\sigma_{z,j}\tau\Gamma} \quad (20)$$

Avec certaines conditions, l'opérateur d'évolution  $U_{gate}$  devient

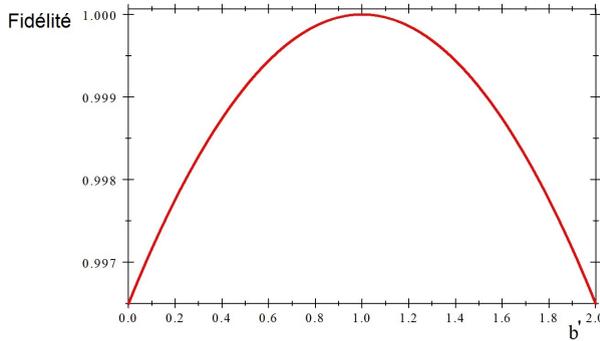
$$U_{gate} = \prod_{j=2}^{N+1} U_P(1, j) \quad (21)$$

avec  $U_P(1, j) = e^{-2i\lambda''\tau(\sigma_{x,1} + \sigma_{x,j} - 2\sigma_{x,1}\sigma_{x,j}) + 4i\beta\tau\sigma_{z,1}\sigma_{z,j}}$ .

## 4.2. La fidélité

Etudions maintenant la fidélité des opérations de la porte. Afin de vérifier la validité de notre proposition, nous définissons la fidélité suivante pour caractériser la déviation de combien des états de sortie  $|\Psi(t)\rangle$  déviés en amplitude et en phase à partir de la transformation de la porte logique idéale des différents états d'entrée, où  $|\Psi(t)\rangle$  représente l'état final du système après les opérations de la porte, et  $|\Psi(0)\rangle$  est l'état initial suivie d'une opération de la phase idéale,  $U(t)$  décrit l'opérateur d'évolution globale du système qui sont effectuées dans une situation réelle. La fidélité des opérations de la porte par rapport à la variation de la force de couplage qubit-qubit est donnée par:

$$F = \left| \cos\left(\frac{\pi}{5} \left(\frac{g^2}{\Omega\Gamma_0}\right) \left(1 - \frac{\Delta\Gamma}{\Gamma}\right)\right) \right|^4 \quad (22)$$



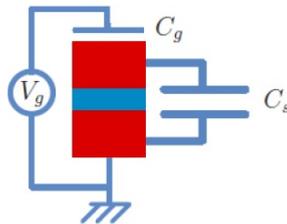
La fidélité par rapport au  $b'$ . Ici,  $b' = \frac{\Delta\Gamma}{\Gamma}$ .

où  $\Delta\Gamma = \Gamma - \Gamma_0$ . La figure montre la variation de la fidélité par rapport à  $\frac{\Delta\Gamma}{\Gamma}$ . On peut voir que, pour  $\Gamma = \Gamma_0 = 0.25GHz$ , les portes logiques peuvent être réalisables avec une haute fidélité 99.6%.

## 5. IMPLÉMENTATION DE $N$ PORTES DE PHASE VIA CIRCUIT QED

Nous allons présenter une méthode efficace pour réaliser une porte de phase quantique d'un qubit transmon, qui contrôle simultanément  $N$  qubits transmon cibles dans un circuit QED entraîné par un champ fort de micro-ondes, en introduisant l'interaction qubit-qubit.

Un transmon est un type de qubit de charge supraconducteur qui a été conçu pour avoir une sensibilité réduite de bruit de charge. Le transmon est une abréviation de transmission line shunted plasma oscillation qubit, il est opéré à un ratio  $E_J/E_C$  ( $E_J$  est l'énergie Josephson et  $E_C$  est l'énergie de charge) plus élevé. Pour obtenir  $E_J/E_C$  élevé on place une capacité en parallèle avec la jonction Josephson (voir la figure). Le Hamiltonien du transmon est le même que celui de la boîte de Cooper.



Représentation du circuit de transmon

Le transmon atteint sa sensibilité réduite à charger le bruit en augmentant sensiblement le rapport  $E_J/E_C$ . Le temps de cohérence  $T_1$  au niveau de la puce des qubits transmon est compris entre  $\sim 30\mu s$  et  $40\mu s$ . Les travaux récents sur les qubits transmon ont montré de manière significative l'amélioration du temps  $T_1$ . Ces résultats montrent que le temps  $T_1$  précédent n'est pas limité par les pertes de jonction Josephson. Alors, le transmon est un domaine de recherche actif.

Nous présentons et démontrons une éventuelle architecture de l'information quantique basé sur les qubits transmon de jonctions de Josephson. Nous allons proposer un autre type de porte quantique (la porte NTCP) en considérant l'interaction qubit-qubit, avec un qubit qui contrôle simultanément  $N$  qubits cibles dans un circuit QED en ajoutant un champ fort de micro-ondes. Cette porte peut être réalisée en un temps de nanoseconde qui est beaucoup plus court que le temps de décroissance.

### 5.1. Le modèle et l'opérateur d'évolution

Nous proposons un schéma de l'implémentation de la porte NTCP en utilisant le système de qubits transmon avec interaction qubit-qubit dans un circuit QED (voir la figure). Dans notre système, les  $(N + 1)$  qubits transmon sont couplés capacitivement à un résonateur de la ligne de transmission supraconductrice (TLR) entraîné par un champ fort de micro-ondes. En outre, le champ de la fréquence de micro-ondes  $\omega_d$  est appliqué à l'entrée du TLR. Nous considérons que chaque qubit de  $(N + 1)$  qubits transmon ayant des sous-espaces à deux niveaux entraîné par un champ classique ajouté, ces qubits transmon sont couplés capacitivement les uns aux autres. L'interaction qubit-qubit devrait être inclus dans le circuit QED. Alors l'Hamiltonien de l'ensemble du système est donnée par

$$\begin{aligned}
 H_{JC} = & \omega_q \sum_{j=1}^{N+1} S_{z,j} + \omega_r a^+ a + \sum_{j=1}^{N+1} g_j (a^+ S_j^- + a S_j^+) \\
 & + \varepsilon(t) (a^+ e^{-i\omega_d t} + a^- e^{i\omega_d t}) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N+1} \Gamma_{ij} S_i^+ S_j^- \quad (23)
 \end{aligned}$$

$S_{z,j}$ ,  $S_j^-$ , et  $S_j^+$  sont les opérateurs collectifs pour le  $(1, 2, \dots, N + 1)$  qubits, où  $S_{z,j} = \frac{1}{2}(|e_j\rangle\langle e_j| - |g_j\rangle\langle g_j|)$ ,  $S_j^+ = |e_j\rangle\langle g_j|$ ,  $S_j^- = |g_j\rangle\langle e_j|$  avec  $|e_j\rangle(|g_j\rangle)$  est l'état excité (état fondamental) de qubit transmon,  $\omega_r = 1/\sqrt{LC}$  est la fréquence de résonance du TLR où la ligne de transmission résonateur peut être modélisé sous forme d'un oscillateur harmonique simple composé de la combinaison en parallèle d'une inductance  $L$  et un condensateur  $C$ ,  $\omega_q$  est la fréquence de transition du qubit transmon avec  $\omega_{q1} = \omega_{q2} = \dots = \omega_{qN+1}$  (où les définitions de qubits sont les mêmes,  $\omega_d$  est la fréquence du champ externe appliquée au TLR,  $a^+$ ,  $a$  sont la création et l'annihilation de mode de résonateur,  $g$  est l'intensité de couplage qubit-TLR,  $\Gamma_{ij}$  est la force de couplage qubit-qubit entre les qubits  $i$  et  $j$  et  $\varepsilon(t)$  est l'amplitude d'onde hyperfréquence.

Ce choix de  $\alpha$  est fait de façon à éliminer la transmission directe du champ de micro-ondes sur le TLR. Dans le cas où l'amplitude du champ classique est indépendant du temps, nous obtenons  $\alpha = -\frac{\varepsilon(t)}{\omega} e^{-i\omega_d t}$  avec  $\omega = \omega_r - \omega_d$ , et nous supposons que  $\Gamma_{ij} = \Gamma$  et  $g_j = g$ . Alors, l'Hamiltonien  $H$  devient

$$\begin{aligned}
H = & \omega_q \sum_{j=1}^{N+1} S_{z,j} + \omega_r a^+ a + g \sum_{j=1}^{N+1} (a^+ S_j^- + a S_j^+) + \Omega \sum_{j=1}^{N+1} (e^{i\omega_a t} S_j^- + \alpha e^{-i\omega_a t} S_j^+) \\
& + \Gamma \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N+1} S_i^+ S_j^- \quad (24)
\end{aligned}$$

où  $\Omega = g\varepsilon/\omega$ . Dans la région de champs classique fort  $2\Omega \gg \delta, g, \Gamma$ , nous pouvons éliminer les termes oscillants rapides, alors, l'Hamiltonien  $H_I'$  se réduit à

$$H_I' = g(a^+ e^{i\delta t} + a e^{-i\delta t}) S_x + \Gamma \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N+1} \left[ \sigma_{x,i} \sigma_{x,j} + \frac{1}{4} (\sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_i^- \sigma_j^+) \right] \quad (25)$$

Alors, l'opérateur d'évolution de l'Hamiltonien  $H_I'$  peut être écrit comme

$$U'(t) = e^{-iA(t)S_x^2} e^{-iB(t)aS_x} e^{-iB^*(t)a^+S_x} e^{-iC(t)X}, \quad (26)$$

$$X = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N+1} \left[ \sigma_{x,i} \sigma_{x,j} + \frac{1}{4} (\sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_i^- \sigma_j^+) \right] \quad (27)$$

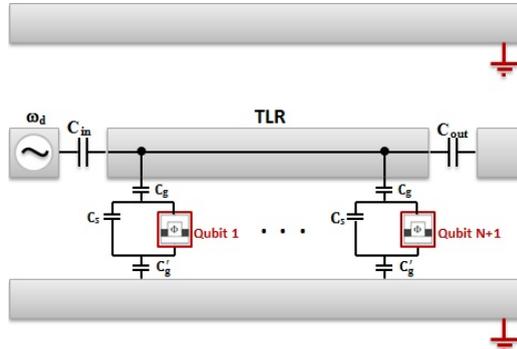
En résolvant l'équation de Schrödinger, nous obtenons

$$U'(\tau) = e^{-i\lambda\tau S_x^2} \prod_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N+1} e^{-i\frac{\Gamma}{4}\tau(4\sigma_{x,i}\sigma_{x,j} + \sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_i^- \sigma_j^+)} \quad (28)$$

où  $\lambda = g^2/\delta$ . Donc, l'opérateur d'évolution du système est

$$U(\tau) = e^{-iH_0\tau} U'(\tau) = e^{-2i\Omega\tau S_x^2} e^{-i\lambda\tau S_x^2} \prod_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N+1} e^{-i\frac{\Gamma}{4}\tau(4\sigma_{x,i}\sigma_{x,j} + \sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_i^- \sigma_j^+)} \quad (29)$$

Pour réaliser la porte NTCP, nous appliquons une impulsion de résonance à chaque qubit. Supposons que la fréquence de Rabi pour l'impulsion appliquée à qubit 1 est  $\Omega_1$  tandis que la fréquence de Rabi pour les impulsions appliquées aux qubits 2, 3, ...,  $N + 1$  est  $\Omega_r$ . Dans ce cas, le système ne nécessite aucun couplage supplémentaire qubit-qubit.



Représentation schématique d'un TLR et  $(N + 1)$  qubits transmon qui sont couplés dans un circuit QED (bleu) entraîné par un champ fort de micro-ondes de la fréquence  $\omega_d$ . TLR est relié au câblage d'entrée avec un condensateur en  $C_{in}$  et le câblage de sortie avec un condensateur  $C_{out}$ . En outre, le couplage entre qubits  $i$  et  $j$  est par l'intermédiaire d'inductances de couplage, où ce couplage peut être interprété comme un couplage d'énergie entre les qubits.

L'équation (29) va être utilisée dans la suite pour obtenir la porte NTCP dans le cas de l'interaction qubit-qubit.

## 5.2. Implémentation de la porte NTCP

Considérons maintenant les  $(N + 1)$  qubits placés dans un circuit QED, où le premier qubit est le qubit contrôle et les autres  $N$  qubits sont les qubits cibles. La porte NTCP peut être réalisée en utilisant l'opérateur d'évolution  $U(\tau)$  et  $U_\Omega(\tau)$ . Alors, l'opérateur d'évolution unitaire du système est

$$U_S = e^{-2i(\Omega_1 - \Omega)\tau\sigma_{x,1}} \cdot e^{-2i\Omega_r\tau S'_x} \cdot e^{-2i\lambda\tau\sigma_{x,1}S'_x} \prod_{j=2}^{N+1} e^{-i\frac{\Gamma}{4}\tau(4\sigma_{x,1}\sigma_{x,j} + \sigma_1^+\sigma_j^- + \sigma_1^-\sigma_j^+)} \quad (30)$$

avec les conditions

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma}{4} &= -\beta \\ \lambda &= 4\lambda'' \\ \Omega_1 &= 2N\lambda'' + \Omega = -Ng^2/2\delta + \Omega \\ \Omega_r &= 2\lambda'' = -g^2/2\delta \end{aligned} \quad (31)$$

nous pouvons obtenir l'opérateur d'évolution final

$$U_S = \prod_{j=2}^{N+1} U_P(1, j) \quad (32)$$

où  $U_p(1, j) = e^{-4i\lambda\tau(\sigma_{x,1} + \sigma_{x,j} + 2\sigma_{x,1}\sigma_{x,j}) + i\beta\tau(4\sigma_{x,1}\sigma_{x,j} + \sigma_1^+\sigma_j^- + \sigma_1^-\sigma_j^+)}$ . En fonction de l'opérateur d'évolution  $U_p(1, j)$  ci-dessus, sur la base  $|+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_1\rangle + |e_1\rangle)$  et  $|-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_1\rangle - |e_1\rangle)$  de l'opérateur de Pauli  $\sigma_{x,1}$  de qubit 1, de sorte que la base  $|+j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_j\rangle + |e_j\rangle)$  et  $|-j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_j\rangle - |e_j\rangle)$  de l'opérateur Pauli  $\sigma_{x,j}$  de qubits  $(2, 3, \dots, N + 1)$ , nous pouvons obtenir les évolutions suivantes, en fixant  $\beta\tau = -2k\pi$  et en choisissant  $16\lambda''\tau = (2k + 1)\pi$  (avec  $k$  étant un nombre entier), on peut facilement vérifier que

$$\begin{aligned} U_p|+1\rangle|+j\rangle &= -|+1\rangle|+j\rangle \\ U_p|+1\rangle|-j\rangle &= |+1\rangle|-j\rangle \\ U_p|-1\rangle|+j\rangle &= |-1\rangle|+j\rangle \\ U_p|-1\rangle|-j\rangle &= |-1\rangle|-j\rangle \end{aligned} \quad (33)$$

où le terme  $e^{2i\lambda''\tau}$  est omis. De cette manière, on peut voir que les portes de  $N$  deux qubits sont effectuées simultanément sur les qubits paires  $(1, 2)$ ,  $(1, 3)$ ,  $\dots$ ,  $(1, N + 1)$ , respectivement. Par conséquent, il est clair que la porte NTCP peut être réalisée après le processus en trois étapes pour l'implémentation de l'algorithme de Grover.

## REFERENCES

- [1] R. Feynman, Simulating physics with computers, *Internat. J. Theoret. Phys.*, 21 (1982) pp. 467–488.
- [2] D. Deutsch and R. Jozsa, Rapid solution of problems by quantum computation, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, 439 (1992) pp. 553–558.
- [3] P.W. Shor. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring, *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. IEEE Comput. Soc. Press, Santa Fe, NM, USA, 1994.
- [4] L. K. Grover, "Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack," *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 325.
- [5] D.P. DiVincenzo, "Quantum gates and circuits", *Proc. R. Soc. Lond. A* 454, 261 (1998).
- [6] Yang, C. P., Liu, Y. X., & Nori, F. (2010). Phase gate of one qubit simultaneously controlling n qubits in a cavity. *Physical Review A*, 81(6), 062323.
- [7] M.A. Nielsen et I.L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [8] Yamaguchi, F., Milman, P., Brune, M., Raimond, J. M., & Haroche, S. (2002). "Quantum search with two-atom collisions in cavity QED.", *Physical Review A*, 66(1), 010302.
- [9] A. Wallraff et al., "Strong coupling of a single photon to a superconducting qubit using circuit quantum electrodynamics", *Nature (London)* 431, 162-167 (2004).
- [10] A. Chouikh, T. Said, K. Essammouni and M. Bennai, "Implementation of universal two- and three-qubit quantum gates in a Cavity QED", *Optical and Quantum Electronics* 48.10 (2016): 463.
- [11] T. Said, A. Chouikh, K. Essammouni and M. Bennai, "Realizing an N-two-qubit quantum logic gate in a Cavity QED with nearest qubit–qubit interaction", *Quantum Information and Computation*, Vol. 16, No. 5&6 (2016) 0465–0482
- [12] Essammouni, K., Chouikh, A., Said, T., & Bennai, M. (2017). "ni SWAP and N TCP gates realized in a circuit QED system.", *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, 14(07), 1750100.
- [13] T. Said, A. Chouikh and M. Bennai, "Simultaneous implementation of N iSWAP gates using N+1 qubits in a cavity or coupled to a circuit", *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, Vol. 153, NN 4-5, (2018).
- [14] T. Said, A. Chouikh and M. Bennai, "A Facile two-step method to implement  $N\sqrt{iSWAP}$  and  $N\sqrt{SWAP}$  gates in a circuit QED", *International Journal of Theoretical Physics* (2018) 57(8), 2536-2545.

# PROPERTIES OF ELEMENTARY MAGNETIC EXCITATIONS AS INFORMATION CARRIERS IN MULTILAYERS BASED ON TRANSITION METAL ALLOYS

*Nadia AIT LABYAD, Atika FAHMI and Ahmed QACHAOU*

*Faculté des Sciences, Université Ibn Tofail, Kénitra*

## Abstract

In low-dimensional systems, the break of symmetry perpendicular to the surface and the reduction of the number of coordination in this surface lead to a differentiation between magnons created within the surface from those of bulk. This difference depends on the relative values of the exchange integrals at the surface and the volume. The existence of these two types of magnon created in volume and on the surface of our multilayers  $Co_{1-x}Fe_x/Cu$  is thus demonstrated. We report in this work a theoretical study of the alloying effect on the evolution of these magnons using the Heisenberg model. The characteristic properties of this creation such as the excitation spectra  $E_{l_z}(k_{\parallel}, x)$ , permissible (or allowed) bands, gaps, associated lifetimes  $\tau_s$  and the magnetization per spin  $M_{cal}^z(T, x)$  are calculated. The results obtained for both  $M^z$  and  $\tau_s$  are in very good agreement with the available experimental results [1, 2, 3].

*Keywords:* Heisenberg spin Hamiltonian, Creation of magnons in Surface and Volume, Lifetimes and Gaps of the creation, Energy bands allowed for the creation.

## 1. Introduction

The fundamental advantage of using elementary magnetic excitations (magnons), as carriers of information, is that when a magnon propagates in a sample, no Joule effect takes place since no charge transport is involved. In small size systems, essentially two main factors, namely the breaking of symmetry perpendicular to the surface of the layer and the reduction of number of neighbors close to a given TM atom in this surface, cooperate to differentiate magnons created inside surfaces relative to those in volume. Several theoretical and experimental works [2, 4, 5, 6], mainly with regard to the orientation of the magnetization, the order-disorder process as well as the electronic structure were carried out on the hard ferromagnetic alloys  $Co_{1-x}Fe_x$ . They show that the exchange constant and the saturation magnetization have the highest values measured in the family of TM. This constitutes the properties of choice in the field of spintronics. In this work we report a contribution to the theoretical study of the contribution of magnons created to magnetic properties of these multilayer alloys.

---

*Email addresses:* [aitlabyad.nadia@uit.ac.ma](mailto:aitlabyad.nadia@uit.ac.ma) (Nadia Ait Labyad), [fahmi.atika@uit.ac.ma](mailto:fahmi.atika@uit.ac.ma) (Atika Fahmi), [qachaou.ahmed@uit.ac.ma](mailto:qachaou.ahmed@uit.ac.ma) (Ahmed Qachaou), [fahoume.mounir@uit.ac.ma](mailto:fahoume.mounir@uit.ac.ma) (Mounire Fahoume), [lhrach.mohamed@uit.ac.ma](mailto:lhrach.mohamed@uit.ac.ma) (Mohamed Lhrach)

Heisenberg's model was used to describe these properties.

## 2. The Heisenberg spin hamiltonian (HSH)

We establish the Heisenberg spin Hamiltonian (HSH) expression of a spin system located at the sites of the lattice of the studied system supposed to contain  $c$  magnetic layers each one consists of  $p$  planes parallel to  $Oxy$ .  $c \times p = N$  is the total number of planes The corresponding HSH contains terms of exchange  $\mathcal{H}^{ex}$ , surface anisotropy  $\mathcal{H}^{sur}$ , applied magnetic field  $\mathcal{H}^{field}$  and the dipole interaction  $\mathcal{H}^{dip}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mathcal{H}_{\parallel}^{ex} + \mathcal{H}_{\perp in}^{ex} + \mathcal{H}_{\perp out}^{ex} + \mathcal{H}^{sur} + \mathcal{H}^{field} + \mathcal{H}_{\parallel}^{dip} + \mathcal{H}_{\perp}^{dip} \\ = & - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{\parallel} \left( \Delta_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right) - \sum_{\langle ii' \rangle} J_{ii'}^{\perp in} (S_i^x S_{i'}^x + S_i^y S_{i'}^y + S_i^z S_{i'}^z) \\ & - \sum_{\langle ii' \rangle} J_{ii'} (S_i^x S_{i'}^x + S_i^y S_{i'}^y + S_i^z S_{i'}^z) - \alpha \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z \\ & + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{(g\mu_B)^2}{2r_{ij}^3} \left[ \vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{S}_i \vec{r}_{ij}) (\vec{S}_j \vec{r}_{ij}) \right] \\ & + \sum_{\langle ii' \rangle} \frac{(g\mu_B)^2}{2r_{ii'}^3} \left[ \vec{S}_i \vec{S}_{i'} - \frac{3}{r_{ii'}^2} (\vec{S}_i \vec{r}_{ii'}) (\vec{S}_{i'} \vec{r}_{ii'}) \right] \end{aligned} \quad (1)$$

Using the Holstein-Primakoff transformations from spin operators to creation/annihilation operators ( $a^{\pm}/a$ ) followed by a Fourier transformation in the  $Oxy$  plane and expressing the different sums on pairs of neighbors of a given  $TM$  atom with the concentrations  $x_{Co} = 1 - x$  and  $x_{Fe} = x$ , (1) is written for a fcc structure as:

$$\mathcal{H} = \sum_{k_{\parallel}} \sum_{l_z, m}^N \left\{ A_{l_z, m}(k_{\parallel}) a_{k_{\parallel}, l_z}^{\dagger} a_{k_{\parallel}, m} + \frac{1}{2} B_{l_z, m}(k_{\parallel}) \left( a_{k_{\parallel}, l_z}^{\dagger} a_{-k_{\parallel}, m}^{\dagger} + a_{k_{\parallel}, l_z} a_{-k_{\parallel}, m} \right) \right\} \quad (2)$$

Knowing that in TM-based alloys, the effect of the exchange field  $J\vec{S}$  is of the order of  $10^2$  times stronger than that of the surface anisotropy and dipole interactions, these last two effects will be omitted in a 1<sup>st</sup> order calculation. The dynamic matrix elements become  $B_{l_z, m}(k_{\parallel}) = 0$  and  $A_{l_z, m}(k_{\parallel})$  with:

$$\begin{aligned} A_{l_z, m}(k_{\parallel}, x) = & \left\{ 4S_{Co} x_{Co}^2 J_{CoCo}^{\parallel} (1 - \Delta_{CoCo} \Lambda(k_{\parallel})) + 4S_{Fe} x_{Fe}^2 J_{FeFe}^{\parallel} (1 - \Delta_{FeFe} \Lambda(k_{\parallel})) \right. \\ & + 8x_{Co} x_{Fe} J_{CoFe}^{\parallel} \left[ (S_{Co} + S_{Fe}) - \sqrt{S_{Co} S_{Fe}} \Delta_{CoFe} \Lambda(k_{\parallel}) \right] + S_{Co} x_{Co}^2 \left( 4J_{CoCo}^{\perp in} + J_{CoCo}^{\perp out} \right) \\ & + S_{Fe} x_{Fe}^2 \left( 4J_{FeFe}^{\perp in} + J_{FeFe}^{\perp out} \right) + x_{Co} x_{Fe} (S_{Co} + S_{Fe}) \left( 8J_{CoFe}^{\perp in} + J_{CoFe}^{\perp out} \right) + \left[ S_{Co} x_{Co}^2 \right. \\ & \left. \times \left( 2J_{CoCo}^{\perp in} + \frac{1}{2} J_{CoCo}^{\perp out} \right) + S_{Fe} x_{Fe}^2 \left( 2J_{FeFe}^{\perp in} + \frac{1}{2} J_{FeFe}^{\perp out} \right) + x_{Co} x_{Fe} (S_{Co} + S_{Fe}) \right] \end{aligned}$$

### 3. Results and discussion

#### 3.1. Excitation spectrum $E(k_{\parallel}, x)$

Solving the secular equation:  $\det \mathbb{M} = |\mathbb{A}(k_{\parallel}, x) - E(k_{\parallel}, x)\mathbb{I}| = 0$  for  $Co_{1-x}Fe_x/Cu$  systems with  $J^{\parallel} \gg J^{\perp}$ , we have obtained the expression of the magnon spectrum created in volume by plane  $l_z$  and for each  $x$  [7]:

$$E_{l_z}(k_{\parallel}, x) = \alpha(k_{\parallel}, x) - \beta(k_{\parallel}, x) \cos(k_z \frac{a}{2}) \quad (3)$$

where :  $\alpha(k_{\parallel}, x) = e_1(x) - e_2(k_{\parallel}, x) = e_1^{\parallel}(x) + e_1^{\perp}(x) - e_2(0, x)\Lambda(k_{\parallel})$  and

$\beta(k_{\parallel}, x) = 2(x_{Co}^2 J_{CoCo}^{\perp} S_{Co} + x_{Fe}^2 J_{FeFe}^{\perp} S_{Fe} + 2x_{Co}x_{Fe} J_{CoFe}^{\perp} \sqrt{S_{Co}S_{Fe}}) \Sigma^+(k_{\parallel})$  with  $e_1^{\parallel}(x) = 4x_{Co}^2 J_{CoCo}^{\parallel} S_{Co} + 4x_{Fe}^2 J_{FeFe}^{\parallel} S_{Fe} + 8x_{Co}x_{Fe} J_{CoFe}^{\parallel} (S_{Co} + S_{Fe})$ ;  $e_1^{\perp}(x) = 4x_{Co}^2 J_{CoCo}^{\perp} S_{Co} + 4x_{Fe}^2 J_{FeFe}^{\perp} S_{Fe} + 8x_{Co}x_{Fe} J_{CoFe}^{\perp} (S_{Co} + S_{Fe})$ , and  $e_2(0, x) = (4x_{Co}^2 J_{CoCo}^{\parallel} S_{Co} \Delta_{CoCo} + 4x_{Fe}^2 J_{FeFe}^{\parallel} S_{Fe} \Delta_{FeFe} + 8x_{Co}x_{Fe} J_{CoFe}^{\parallel} \sqrt{S_{Co}S_{Fe}} \Delta_{CoFe})$ .

The analysis of the spectra structure in function of concentration  $x$ , thickness layer (number  $p$ ) and surface anisotropy ( $\alpha$ ) allowed us to differentiate two types of modes characterized by two types of sub-bands  $Sb_s$ , formed by the groups  $g_2$  and  $g_3$  of modes created in the surface, and  $Sb_b$  formed by the group  $g_1$  of modes created in the volume, respectively (figure 1(b)).

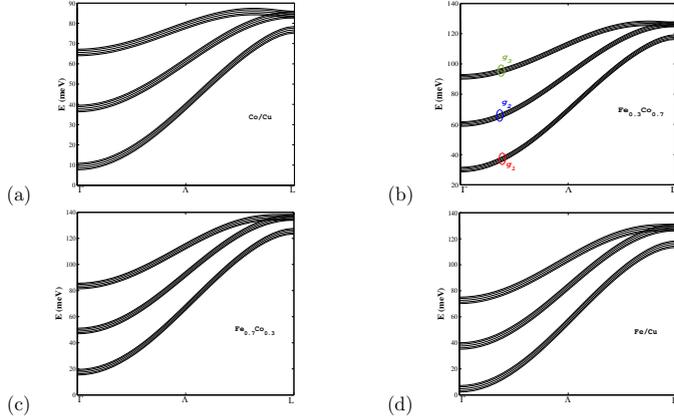


Figure 1: Excitation spectra  $E(k_{\parallel}, x)$  for (a)  $x = 0$  (Co/Cu), (b)  $x = 0.3$ , (c)  $x = 0.7$  and (d)  $x = 1$  (Fe/Cu). We used the values:  $J_{CoCo}^{\parallel} = 83.55K$ ,  $J_{CoCo}^{\perp} = 23K$ ,  $\Delta_{CoCo} = 1.07$ , and  $J_{FeFe}^{\parallel} = 82.39K$ ,  $J_{FeFe}^{\perp} = 21K$ ,  $\Delta_{FeFe} = 1.05$ , and  $J_{CoFe}^{\parallel} = 84.71K$ ,  $J_{CoFe}^{\perp} = 15.08K$ ,  $\Delta_{CoFe} = 1.7$

Moreover, the expression of  $E(k_{\parallel}, x)$  (3) for  $\vec{k}$  in Brillouin zone (BZ) is bounded between two values:  $E_{min}^b = E_{l_z}(k_{\parallel}, k_z = 0, x) = \alpha(k_{\parallel}, x) - \beta(k_{\parallel}, x)$  and  $E_{max}^b = E_{l_z}(k_{\parallel}, k_z, x) = \alpha(k_{\parallel}, x) + c \times \beta(k_{\parallel}, x)$ . This defines an allowed band of finite width  $W_b(k_{\parallel}, x)$  of the wave vectors allowed for this creation by:

$$W_b(k_{\parallel}, x) = |E_{max}^b(k_{\parallel}, x) - E_{min}^b(k_{\parallel}, x)| = |\beta(k_{\parallel}, x)| = |\beta(0, x)| |\Sigma^+(k_{\parallel})| |1 - c| \quad (4)$$

On the other hand, the existence of the lower bound defines the gap of this creation  $E_{gb}(k_{\parallel}, x) = E_{min}^b(k_{\parallel}, x)$ :

$$E_{gb}(k_{\parallel}, x) = 2x_{Co}^2 S_{Co} \left[ 2J_{CoCo}^{\parallel} (1 - \Delta_{CoCo} \Lambda(k_{\parallel})) + J_{CoCo}^{\perp} (2 - \Sigma^+(k_{\parallel})) \right] \\ + 2x_{Fe}^2 S_{Fe} \left[ 2J_{FeFe}^{\parallel} (1 - \Delta_{FeFe} \Lambda(k_{\parallel})) + J_{FeFe}^{\perp} (2 - \Sigma^+(k_{\parallel})) \right] \\ + 4x_{Co} x_{Fe} \left[ 2J_{CoFe}^{\parallel} (S_{Co} + S_{Fe} - \Delta_{CoFe} \sqrt{S_{Co} S_{Fe}} \Lambda(k_{\parallel})) + J_{CoFe}^{\perp} (2(S_{Co} + S_{Fe}) - \sqrt{S_{Co} S_{Fe}} \Sigma^+(k_{\parallel})) \right] \quad (5)$$

The lifetime of these created magnons is also calculated as done in [7] by:

$$\frac{1}{\tau_b(k_{\parallel}, x)} = \frac{2\pi}{\hbar} |E_{gb}(k_{\parallel}, x)|^2 D(x, E_F) \quad (6)$$

The density of states of the alloys is given by:  $D(x, E_F) = x_{Co} D_{Co}(E_F) + x_{Fe} D_{Fe}(E)$  (virtual crystal).

In Figure 2(i), we show the evolution of  $\tau_b^{cal}(k_{\parallel}, x)$  on the  $\Lambda$  axis of symmetry of the BZ and for  $x$  varying.

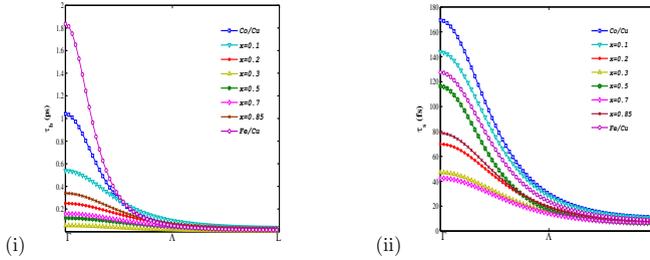


Figure 2: The lifetime of created magnons calculated as a function of  $x$  and  $k_{\parallel}$ : (i)  $\tau_b^{cal}(k_{\parallel}, x)$  and (ii)  $\tau_s^{cal}(k_{\parallel}, x)$ .

These curves have a similar shape when  $x$  varies. When  $k_{\parallel}$  varies and whatever  $x$ , they reach a maximum value at the center  $\tau_b^{cal}(k_{\parallel} = \Gamma, x)$ , then decrease rapidly and become zero near the edge  $L$  of the BZ.

To calculate the excitation spectrum of surface magnons  $E_s(k_{\parallel}, x)$ , we have assumed that the physical mechanisms behind their creation are the same as for volume magnons, with a deformation resulting from the symmetry breaking at the surface level. The existence of these surfaces is represented by a perturbation "d" causing a reinforcement of the exchange in these surfaces:  $J_s = J^{\parallel} = J_b + dJ$ ;  $J_b = J^{\perp}$  for the exchange in the volume. Since the creation gap is a property essentially controlled by the parallel exchange for the surface and the perpendicular one for the volume, we have  $E_{gs}(k_{\parallel}, x) > E_{gb}(k_{\parallel}, x)$  and  $E_s(k_{\parallel}, x)$  is above  $E_{l_z}(k_{\parallel}, k_z, x)$  of volume, as:

$$E_s(k_{\parallel}, x) = E_{max}(k_{\parallel}, x) + \left( de_1^{\parallel}(x) + de_1^{\perp}(x) - de_2(k_{\parallel}, x) + d\beta(k_{\parallel}, x) \right) \quad (7)$$

$de_1^{\parallel}(x) + de_1^{\perp}(x) - de_2(k_{\parallel}, x) + d\beta(k_{\parallel}, x)$  represents the variation energy caused by "d". A "rate" of creation of magnons in the surface is defined as the ratio  $\eta(k_{\parallel}, x)$  of the exchange energy transferred ( $d\beta = \frac{\beta}{2}$ ) in one of the two neighboring planes  $l_z \pm 1$ , by the variation of the exchange energy caused by "d" in the plane  $l_z$  itself ( $de_1^{\parallel} + de_1^{\perp} - de_2$ ):

$$\eta(k_{\parallel}, x) = \frac{\frac{1}{2}\beta(k_{\parallel}, x)}{de_1^{\perp}(x) + de_1^{\parallel}(x) - de_2(k_{\parallel}, x)} \quad (8)$$

allowing to express  $E_s(k_{\parallel}, x)$  by:

$$E_s(k_{\parallel}, x) = E_{max} + \frac{\beta(k_{\parallel}, x)}{2 |\eta(k_{\parallel}, x)|} (1 + |\eta(k_{\parallel}, x)|) \quad (9)$$

For  $Fe_xCo_{1-x}/Cu$ , the fact that  $J^{\parallel} \gg J^{\perp}$  leads to a necessary and sufficient condition for the creation of magnons on the surface expressed by:  $\eta(k_{\parallel}, x) < -1$ . In addition, taking into account the ratio of the values of the different variations  $de_1^{\parallel}$ ,  $de_2$  and  $d\beta$ , we have:  $-2 < \eta(k_{\parallel}, x) < -1 \iff \exists \varepsilon > 0 : -(2 - \varepsilon) \leq \eta \leq -(1 + \varepsilon) \iff \eta_1(\varepsilon) \leq \eta \leq \eta_2(\varepsilon)$  with  $\eta_1(\varepsilon) = -2 + \varepsilon$  and  $\eta_2(\varepsilon) = -1 - \varepsilon$ , for any value of  $\varepsilon \leq 0.5$ . This shows the existence of two bounds  $E_s^1$  and  $E_s^2$  of the range of values of  $E_s(k_{\parallel}, x)$ :

$$\begin{cases} E_s^1 = E_s^1(k_{\parallel}, x, \eta_1(\varepsilon)) = E_{max}(k_{\parallel}, x) + \frac{\beta(k_{\parallel}, x)}{2|\eta_1(k_{\parallel}, x)|} (1 + |\eta_1(k_{\parallel}, x)|) \\ E_s^2 = E_s^2(k_{\parallel}, x, \eta_2(\varepsilon)) = E_{max}(k_{\parallel}, x) + \frac{\beta(k_{\parallel}, x)}{2|\eta_2(k_{\parallel}, x)|} (1 + |\eta_2(k_{\parallel}, x)|) \end{cases} \quad (10)$$

giving a permissible band width  $W_s(k_{\parallel}, x) = |E_s^2 - E_s^1|$  and a magnon creation gap on the surface defined by the lower bound:

$$Eg_s(k_{\parallel}, x) = E_s^1(k_{\parallel}, x, \eta_1(\varepsilon)) = E_{max}(k_{\parallel}, x) + \frac{\beta(k_{\parallel}, x)}{2 |\eta_1(k_{\parallel}, x)|} (1 + |\eta_1(k_{\parallel}, x)|) \quad (11)$$

The lifetime canonically conjugated to this creation gap is also given by [7] :

$$\frac{1}{\tau_s(k_{\parallel}, x, \eta_1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |Eg_s(k_{\parallel}, x, \eta_1)|^2 D(x, E_F) \quad (12)$$

Figure 2(ii) presents the curves of  $\tau_s(k_{\parallel}, x, \eta_1(\varepsilon = 0.25))$  calculated by maintaining the surface magnon creation factor  $\eta(k_{\parallel}, x)$  open governed by the condition  $-2 \leq \eta \leq -1$ . They also show a global behavior very similar to that obtained for volume magnons with maxima  $\tau_s^{max}(k_{\parallel}, x) = \tau_s(k_{\parallel} = \Gamma, x)$  and minima  $\tau_s^{min}(k_{\parallel}, x) = \tau_s(k_{\parallel} = L, x)$ . In Figure 3, we present a comparison of our results with the available experimental ones [1, 3]. The result of this comparison is very good, which allowed us to make another determination of the creation rate  $\eta$ . The resulting values of  $\tau_s(k_{\parallel}, x)$  vary between tens and hundreds of femtoseconds (fs). Such a short lifetimes would be attributed both to the strong coupling between the  $d$  and  $s$  states of the two TM involved in our samples and to the strong spatial confinement of the magnons created at the surface. Moreover, a comparison between the two types of magnons created shows that although  $\tau_s(k_{\parallel}, x)$  and  $\tau_b(k_{\parallel}, x)$  follow a similar behavior, the amplitude of  $\tau_s(k_{\parallel}, x)$  is always smaller than that of  $\tau_b(k_{\parallel}, x)$ . The confinement of surface magnons is therefore much stronger than that of volume magnons.

### 3.2. Magnetization per spin

The magnetization by spin, for our multilayer constituted by  $N = cp$  planes  $l_z$ , is expressed in (BZ) and for a surface  $s$  of the unit cell by:

$$M_{cal}^z(x, T) = 1 - \frac{1}{S} \frac{1}{N} \frac{s}{(2\pi)^2} \sum_{l_z, k_{\parallel} \in BZ} \int \langle a_{k_{\parallel}, l_z}^+ a_{k_{\parallel}, l_z} \rangle dk_x dk_y \quad (13)$$

$$= 1 - \frac{1}{S} \frac{1}{N} \frac{s}{(2\pi)^2} \sum_{l_z, k_{\parallel} \in BZ} \int \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{l_z}(k_{\parallel}, x)}{k_B T}\right) - 1} dk_x dk_y \quad (14)$$

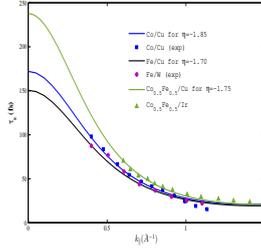


Figure 3: lifetimes of surface magnons  $\tau_s^{cal}(k_{\parallel})$  (solid lines) compared to measured data  $\tau_s^{exp}(k_{\parallel})$  (symbols [1, 3]) for:  $x = 0$  ( $Co/Cu$ ) giving the best agreement with  $\eta = -1.85$  and  $x = 1$  ( $Fe/Cu$ ) with  $\eta = -1.7$  and  $x = 0.5$  with  $\eta = -1.75$ .

Then, using the same calculation as in [7], we have for  $k_B T \ll E_{l_z}(k_{\parallel}, x) < \frac{k_B T_C}{3}$ :

$$M_{cal}^z(x, T) = 1 - g_{\frac{3}{2}}(z) \frac{1}{(2\pi k_B^{-1})^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{(e_2(0, x) + \beta(0, x)) (\beta(0, x))^{\frac{1}{2}}} T^{3/2} \quad (15)$$

$g_{\frac{3}{2}}(z)$  is the function of Bose.  $M_{cal}^z(x, T)$  behaves in  $T^{3/2}$  Bloch law, as usual for  $3D$  systems. However, for higher temperatures such as:  $E_{l_z}(k_{\parallel}, x) \ll k_B T < \frac{k_B T_C}{3}$ , it behaves in  $T \ln T$  as in  $2D$  systems:

$$M_{cal}^z(x, T) = 1 - \frac{(2\pi S)^{-1}}{e_2(0, x) + \beta(0, x)} k_B T \ln \left[ \frac{2k_B T}{([e_1(x) - e_2(0, x)] \left( 1 + \sqrt{1 - \left( \frac{\beta(0, x)}{e_1(x) - e_2(0, x)} \right)^2} \right))} \right] \quad (16)$$

As shown in figures 4, the agreement of  $M_{cal}^z(x, T, H)$  with the results of measurements  $M_{exp}^z(x, T, H)$  is very satisfactory.

#### 4. Conclusion

A contribution to the theoretical study of the alloying effect on the existence and the evolution of magnons created in volume and surface in ferromagnetic multilayers  $Co_{1-x}Fe_x/Cu$  is obtained using the Heisenberg model. The existence of these excitations in two families of magnons created in volume and in surface is demonstrated. These two families of magnons are characterized by different properties such as allowed bands, gaps, lifetimes and creation stabilities. The calculated lifetimes are in very good agreement with previous experimental results, suggesting a stronger character of the confinement of magnons created in surfaces.

The magnetization per spin is also calculated. The comparison with the experimental results is very satisfactory. Its thermal evolution shows that when the temperature increases, a phase transition from a three-dimensional to a two-dimensional behavior exists for any value of  $x$ .

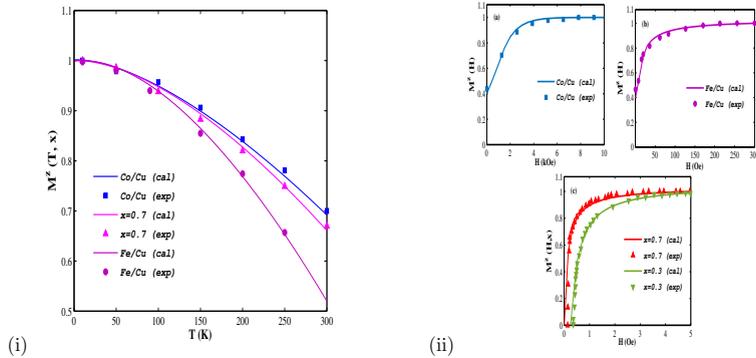


Figure 4: Comparison between  $M_{cal}^z(x)$ (Solid lines) and  $M_{exp}^z(x)$  (symbols [2]): (i)  $M^z(x, T)$ , for température  $T$  varying and for  $x = 0$  ( $Co/Cu$ ),  $x = 0.3$  and  $x = 0.7$  and for  $x = 1$  ( $Fe/Cu$ ) and (ii)  $M^z(x, H)$  for an applied magnetic field  $H$  parallel to the surface layer varying and for (a)  $Co/Cu$ , (b)  $Fe/Cu$ , (c)  $Co_{0.3}Fe_{0.7}/Cu$  et  $Co_{0.7}Fe_{0.3}/Cu$ .

## References

- [1] Y. Zhang, T.H. Chuang, Kh. Zakeri, J. Kirschner. Pys. Rev. Lett., 109 (2012) 087203.
- [2] I. L. Graff, A. Traverse, J. Geshev, S. R. Teixeira, L. Amaral. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B., 257 (2007) 424–427.
- [3] H. J. Qin, Kh. Zakeri, A. Ernst, T. H. Chuang, Y. J. Chen, Y. Meng, J. Kirschner. Phys Rev B., 88 (2013) 020404-5.
- [4] J. M. MacLaren, T. C. Schulthess, W. H. Butler, R. Sutton, M. McHenry. J. Appl. Phys., 85 (1999) 4833-4835.
- [5] D. Kim, J. Hong. J. Magn. Magn. Mater., 321 (2009) 1821–1827.
- [6] A. N. Popova. J. Phys. Conf. Ser., 345 (2012) 012030-4.
- [7] A. Fahmi, A. Qachaou. Physica B., 404 (2009) 2474–2480. A. Qachaou, M. Mehdioui, N. Ait Labyad, A. Fahmi, M. Fahoume, M. Lharch, M. Elharfaoui. Physica A 515 (2019) 771–784. N. Ait Labyad, A. Qachaou, A. Fahmi, M. Fahoume. Can. J. Chem., 95 (2017) 867–870. M. Mehdioui, A. Fahmi, H. Lassri, M. Fahoume, A. Qachaou. J. Magn. Magn. Mater., 352 (2014) 107-108. A. Qachaou, M. Mehdioui, N. Ait Labyad, A. Fahmi, M. Lharch. J. Superconductivity and Novel Magnetism 32 (2019) 667–676



**SÉANCE IV**  
**ÉLECTRONIQUE DE SPIN**  
**ET MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES**



# ELABORATION, CARACTÉRISATION ET MODÉLISATION DE NANOMATÉRIAUX À BASE DE FER

*M. SAHLAOUI, M. SAJIEDDINE, A. RAZOUK, A. EL BOUBEKRI,  
M. OUNACER, S. TILLOUI, B. RABI, S. EDDAHRI*

*Laboratoire de Physique des Matériaux, Faculté des Sciences et Techniques,  
Université Sultan Moulay Slimane, Béni Mellal*

## Résumé

Dans notre laboratoire, nous élaborons des nanomatériaux magnétiques en couches minces sous formes de rubans ou en grains nanométriques. Nous effectuons la caractérisation structurale par la diffraction aux rayons X ou par microscopie électronique. Nous déterminons les propriétés magnétiques en utilisant la spectrométrie Mossbauer et le Magnétomètre à Echantillon Vibrant. Ainsi nous déterminons le pouvoir de refroidissement des échantillons obtenus. D'autre part, nous avons réalisé des simulations Monte Carlo qui permettent d'interpréter les différents résultats en fonction de la taille des grains, la rugosité de la surface ou la présence des défauts au niveaux de ces nanomatériaux.

## Introduction

Le magnétisme est un phénomène purement quantique qui est stimulé par des motivations à la fois fondamentales et pratiques pour l'étude de différentes nanostructures. Ces matériaux nanostructurés se distinguent des matériaux polycristallins conventionnels par la taille des cristallites qui les composent. Défini de manière large, le terme nanostructure est utilisé pour décrire des matériaux caractérisés par des caractéristiques structurelles dans la gamme de  $\approx 1-100$  nm.

Les nanoparticules sont intéressantes du point de vue fondamental en raison de leur taille extrêmement petite. L'augmentation du rapport surface / volume avec une taille décroissante se traduit par une importance accrue des joints de grains (c'est-à-dire des énergies de surface), en particulier dans la plage «réelle» du nanomètre ( $\leq 10$  nm).

Les nanoparticules magnétiques présentent une variété de comportements magnétiques inhabituels par rapport aux matériaux massifs, principalement en raison des effets de surface / interface, y compris la rupture de symétrie, l'environnement électronique / le transfert de charge et les interactions magnétiques.

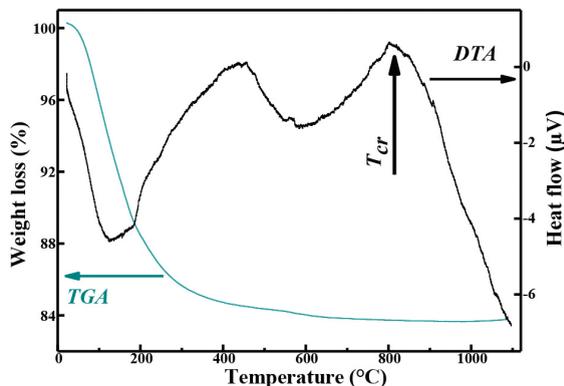
## Elaboration

Dans notre laboratoire, les thèmes que nous traitons portent sur des nanomatériaux magnétiques. Différents procédés d'élaboration sont utilisés. Pour élaborer des rubans magnétiques, un précurseur amorphe sous forme de rubans typiquement de 40 à 50  $\mu\text{m}$  d'épaisseur (verre métallique) est d'abord obtenu à partir de la fusion du lingot parent avec une composition appropriée en utilisant une machine de filage à l'état fondu par une technique de solidification rapide. Puisque l'état amorphe est métastable, lors d'une cristallisation contrôlée au-dessus de la température de cristallisation, des grains nanocristallins se dispersent dans une matrice amorphe résiduelle. Il a été démontré que les nanocomposites magnétiques composés de cristaux magnétiques nanostructurés de 10 à 15 nm intégrés dans une matrice amorphe présentent d'excellentes propriétés magnétiques douces et ont trouvé leurs applications dans les transformateurs, les appareils inductifs, etc.

D'autre part des nano-ferrites ont été élaborés pour des applications dans le domaine de la magnétocalorie et l'hyperthermie. Il s'agit ici de synthétiser par différentes méthodes des nanomatériaux à base de fer (spinelles ou pérovskites). L'objectif recherché d'un tel travail est d'optimiser les paramètres qui gouvernent aussi bien la structure que le comportement magnétique de tels matériaux afin d'aboutir à des compositions pour lesquelles l'effet magnétocalorique est important ou présentant des réponses hyperthermiques remarquables. Ainsi, nous avons obtenus dans notre laboratoire des grains nanométriques dont nous citons quelques exemples :  $Ni_{0,5}Zn_{0,5}Fe_2O_4$ ,  $Co_{1-x}Mg_xFe_2O_4$ ,  $CoAl_xFe_{2-x}O_4$ ,... [1,2,3]

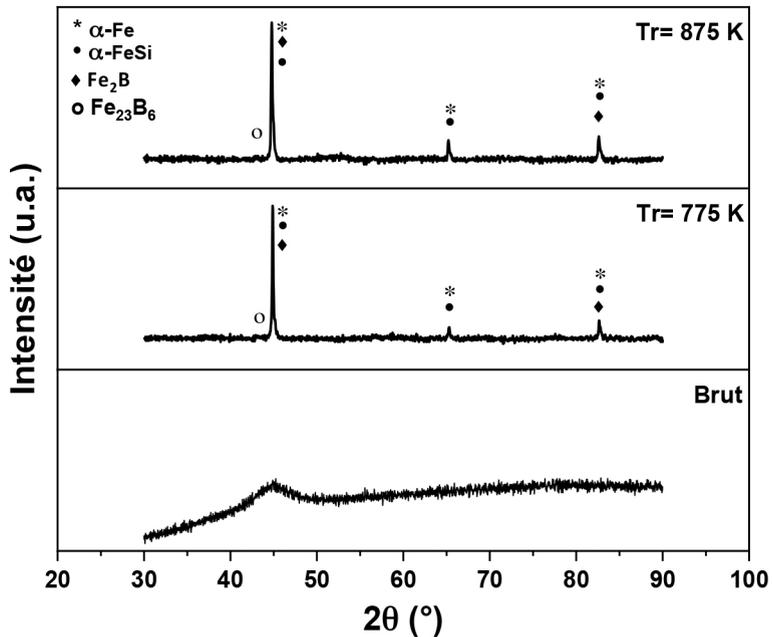
## Caractérisation

Différentes techniques de caractérisation sont utilisées. Le comportement de cristallisation des échantillons a été étudié par analyse thermique différentiel (ATD) (figure 1).

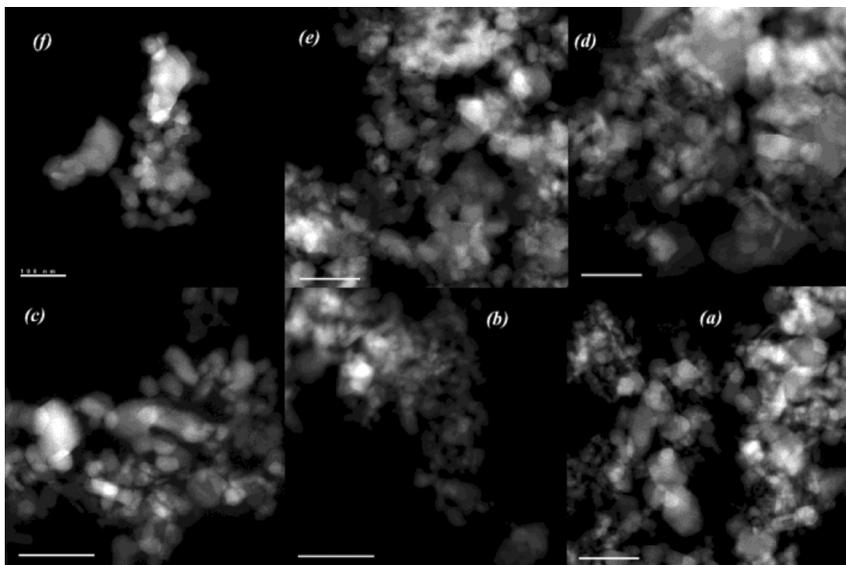


**Figure 1** : Courbes ATD-ATG correspondant aux mesures thermiques réalisées sur des échantillons préparés à base de FeCrSiB;  $T_{cr}$  représente la température de cristallisation.

La diffraction des rayons X confirme l'état structural des échantillons (figure 2), les résultats montrent l'apparition des phases obtenues après recuit. Le microscope électronique à balayage permet d'analyser la microstructure, identifier les éléments chimiques présents dans les matériaux (figure 3) et déterminer la taille des grains.

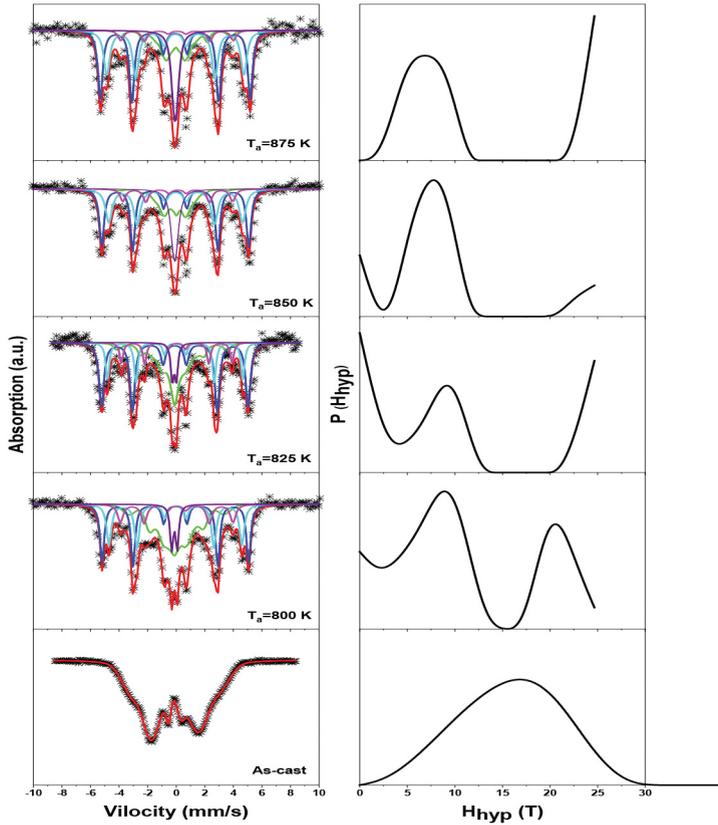


**Figure 2 :** Evolution des spectres de diffraction des rayons X de l'alliage amorphe  $Fe_{78}Cr_2Si_8B_{12}$  après recuit sous vide pendant 2 h.

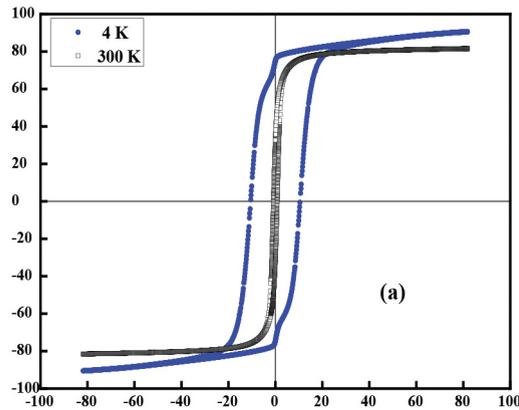


**Figure 3 :** Images obtenues par Microscopie électronique pour différentes compositions du système  $CoAl_xFe_{2-x}O_4$ .  $x = 0.0$  (a),  $x = 0.2$  (b),  $x = 0.4$  (c),  $x = 0.6$  (d),  $x = 0.8$  (e) et  $x = 1.0$  (f).

La spectrométrie Mössbauer remonte aux propriétés hyperfines (figure 4). Les paramètres hyperfins extraits de l'ajustement des spectres Mössbauer montrent l'évolution magnétique et structurale des matériaux étudiés. Le Magnétomètre à Echantillon Vibrant (VSM) sert à mesurer les propriétés magnétiques et magnéto-caloriques. Ainsi des mesures de l'aimantation en fonction de la température et du champ magnétique externe ont été effectuées (figure 5).



**Figure 4 :** Spectres Mössbauer collectés pour différentes températures de recuit  $T_a = 800, 825, 850$  et  $875$  K correspondant à des rubans de  $Fe_{72}Cr_8Si_8B_{12}$ . Les spectres sont enregistrés à  $300$  K

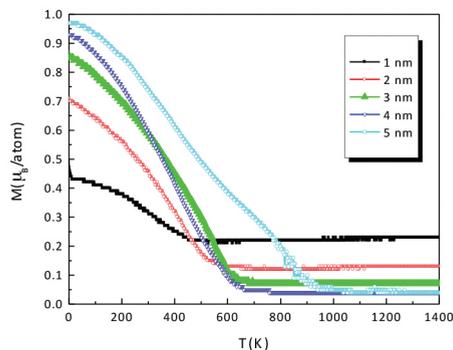


**Figure 5 :** Cycle d'hystérésis enregistré à 4 K (●) et à température ambiante (○) pour des échantillons de  $\text{CoAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$

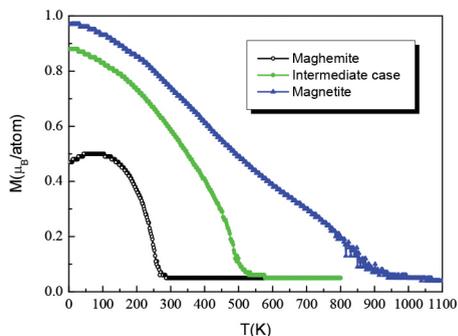
L'effet de la concentration de Fe ou du Cr sur les propriétés structurales et magnétiques de l'alliage  $\text{Fe}_{68+x}\text{Cr}_{12-x}\text{S}_{18}\text{B}_{12}$  ( $x=0, 2, 4, 6, 8$  et  $10$ ) a été étudié [4,5]. Nous étudions aussi l'effet du traitement thermique sur la microstructure et les paramètres hyperfines obtenus par spectrométrie Mössbauer.

Les propriétés magnétocaloriques et le comportement critique des rubans amorphes de  $\text{Fe}_{68+x}\text{Cr}_{12-x}\text{S}_{18}\text{B}_{12}$  ( $x=0, 4$  et  $10$ ) ont été étudiés. Nous trouvons un pouvoir de refroidissement relatif significatif, variant de  $61,4$  à  $137,12 \text{ J.kg}^{-1}$  ( $x=10$ ) pour un changement de champ de  $\Delta H=1$  à  $2 \text{ T}$ . L'absence de champ d'hystérésis et le comportement large de la variation de l'entropie en fonction de la température sont des avantages supplémentaires de ce matériau.

La méthode Monte Carlo est utilisée pour prédire, interpréter et reproduire nos résultats expérimentaux. Elle permet de suivre l'évolution thermique des grandeurs thermodynamiques telles que, l'énergie magnétique, l'aimantation, la chaleur spécifique ou la susceptibilité magnétique [6]. Cette étude permet de remonter aux comportements magnétiques des grains nanométriques en fonction de leur taille, de la rugosité des surfaces ou la présence des défauts (Figures 6 et 7).



**Figure 6 :** Variation thermique de l'aimantation en fonction de la taille des grains nanométriques de magnétite



**Figure 7 :** Dépendance thermique de l'aimantation dans le magnétite, le maghémite et un cas intermédiaire pour une nanostructure spinelle de 5 nm.

## Références

- [1] M. Ounacer, B. Rabi, A. Essoumhi, M. Sajieddine, B.F.O. Costa, M. Emo, A. Razouk, M. Sahlaoui. *Influence of Al<sup>3+</sup> substituted cobalt nano-ferrite on structural, morphological and magnetic properties*. Journal of Alloys and Compounds Volume 854, (2021), 156968
- [2] B. Rabi, A. Essoumhi, M. Sajieddine, J. M. Greneche, E. K. Hlil, A. Razouk & M. A. Valente. *Structural, magnetic and magnetocaloric study of Ni<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> spinel*. Applied Physics A volume 126 (2020) 174.
- [3] M. Ounacer, A. Essoumhi, M. Sajieddine, A. Razouk, A. Fnidiki, F. Richomme, J. Juraszek, S.M. Dubiel, M. Sahlaoui. *Substitutional effect of Mg<sup>2+</sup> on structural and magnetic properties of cobalt nanoferrite*. Journal of Physics and Chemistry of Solids Volume 148, (2021), 109687
- [4] A. El Boubekri, S. Tillaoui, M. Sajieddine, M. Sahlaoui, H. Lassri, E.K. Hlil, E. Agourine, A. Razouk. *Magnetic and magnetocaloric proprieties of Fe<sub>68+x</sub>Cr<sub>12-x</sub>Si<sub>8</sub>B<sub>12</sub> ribbons*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 507 (2020) 166819.
- [5] A. El Boubekri, M. Ounacer, M. Sajieddine, M. Sahlaoui, R. Moubah, H. Lassri, E.K. Hlil, A. Razouk, E. Agouriane. *Effect of Cr substitution on the low temperature magnetization behavior in amorphous Fe<sub>68+x</sub>Cr<sub>12-x</sub>Si<sub>8</sub>B<sub>12</sub> ribbons*. Journal of Non-crystalline Solids Volume 551 (2021) 120437.
- [6] S. Eddahri, A. Razouk, M. Karimou, M. Sajieddine, M. Sahlaoui. *Magnetic behaviors of spinel ferrite nanoparticles: a Monte Carlo simulation*. Applied Physics A volume 125, (2019) 694.

# MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES

*A. HOURMATALLAH, N. BENZAKOUR et A. ZOUAOUI*

*Laboratoire de physique du solide.*

*Faculté des sciences Dhar Mehraz-USMBA - Fès*

Les matériaux magnétiques et leurs applications sont connus depuis le troisième siècle avant notre ère, mais leurs propriétés n'ont vraiment été comprises qu'avec l'avènement de la physique quantique. A l'échelle atomique ce sont le mouvement des électrons autour des noyaux des atomes et le mouvement propre de ces mêmes électrons qui sont à l'origine des deux types de moments magnétiques atomiques : le moment orbital et le spin. L'origine du caractère magnétique d'un matériau est définie par les interactions et la somme de tous les spins atomiques. Dans un matériau ferromagnétique, la configuration la plus stable, est celle où les spins atomiques voisins pointent dans la même direction. Dans un matériau antiferromagnétique, l'énergie est minimale quand deux spins voisins pointent dans des directions opposées. Dans un réseau triangulaire, il est impossible de satisfaire la condition d'antiparallélisme de toutes les paires, on dit alors que les spins sont «frustrés». Dans ce cas, l'état de plus basse énergie du système peut être atteint dans différentes configurations de spins. Les spins fluctuent comme dans un liquide. On parle de liquide de spins quantique.

Parmi les applications classiques des matériaux magnétiques on peut citer les transformateurs, les disques durs, imagerie par résonance magnétique, la réfrigération magnétocalorique. Avec la découverte de la magnétorésistance géante (GMR), qui était le point de départ d'une nouvelle discipline de la physique, l'électronique de spin (spintronique), et la magnétorésistance tunnel, (TMR), l'étude des propriétés magnétiques des matériaux a pris un essor particulier. Trois classes de matériaux sont largement étudiés : les semi-conducteurs magnétiques dilués qui visent à conférer des propriétés magnétiques aux semi-conducteurs traditionnels, les oxydes fonctionnels et notamment les multiferroïques qui sont des matériaux possédant simultanément plusieurs propriétés ferroïques, et les semi-conducteurs organiques, dont les propriétés spintroniques émergentes ne cessent de surprendre.

Ces dernières années, une des tendances forte dans le domaine des matériaux magnétiques est la recherche de nouvelles propriétés fondamentales par des couplages multiphysiques: magnétisme et champ électrique, magnétisme et optique, magnétisme et chaleur (effet magnétocalorique), architectures métal-organique, etc.

## I- Introduction

Les matériaux magnétiques occupent une place importante dans la physique de la matière condensée. L'interprétation de leurs propriétés nécessite l'utilisation des modèles et méthodes les plus élaborés de la physique. C'est un problème à grand nombre de particules en interactions (problème à N corps). L'origine de ces interactions est purement quantique (théorème de Bohr-Miss van Leeuwen, 1919). Le champ d'application de ces matériaux est extrêmement vaste et il est difficile d'imaginer une civilisation industrielle sans matériaux magnétiques.

Parmi les avancées majeures dans le domaine du magnétisme on peut citer les aimants permanents de haute performance, et l'électronique de spin. Les aimants permanents de haute performance dérivent de la découverte de composés d'éléments 3d et de terres rares. Ils ont permis une révolution industrielle majeure pour la miniaturisation et le gain de puissance des dispositifs électromécaniques. La seconde avancée : l'électronique de spin (ou spintronique), qui est le couplage entre les aspects de transport électronique concernant la charge de l'électron et les champs électriques, et le magnétisme concernant le spin de l'électron et les champs magnétiques. La date de naissance de l'électronique de spin est souvent fixée en 1988, année de publication de la découverte de la magnétorésistance géante par les équipes d'Albert Fert et de Peter Grünberg [1, 2], et pour laquelle le prix Nobel de Physique 2007 leur a été attribué. L'électronique de spin a contribué à un renouvellement majeur et continu du magnétisme durant les vingt dernières années. Elle touche des disciplines variées, avec des problématiques d'élaboration, de caractérisation avancée, et combine de multiples effets physiques. Elle présente donc un aspect exigeant de l'inter disciplinarité.

La magnétorésistance géante (GMR) est la variation significative de la résistance électrique entre deux électrodes ferromagnétiques, en fonction de leurs directions d'aimantation respectives. La mise en évidence de nouveaux effets en nanomagnétisme et électronique de spin s'est depuis accélérée à un rythme impressionnant.

Les progrès extraordinaires dans les techniques de dépôt de couches minces, de nanofabrication et de la montée en puissance des outils de simulation ab initio et Monte Carlo ont favorisés les découvertes obtenus dans le domaine des nouveaux matériaux magnétiques. Elles ont d'ores et déjà abouti à l'obtention de matériaux présentant de très fortes polarisations en spin, des propriétés magnétiques pouvant être modulées par un champ électrique, de très grands temps de vie de spin, la magnétorésistance tunnel (TMR), renversement précessionnel de l'aimantation, couple et transfert de spin, dans le domaine des mémoires, les capteurs à base de vannes de spin qui ont permis des gains considérables de densité d'enregistrement des disques durs, renversement optique de l'aimantation.

Parmi les matériaux magnétiques intensivement étudiés actuellement, on peut citer les systèmes spinelles magnétiques, les matériaux magnétiques à base de nitrures de métaux de transition (TMNs), et les semi-métaux ferromagnétiques. Ce sont des systèmes présentant des propriétés électroniques qui varie de l'isolant au métallique et parfois semi-métallique. Ces matériaux possèdent les propriétés les plus recherchées dans les applications technologiques comme : une forte polarisation en spin, des propriétés magnétiques modulables par un champ électrique, l'effet magnéto-calorique, la piézoélectricité, une température de Curie au-dessus de la température ambiante et d'autres propriétés thermiques.

## II- Antipérovskites $TM_4N$ (TM=Mn, Cr, Co)

Les matériaux antiperovskites sont des matériaux très importants du point de vue technologique en raison de leur grande stabilité et de leur grande dureté, ce qui les rend utiles dans les milieux à haute température, dans les applications de revêtement dur et dans les dispositifs spintroniques tels que la mémoire non volatile [3-8]. Les antiperovskites cubiques à base d'azote de formule  $TM_{4N}$  (TM métaux de transition) constituent une branche relativement inconnue de la famille des pérovskites. En générale, les  $TM_4N$  présentent des propriétés mécaniques et magnétiques très intéressantes et ils présentent un changement de phase magnétique sous l'effet de la température.

Les matériaux magnétiques à base de nitrures de métaux de transition (TMNs) présentent un grand intérêt pour la physique, la chimie et la technologie. Parmi ces TMNs, les nitrures de métaux de transition de formule générale  $TM_4N$  (TM = Fe, Mn, Co et Ni) ont attiré beaucoup d'attention en raison de leurs excellentes propriétés structurales, électroniques et magnétiques. Ces TMNs sont très importants en raison de leurs applications industrielles possibles dans de nombreux domaines, notamment dans l'enregistrement magnétique [9, 10], les contacts à injection de spin dans les appareils de spintronique [11] et les matériaux absorbant les micro-ondes [12].

Pour le composé  $Mn_4N$ , les résultats obtenus montrent qu'il a un comportement métallique avec un arrangement ferrimagnétique de spins et un faible moment magnétique. L'étude de la densité d'état révèle que le DOS (figure 1) autour du niveau de Fermi provient principalement des contributions de la bande 3d de l'atome Mn.

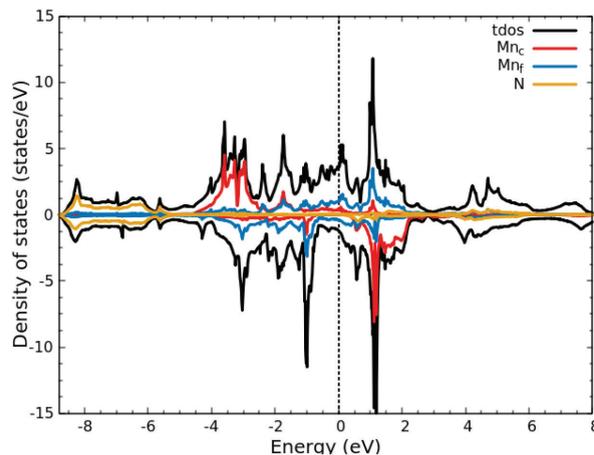


Figure 1 : Densité d'états totale et partielle de  $Mn_4N$  [17]

Pour le composé Cr4N, les résultats obtenus montrent qu'il est plus stable énergétiquement dans un arrangement ferrimagnétique de spins. L'étude de la densité d'état révèle que Cr4N a un comportement métallique et que le DOS autour du niveau de Fermi provient principalement des contributions de bande 3d de Cr. (figure 2).

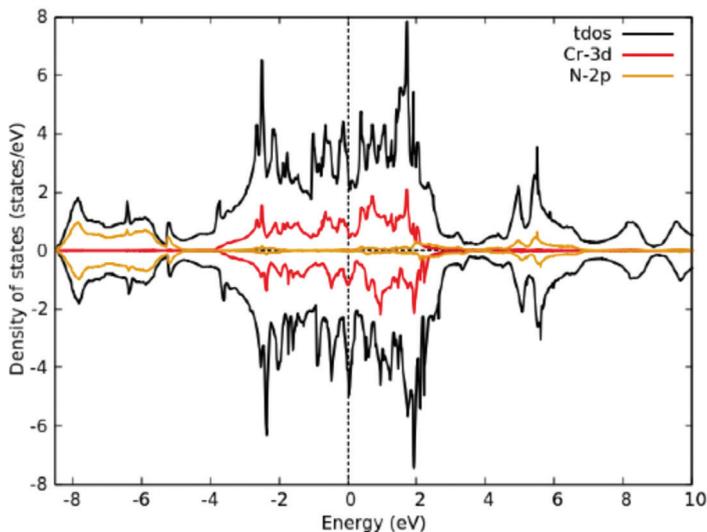


Figure 2 : Densité d'états totale et partielle de Cr4N [18]

Pour le composé Co4N, les résultats montrent qu'il est plus stable dans un arrangement ferromagnétique avec un moment magnétique plus élevé, un rapport de polarisation de spin élevé. L'étude de la densité d'état révèle un comportement métallique. (figure 3).

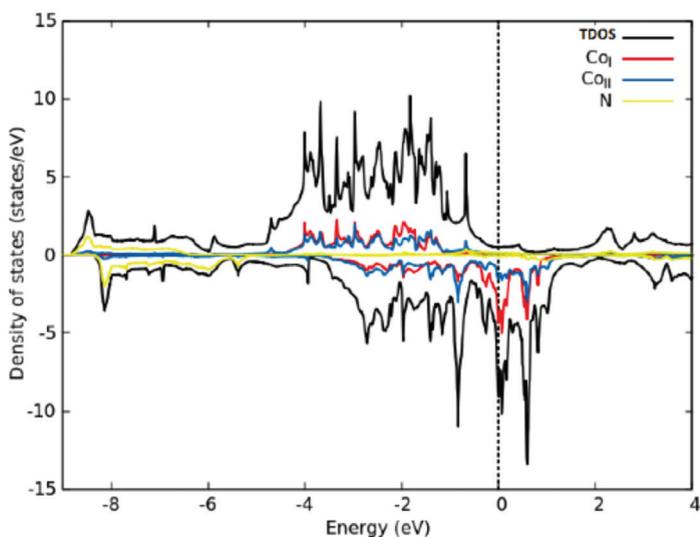


Figure 3 : Densité d'états totale et partielle de Co4N [19]

Les températures de transition ainsi que les températures de Debye et de fusion de ces trois systèmes sont très supérieures à la température ambiante.

### III- Ferrites spinelles $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$

Un des défis majeurs de la spintronique est l'injection de courant électrique polarisé en spin d'un métal vers un semi-conducteur, en raison de la grande différence de densité de porteurs dans les deux matériaux. Une des solutions possibles est l'injection à partir d'un semi-conducteur magnétique dilué ou semi-conducteur ferromagnétique. Une approche très importante consiste à créer un courant polarisé en spin à partir d'une source non magnétique en utilisant une barrière tunnel d'isolant ferromagnétique ou ferrimagnétique. Cette approche appelée phénomène de filtrage de spin, repose sur la transmission préférentielle d'une seule direction de spin par effet tunnel à travers des couches isolantes et magnétiques [13]. La plupart des matériaux utilisés dans ce domaine ne fonctionnent qu'à basse température, car les températures de l'ordre magnétique de ces matériaux sont basses [13]. Alors que l'injection de spin à température ambiante est très intéressante du point de vue utilisation technologique, il existe peu de matériaux ayant les propriétés électriques et magnétiques requises à cette température. Les ferrites spinelles présentent des bons candidats pour ces applications [14], car ces matériaux ayant des températures critiques supérieures à la température ambiante, et des résultats prometteurs de filtrage de spin ont été récemment obtenus à basses températures par  $NiFe_2O_4$  [14] et à température ambiante par  $C_0Fe_2O_4$  [15].

Pour les ferrites spinelles, nous avons étudié l'effet de substitution d'ions non magnétiques A (A=Cd ou Zn) dans les sites tétraédriques, sur les propriétés électroniques et magnétiques du système  $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$ , en utilisant le calcul de DFT et la méthode de développement en séries à haute température combinée avec les approximants de Padé. Les résultats obtenus montrent que le paramètre de réseau cristallin calculé par DFT augmente avec l'augmentation de la concentration de l'ion non magnétique A. Le moment magnétique des ions Fe et B (Co ou Ni) augmente avec la concentration x. L'étude de la densité d'états (figure 4) et de la structure de bande montre que le système  $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$  a un caractère semi-métallique pour la concentration  $x = 0.5$  dans le cas B=Co et un caractère semi-conducteur pour les autres cas. La substitution de l'ion non magnétique A (Cd, Zn) dans les sites A provoque une augmentation de l'aimantation totale et une diminution des intégrales des échanges  $|J_{AA}|$  et  $|J_{AB}|$ . Le calcul par la méthode de HTSE et de la théorie du champ moyen montre que la température de Curie diminue avec l'augmentation de la concentration, x de l'ion A.

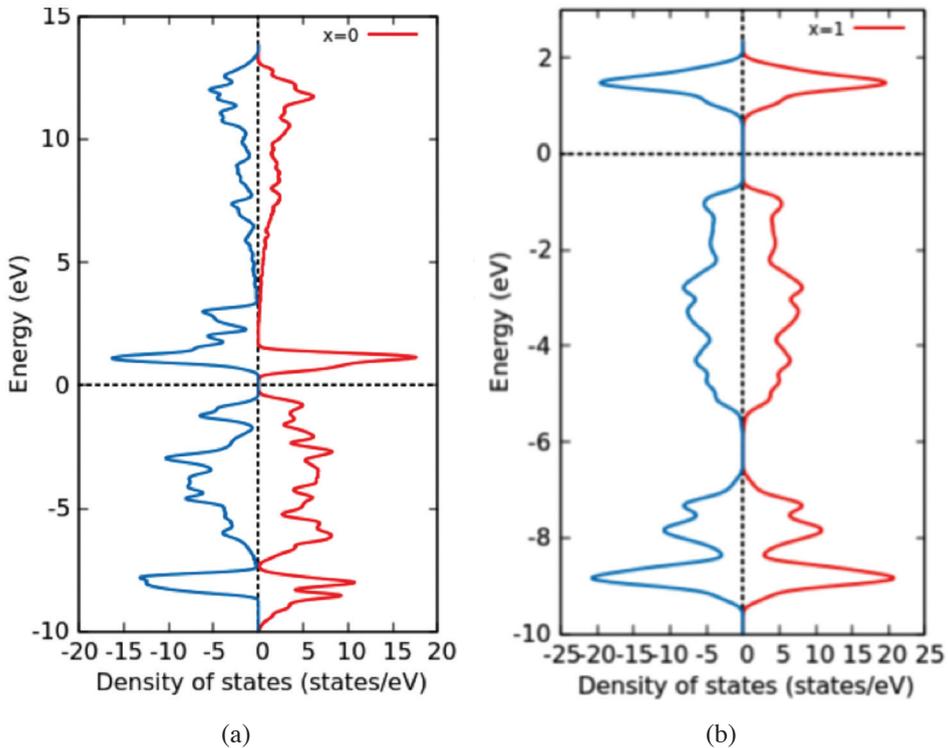
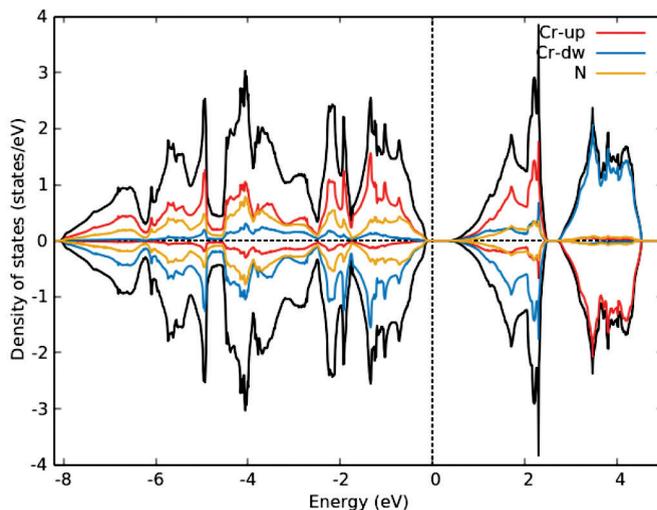


Figure 4 : Densité d'états totale de : (a) CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> et (b) CdFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> [20]

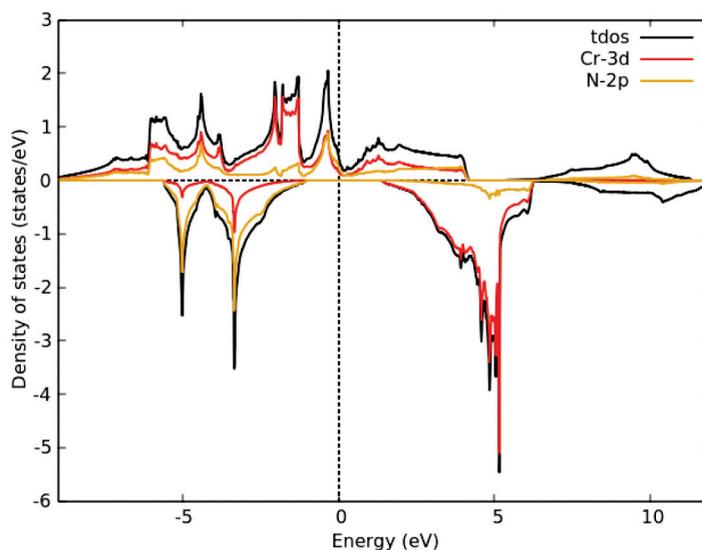
#### IV- Les semi-métaux CrX (X=N et As)

Les semi-métaux ferromagnétiques (HMF) sont des matériaux très souhaitables dans les dispositifs de spintronique, car ces matériaux sont 100% polarisés en spin et un seul type de spin contribue à la conduction. Le comportement des HMF a été prédit pour la première fois par Groot et al. [16]. Les HMF sont sollicités dans le domaine de stockage de l'énergie et dans les domaines des transports et des communications. Les composés CrX (avec X=N, As), sont caractérisés par une forte résistance mécanique et une température de fusion élevée.

Les résultats obtenus par la DFT (GGA+U) montrent que le CrN a un comportement semi-conducteur pour l'arrangement AFM (figure 5) et un comportement semi-métallique dans l'arrangement FM (figure 6). CrN subit des transitions de phases structurales et magnétiques d'une structure cubique NaCl antiferromagnétique à une structure orthorhombique non magnétique (phase Pnma) à une pression de 201 GPa.

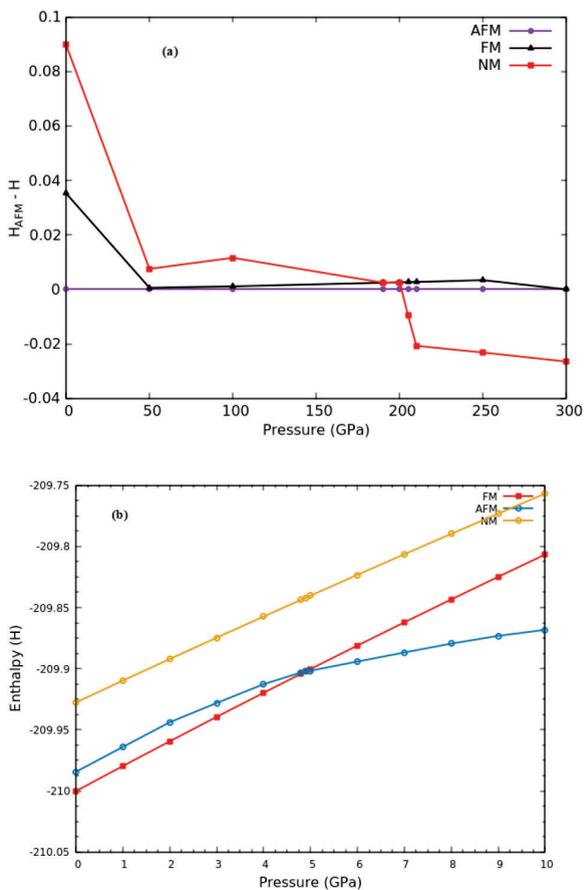


**Figure 5 :** Densité d'états totale et partielle de CrN en configuration AFM [21]

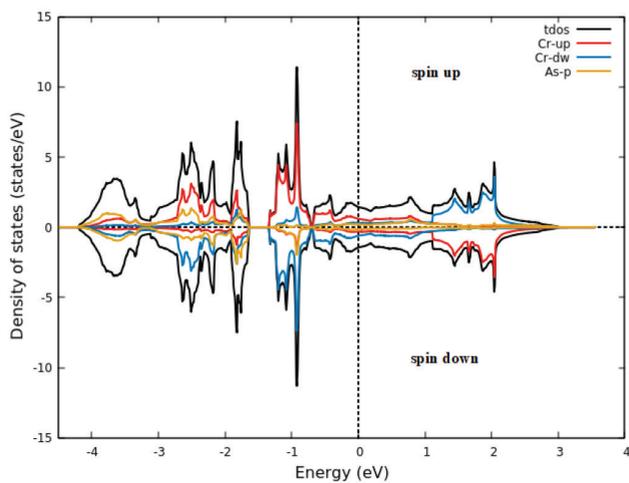


**Figure 6 :** Densité d'états totale et partielle de CrN en configuration FM [21]

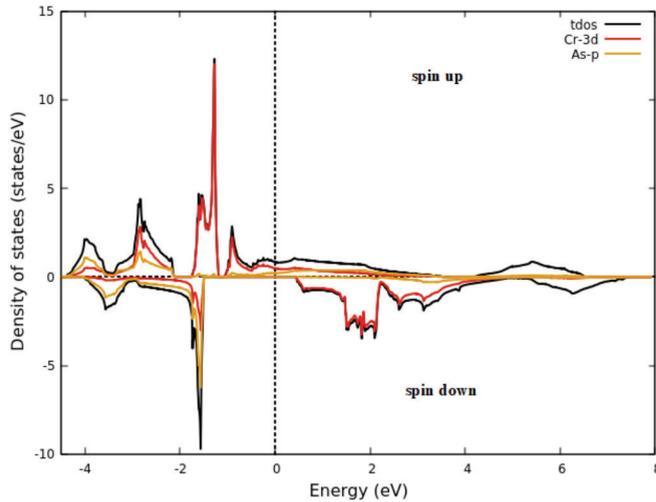
Dans le cas du système CrAs, les résultats montrent qu'à l'état fondamental la structure ZB-CrAs est plus stable en configuration FM. À 5 GPa CrAs-FM subit des transitions de phases structurales et magnétiques vers une structure Pnma antiferromagnétique (figure 7). L'étude de la densité d'états révèle (figure 8) montre que l'état fondamental de ZB-CrAs a un comportement métallique pour la configuration AFM et semi métallique pour la configuration FM (figure 9).



**Figure 7 :** Enthalpies par cellule élémentaire de différentes configurations en fonction de la pression : (a) pour CrN [21], (b) pour CrAs [22]



**Figure 8 :** Densité d'états totale et partielle de CrAs en configuration AFM [22]



**Figure 9 :** Densité d'états totale et partielle de CrAs en configuration FM [22]

D'après les simulations de Monte Carlo, les températures critiques obtenues sont  $T_C = 310\text{K}$  et  $T_C = 790\text{K}$  pour CrN et CrAs, respectivement. Le composé CrX dans un arrangement ferromagnétique a une polarisation élevée et représente un bon candidat pour les applications de spintronique.

## V- Conclusion

Les améliorations et les progrès extraordinaires dans les techniques de croissance cristalline et la montée en puissance des outils de simulation *ab initio* et Monte Carlo ont favorisés les découvertes de nouveaux matériaux magnétiques. De nouvelles fonctionnalités sont créées, par exemple dans l'électronique de spin, possibilité d'un contrôle dynamique de spin et de charge à travers l'utilisation de champs électriques et magnétiques externes, la lumière ou le courant polarisé en spin. Ceci est devenu possible grâce à la découverte des semi-conducteurs magnétiques dilués, les oxydes fonctionnels et les semiconducteurs organiques avec des comportements multiferroïques ou semi-métalliques.

## VI- Références

- M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Physical review letters*, vol. 61, n°. 21, p. 2472, 1988.
- P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. Brodsky, and H. Sowers, *Physical review letters*, vol. 57, n°. 19, p. 2442, 1986.
- F. Parker, K. Takano, and A. Berkowitz, *Physical Review B*, vol. 61, n°. 2, p. R866, 2000.
- A. Anzai, F. Takata, T. Gushi, K. Toko, and T. Suemasu, *Journal of Crystal Growth*, vol. 489, pp. 20-23, 2018.
- X. Shen, A. Chikamatsu, K. Shigematsu, Y. Hirose, T. Fukumura, and T. Hasegawa, *Applied Physics Letters*, vol. 105, n°. 7, p. 072410, 2014.

- T. Komori, A. Anzai, T. Gushi, K. Toko, and T. Suemasu, *Journal of Crystal Growth*, vol. 507, pp. 163-167, 2019.
- T. He, Q. Huang, A. Ramirez, Y. Wang, K. Regan, N. Rogado, M. Hayward, M. Haas, J. Slusky, K. Inumara et al., *Nature*, vol. 411, n°. 6833, pp. 54-56, 2001
- M. Mekata, *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 17, n°. 5, pp. 796–803, 1962.
- H. Jia, X. Wang, W. Zheng, Y. Chen, and S. Feng, *Materials Science and Engineering : B*, vol. 150, n°. 2, pp. 121-124, 2008.
- A. Linnik, A. Prudnikov, R. Shalaev, T. Linnik, V. Varyukhin, S. Kostyrya, and V. Burkhovetskii, *Technical Physics Letters*, vol. 39, n°. 2, pp. 143-146, 2013.
- A. Anzai, T. Gushi, T. Komori, S. Honda, S. Isogami, and T. Suemasu, *Journal of Applied Physics*, vol. 124, n°. 12, p. 123905, 2018.
- Y. Duan, Q. Xi, Y. Zhang, M. Wen, and T. Wang, *Applied Physics A*, vol. 120, n°. 3, pp. 1075-1081, 2015.
- J. S. Moodera, T. S. Santos, and T. Nagahama, *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 19, n°. 16, p. 165202, 2007.
- U. Lüders, M. Bibes, K. Bouzehouane, E. Jacquet, J.-P. Contour, S. Fusil, J.-F. Bobo, J. Fontcuberta, A. Barthélémy, and A. Fert, *Applied physics letters*, vol. 88, n°. 8, p. 082505, 2006.
- A. Ramos, M.-J. Guittet, J.-B. Moussy, R. Mattana, C. Deranlot, F. Petroff, and C. Gatel, *Applied Physics Letters*, vol. 91, n°. 12, p. 122107, 2007.
- R. De Groot, F. Mueller, P. Van Engen, and K. Buschow, "New class of materials :half-metallic ferromagnets," *Physical Review Letters*, vol. 50, n°. 25, p. 2024, 1983.
- A. Azouaoui, M. El Haoua, S. Salmi, A. El Grini, N. Benzakour, A. Hourmatallah, and K. Bouslykhane, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, pp. 1-6, 2019.
- A. Azouaoui, N. Benzakour, A. Hourmatallah, and K. Bouslykhane, *Solid State Sciences*, p. 106260, 2020.
- A. Azouaoui, N. Benzakour, A. Hourmatallah, and K. Bouslykhane, *physica status solidi (b)*, 2020.
- A. Azouaoui, M. El Haoua, S. Salmi, A. El Grini, N. Benzakour, A. Hourmatallah, and K. Bouslykhane, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, pp. 1-8, 2020.
- A. Azouaoui, N. Benzakour, A. Hourmatallah, and K. Bouslykhane, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, pp. 1-8, 2020.
- A. Azouaoui, N. Benzakour, A. Hourmatallah, K. Bouslykhane, *Solid State Communications*, p. 114101, 2020.

**SÉANCE V**  
**APPLICATIONS DE LA 1<sup>ÈRE</sup> RÉVOLUTION**  
**QUANTIQUE EN MATIÈRE CONDENSÉE**



# NOUVEAUX CONCEPTS DES CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES DE TROISIÈME GÉNÉRATION

*Mimoun ZAZOUI*

*Laboratoire de physique de la matière condensée et énergies renouvelables, FST  
Mohammedia, Université Hassan II, Casablanca  
Email: zazouimimoun@yahoo.fr*

## Résumé

Le terme photovoltaïque (PV) de troisième génération fait référence à toutes les nouvelles approches visant à dépasser la limite de Shockley-Queisser (SQ) pour une simple jonction. Le rendement de conversion limite est d'environ 33% car il existe des limitations fondamentales des cellules photovoltaïques classiques à jonction unique. Si ces limitations pouvaient être résolues, des concepts photovoltaïques (PV) avec des rendements de conversion dépassant la limite SQ pourraient être développés. Dans cette présentation, nous aborderons plusieurs concepts de troisième génération : cellules PV multi-jonctions, conversion spectrale «up» et «down» et cellules PV à bande intermédiaire. Des nanomatériaux quantiques ont été suggérés comme moyens possibles pour augmenter le rendement de conversion. De tels nanomatériaux semiconducteurs présentent des effets du confinement quantique dans l'espace. Plusieurs concepts font l'objet de plusieurs travaux de recherche de notre laboratoire.

## 1- Introduction

Une cellule photovoltaïque est un composant électronique qui lorsqu'il est exposé au spectre solaire génère une tension électrique par effet photovoltaïque. Toutes les cellules sont créées à partir de matériaux semi-conducteurs. Trois technologies principales de cellules existent suivant leur mode de production :

On trouve dans la 1<sup>ère</sup> génération, les cellules, généralement en silicium, ne comprennent qu'une seule jonction p-n. La technique de fabrication de ces cellules, basée sur la production de «wafers» à partir d'un silicium très pure, reste très énergivore et coûteuse. La limite théorique de rendement de ce type de cellule est de 33% [1]. Les cellules les plus récentes s'approchent chaque année de plus en plus de cette limite avec un rendement de 26.1% [2].

Dans le cas de «couches minces», le semi conducteur est directement déposé par vaporisation sur un matériau support. Le silicium amorphe (a-Si), le tellure de cadmium (CdTe), le diséléniure de cuivre indium (CIS)... font notamment partie de la seconde génération atteignant un rendement de ont un rendement record de 23.3% [2].

Pour améliorer les rendements des cellules, la recherche se tourne actuellement vers plusieurs pistes dont notamment : les Cellules Pérovskites dont le rendement record est 25.2% s'approchant du rendement record d'une cellule PV simple jonction de 29.3 [2,4]; Les cellules multijonctions dont le rendement record mondial est de 37.9% pour une cellule triple jonctions ou à concentration de rendement 47.1% [2,5] ou cellules PV utilisant les nouveaux concepts pour améliorer le rendement de conversion. Notre exposé concerne cette dernière catégorie de cellule PV...

Une solution alternative consiste à introduire une bande d'énergie supplémentaire à l'intérieur de la bande interdite d'une cellule à simple jonction, afin de pouvoir exploiter une grande gamme du spectre de rayonnement solaire. De telles cellules photovoltaïques sont appelées cellules photovoltaïques à bande intermédiaire et leur rendement théorique maximale d'environ 63% supérieure à celle des cellules à simple jonction [6]. En particulier, Luque et al. ont proposé en 1997 l'insertion d'une bande intermédiaire dans les cellules photovoltaïques afin de réduire les pertes énergétiques par l'exploitation des photons de faible énergie [7]. Celles à bande intermédiaire (IB) permettent deux transitions supplémentaires pour les photons dont l'énergie est inférieure à l'énergie de la bande interdite. Cela aide à absorber plus de lumière et à générer plus de courant, contribuant ainsi à l'amélioration de rendement de conversion photovoltaïque. Des nanomatériaux quantiques ont été suggérés comme moyens possibles de créer la bande intermédiaire [8]. De tels nanomatériaux semiconducteurs présentent des effets du confinement quantique dans l'espace en particulier les boîtes quantiques (QDs). Ces dernières présentent un grand intérêt lié au confinement des porteurs de charges dans les trois directions de l'espace qui donne lieu à une quantification des niveaux énergétiques. L'insertion des QDs dans des structures des cellules photovoltaïques a suscité un grand intérêt par la communauté de recherche scientifique du domaine du photovoltaïque. La nature du confinement quantique tridimensionnel des états électroniques dans les QDs et la possibilité d'optimiser le rendement de conversion énergétique via le contrôle de ses dimensions est la raison pour laquelle les boîtes quantiques sont les plus prometteurs pour former la bande intermédiaire [9]. L'objectif de cette présentation est d'étudier et de modéliser ces nanostructures à base des boîtes quantiques pour les cellules photovoltaïques afin d'augmenter le rendement de conversion et dépasser la limite de Shockley-Queisser (SQ). Pour modéliser ces structures, la méthode de différences finies a été utilisée afin d'étudier les propriétés structurelles, optiques et électriques des QDs-IB. Ensuite, l'effet de champ électrique sur les propriétés optiques et électriques ainsi que l'effet de son orientation sur les QDs-IB sera étudié.

## **2- Les principales limitations du rendement de conversion des cellules photovoltaïques à simple jonction**

Le terme photovoltaïque de troisième génération fait référence à toutes les nouvelles approches visant à dépasser le rendement limite de Shockley-Queisser (SQ). La limite

de SQ est une approche thermodynamique pour estimer le rendement maximale d'une cellule simple jonction. Le rendement de conversion d'une cellule photovoltaïque à simple jonction est de 29.3%. Les principales limitations des cellules solaires à jonction classique simple sont schématisées dans la figure 1. En effet, dans les cellules photovoltaïques (PV) à simple jonction, une grande partie de l'énergie des photons les plus énergétiques est perdue sous forme de chaleur car l'énergie des photons est supérieure à l'énergie de la bande interdite, comme illustré sur la figure 1 (Perte par thermalisation) ou l'énergie des photons est inférieure à l'énergie de la bande interdite.

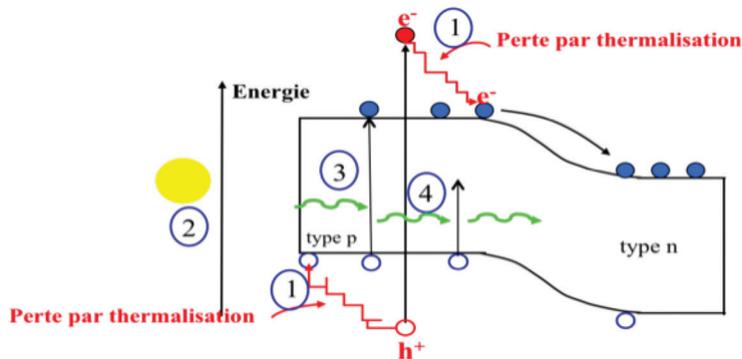


Figure 1 : Différentes pertes dans une cellule photovoltaïque simple jonction

La plupart des concepts de cellules PV sont basés sur un niveau d'éclairement incident de 1 soleil. Cependant, un rayonnement plus élevé signifie plus de courant, et par suite un rendement de conversion plus élevé.

Chaque photon donne un seul électron dans la bande de conduction créant une seule paire électron-trou. L'énergie des photons les plus énergétiques pourrait être mieux utilisée s'ils pouvaient créer plus d'un électron.

Enfin, les photons avec des énergies en dessous de l'énergie de la bande interdite ne sont pas exploités. Par conséquent, ils n'entraînent pas la création de paires électron-trou.

### 3. Nouveaux Concepts des cellules photovoltaïques

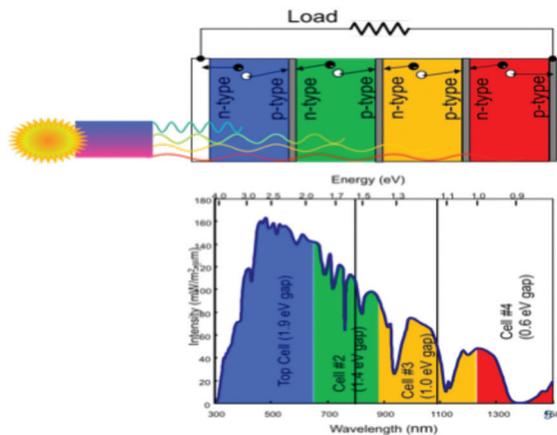
#### 3.1. Multijonction

La première limitation discutée dans la liste ci-dessus peut être évitée en utilisant des cellules multi-jonctions monolithiques où le rendement de conversion théorique limite peu atteindre 68% en juxtaposant plusieurs matériaux d'énergies de la bande interdite complémentaire [10]. Dans les cellules à jonctions multiples, plusieurs matériaux avec des bandes interdites différentes sont combinés afin d'exploiter au mieux le spectre solaire.

Pour réaliser cela, deux ou plusieurs cellules sont empilées les unes sur les autres (Figure 2). La cellule supérieure a l'énergie de la bande interdite la plus élevée, afin d'absorber et de convertir les photons de courtes longueurs d'onde (bleue). Les photons

dont l'énergie est inférieure à la bande interdite peuvent traverser la cellule supérieure et être absorbés dans les cellules du dessous. La cellule du bas a le plus petit gap pour absorber les photons les longueurs d'onde les plus longues (rouge et proche lumière infrarouge).

Les cellules multi-jonctions à base de semi-conducteurs III-V sont actuellement les cellules PV les plus efficaces. Le rendement record mondial est de 37.9% et 39.2% pour une cellule PV triple et six jonctions respectivement. Ce rendement de conversion peut atteindre 47.1% pour une six jonction III-V sous concentration de 143 soleil [5,2]. Le laboratoire de physique de la matière condensée et énergie renouvelable (LMCER) présente une grande expertise dans le domaine. En particulier, la contribution à l'étude et à l'optimisation de la jonction tunnel et les matériaux constituant les cellules photovoltaïques multi-jonction à base des semi-conducteurs III-V de haut rendement [11,12].

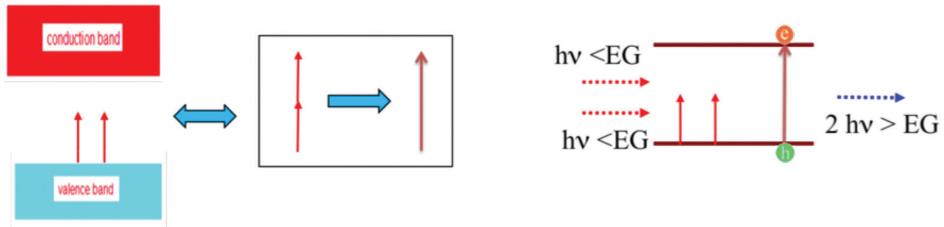


**Figure 2 :** Cellules photovoltaïques multi-jonctions pour exploiter au mieux le spectre solaire

### 3.2. Conversion spectrale

Concernant la conversion up-conversion, comme discuté précédemment les cellules photovoltaïques à simple jonction ont la limitation que chaque photon ne peut générer qu'un seul électron. En théorie, cette limitation peut être levée en utilisant une couche supplémentaire constituée d'un matériau de sorte que le spectre incident peut être modifié. Les boîtes quantiques peuvent être utilisées pour la conversion spectrale.

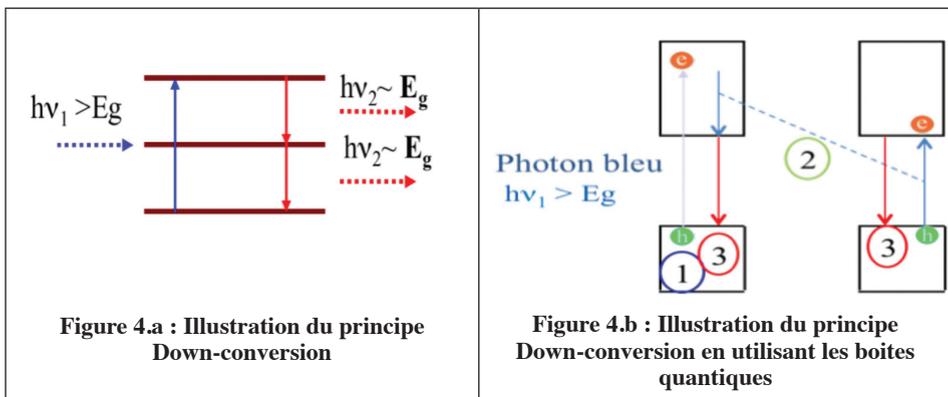
Dans la conversion ascendante spectrale, deux photons de faible énergie excitent les paires électron-trou en plusieurs étapes, comme illustré sur la Figure 3. Si ces paires électron-trou se recombinent, elles émettent un photon de haute énergie. En conséquence, deux photons de faible énergie sont convertis en un photon à haute énergie, qui peut être absorbé dans le matériau PV-actif.



**Figure 3 :** Illustration du principe Up-conversion

Les couches de conversion ascendante doivent être placées à l'arrière de la cellule PV car les photons de faible énergie peuvent passer à travers l'absorbeur de la cellule PV vers la couche de conversion ascendante et peuvent être convertis en photons de haute énergie qui sont absorbés par la cellule PV lors du deuxième passage.

L'idée de la conversion spectrale descendante est de transformer un photon de haute énergie en plusieurs photons d'énergies inférieures, comme illustré sur la figure 4.a. Un photon de haute énergie est absorbé à l'avant de la cellule PV et converti en au moins deux photons avec des énergies plus faibles. Si l'énergie du photon initial est  $E_{ph} > 2E_g$  et l'énergie des deux photons résultants est encore plus grande que celle de la bande interdite du matériau absorbant, les deux photons peuvent être absorbés en créant les porteurs de charge. Une des possibilités qui est étudiée pour la réalisation spectrale la conversion descendante consiste à utiliser des boîtes quantiques (BQ).



**Figure 4.a :** Illustration du principe Down-conversion

**Figure 4.b :** Illustration du principe Down-conversion en utilisant les boîtes quantiques

Ce sont de petites nanoparticules sphériques semi-conductrices de diamètres typiques de quelques nanomètres.

Un photon de haute énergie est absorbé par un BQ et donc un électron est excité dans la bande de conduction de la particule. A la différence avec un semiconducteur massif, l'excès d'énergie du photon n'est pas nécessairement perdu sous forme de chaleur, mais il peut être transféré sous forme d'énergie quantifiée à un point quantique voisin. Ici un deuxième électron est excité dans la bande de conduction du deuxième BQ. Comme résultat, deux paires électron-trou ont été créées à partir d'un photon. Si on néglige les

mécanismes de recombinaison, les paires électron-trou dans les BQ peuvent se recombiner de manière radiatif de telle sorte que chaque un des deux BQ émet un photon rouge. En résumé, un photon bleu incident est converti en deux photons rouges, qui peuvent être absorbés par un matériau PV.

### 3.3. Conversion spectrale

Le concept des cellules photovoltaïques à bande intermédiaire (BI) a été présenté pour la première fois par Luque et Marti [7]. Ce concept (BI) permet de résoudre le problème des photons avec des énergies inférieures à la bande interdite. Comme montré sur la figure 7, les niveaux d'énergie sont créés artificiellement dans la bande interdite du matériau absorbeur. Dans le cas d'une simple jonction, seuls les photons avec une énergie suffisante peuvent exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Cependant, Pour les cellules PV à bande intermédiaire les photons avec des énergies en dessous de la bande interdite peuvent exciter un électron de la bande de valence vers la bande intermédiaire. Un deuxième photon de basse énergie est nécessaire pour exciter l'électron de la bande intermédiaire vers la bande de conduction. Dans ces cellules PV, une couche avec les états intermédiaires est placée entre les couches p et n. Par exemple, des boîtes quantiques peuvent être utilisées pour réaliser les états intermédiaires.

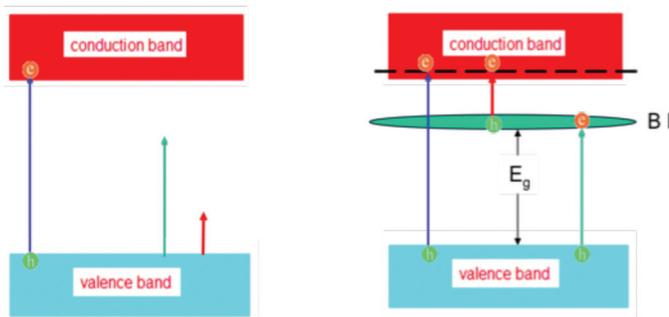
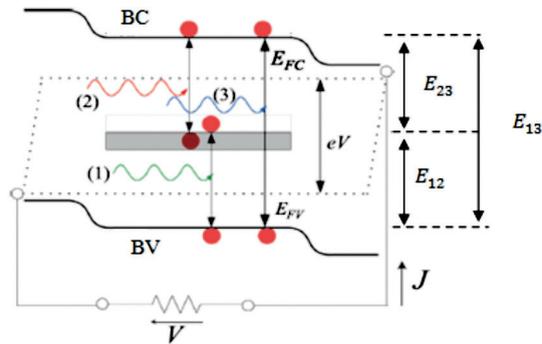


Figure 7 : Illustration du principe de Cellules PV à bande intermédiaire

Nous avons étudié et modélisé les propriétés optiques et électriques des nanostructures à base des boîtes quantiques (QDs) d'InN/InGaN pour des applications photovoltaïques et de comprendre les mécanismes physiques mis en jeu. Pour cela, nous avons développé la méthode numérique des différences finies pour calculer les états énergétiques des QDs correspondant aux bandes intermédiaires en variant les dimensions et les caractéristiques physiques des matériaux.

La méthode numérique que nous avons utilisée pour la résolution du système d'équations de Schrödinger à trois dimensions a permis de calculer la position de la bande intermédiaire (IB). Dans ce modèle on considère que, l'absorption de photons avec une énergie spécifique ne donnera qu'une transition possible. Dans ce cas, il existe trois manières d'absorption des photons de spectre solaire comme le montre la figure 8. Ici,  $E_{13}$  désigne l'énergie de la bande interdite de la jonction p-n, tandis que  $E_{12}$ ,  $E_{23}$  sont des sous-bandes qui ont été créées par la BI. Les boîtes quantiques sphériques d'InN sont intégrées dans la région i de la de la structure p-i-n [13].



**Figure 8 :** Structure de base d'un IB montrant l'absorption des photons de faibles énergies

Pour étudier et optimiser des différents paramètres de notre structure p(InGaN)/i(QDs-InN)/n(InGaN), dans un premier temps nous avons pris en compte les effets du rayon de la boîte quantique, de l'espacement QD-QD et de la composition en indium sur les niveaux d'énergie dans les QDs. Les transitions optiques, la densité de courant générée, la tension en circuit ouvert et le rendement de conversion photovoltaïque ont été calculés. Ensuite, l'effet du champ électrique intégré à l'interface de la jonction p-i-n et son angle d'orientation sur les propriétés de la structure ont été pris en compte [13]. Les résultats montrent que les effets de champ électrique, l'espacement QD-QD, rayon de QD et de la concentration d'indium jouent un rôle important dans le réglage de la position optimal de la bande intermédiaire. De plus, les simulations montrent que le la tension en circuit ouvert et le rendement de conversion dépend fortement de la composition en indium, du rayon de QD et de l'espacement QD-QD. Un rendement maximal de l'ordre de 52% est obtenue pour les paramètres optimaux: composition optimale en indium dans InGaN de 0.51, la taille optimale de la QD (environ 1.75 nm) et l'espacement QD-QD optimale (environ 2 nm). Enfin, le calcul démontre que le champ électrique intégré améliore le rendement de conversion de QDs-IB en augmentant l'orientation de l'angle d'inclinaison du champ électrique [14,15].

## Conclusion

Dans cette présentation, nous avons abordé plusieurs concepts cellules photovoltaïques de troisième génération permettant de dépasser le rendement de limite de Shockley-Queisser : cellules PV multi-jonctions, conversion spectrale et cellules PV à bande intermédiaire. Dans un premier temps, nous avons discuté les différents pertes et limitations fondamentales des cellules photovoltaïques classiques à jonction unique. Ensuite, nous avons développé les différents concepts étudiés et modélisé dans notre laboratoire de physique de la matière condensée et énergie renouvelable. Quelques résultats fondamentaux concernant les nanomatériaux quantiques sont mentionnés.

## Références

- [1] Shockley, W. & Queisser, H. J. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *J. Appl. Phys.* 32, 510–519 (1961).
- [2] NREL Best Research-Cell Efficiencies. <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.20200128.pdf> (2020).
- [3] Di Carlo Rasi, D. & Janssen, R. A. J. Advances in solution-processed multijunction organic solar cells. *Adv. Mater.* 31, 1806499 (2019).
- [4] A. Saliba, M. et al. How to make over 20% efficient perovskite solar cells in regular (n–i–p) and inverted (p–i–n) architectures. *Chem. Mater.* 30, 4193–4201 (2018).
- [5] Geisz, J. F. et al. Six-junction III–V solar cells with 47.1% conversion efficiency under 143 Suns concentration. *Nat. Energy* 5, 326–335 (2020).
- [6] Renewable energy data book, 2015, National renewable energy laboratory.
- [7] Luque et al. *J. Appl. Phys.*, Vol. 96, No. 1, 1 July 2004.
- [8] Yao, M.; Huang, N.; Cong, S.; Chi, C. Y.; Seyedi, M. A.; Lin, Y. T.; Cao, Y.; Povinelli, M. L.; Dapkus, P. D.; Zhou, C. GaAs Nanowire Array Solar Cells with Axial P-I-N Junctions. *Nano Lett.* 2014, 14 (6), 3293–3303.
- [9] D. Zhou, G. Sharma, S. F. Thomassen, T. W. Reenaas, and B. O. Fimland, “Optimization towards high density quantum dots for intermediate band solar cells grown by molecular beam epitaxy,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, p. 061913, 2010.
- [10] De Vos, A. Detailed balance limit of the efficiency of tandem solar cells. *J. Phys. D Appl. Phys.* 13, 839–846 (1980).
- [11] Y. Mir, A. Amine, M. Bouabdellaoui, K. Zazi and M. Zazoui, «The window layers effect on the hardness improvement of space solar cells exposed to the 1 MeV electron irradiations *Opt Quant Electron*, 45 (2013) 1189–1197.
- [12] A. Amine, Y. Mir, and M. Zazoui, “Modelling of dual-junction solar cells including tunnel junction,” *Advances in Condensed Matter Physics*, vol. 2013, Article ID 546362, 5 pages, 2013.
- [13] N. Ben Afkir, E. Feddi, F. Dujardin, M. Zazoui and J. Meziane, Photovoltaic conversion efficiency of InN/InxGa1-xN quantum dot intermediate band solar cells, *J. Physica B: Condensed Matter* 534 (2018) 10–16.
- [14] El Aouami, K. Feddi, M. El Haouari, M. El Yadri, N. Ben Afkir, M. Zazoui, E. Feddi, C.A. Duque, F. Dujardin, Impact of heavy hole levels on the photovoltaic conversion efficiency of InxGa1-xN/InN quantum dot intermediate band solar cells, *Superlattices and Microstructures* 129 (2019) 202–211,
- [15] N. Ben Afkir, E. Feddi, J. Meziane, Y. EL Kouari, M. Zazoui, A. Migalska-Zalas, *J. Opto-Electronics Review* 27 (2019) 25–31, Control of simultaneous effects of the temperature, indium composition and the impact ionization process on the performance of the InN/InxGa1-xN quantum dot solar cells.

# PROPRIÉTÉS OPTIQUES DES POINTS QUANTIQUES

*Izeddine ZORKANI*

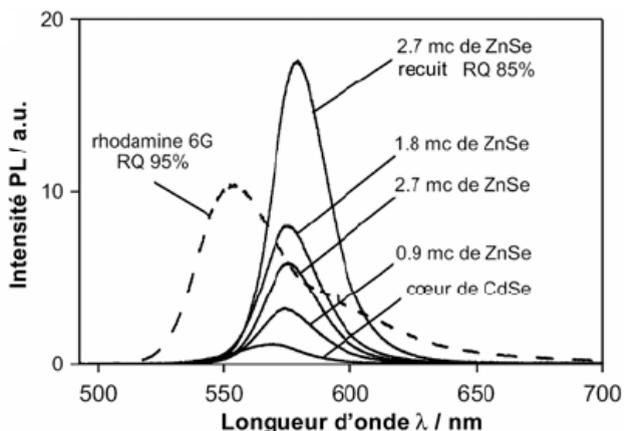
*Laboratoire de physique du Solide, Groupe de Nanomatériaux et énergies  
renouvelables, Faculté des Sciences Dhar El Mehraz,  
Université Sidi Mohammed Ben Abdellah, Fès*

## 1. Introduction

Les nanomatériaux sont des matériaux de taille nanométrique allant de quelques nanomètres à plusieurs centaines de nanomètres. Ils occupent une position intermédiaire entre les molécules et les cristaux et se composent de quelques centaines à plusieurs milliers d'atomes disposés dans un ordre cristallin. L'utilisation des nanostructures dans divers domaines d'application (microélectronique et optoélectronique) exige une bonne connaissance de leurs propriétés électroniques et optiques. Les spectres de photoluminescence et d'absorption optique ont été souvent utilisés comme une riche source d'information sur ces propriétés. A l'heure actuelle, une des meilleures méthodes de fabrication des boîtes quantiques qui s'affranchit en particulier aux problèmes de défauts de surface créés par la lithographie est la croissance auto-organisée [1]. Elle est basée sur la croissance par épitaxie par jets moléculaires d'un matériau sur un autre de paramètre de maille différent. Ce type de croissance a été proposé par Stranski et Krastanov en 1937 et réalisé pour la première fois dans les années 80.

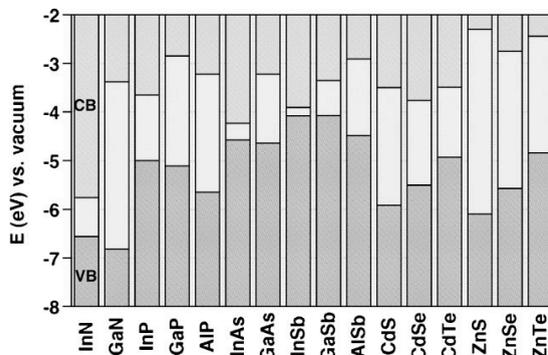
Les points quantiques (Quantum Dot-QD) sont connus pour leur efficacité quantique élevée par rapport aux puits quantiques et aux fils quantiques, mais les conditions de surface peuvent réduire leur performances visuelles optiques. En fait, les états de surface peuvent immobiliser les porteurs de charge, ce qui en réduit leur nombre et donc les performances pour des applications en optoélectronique. Pour confronter à ce problème, on a fait appel au recouvrement du point quantique par les coquilles qui suppriment ainsi d'une façon efficace et durable les centres de recombinaison non-radiatives aux interfaces; on les appelle des points quantiques de type cœur/coquille ou encore points quantiques inhomogènes (Inhomogeneous QD-IQD) [1]. Dans le système cœur/coquille, La coquille passive les liaisons pendantes et constitue une barrière énergétique entre le cœur et la surface extérieure, ce qui améliore de manière significative les propriétés optiques tels que le rendement quantique de photoluminescence et la photostabilité. Les spectres dans la figure 1, représente l'intensité de photoluminescence de solutions de même concentration en nanocristaux, obtenus dans les mêmes conditions d'excitation, durant la croissance d'une coquille de  $ZnSe$  déposée

sur  $CdSe$ . Dans le but d'une étude comparative, les spectres de photoluminescence du cœur  $CdSe$  et d'un matériau organique qui est la rhodamine, ont été représentés sur le même graphe. Les spectres illustrent une amélioration significative du rendement quantique. Un léger décalage vers le rouge du pic qui peut être expliqué par un renforcement du confinement par la barrière coquille.



**Figure 1:** Evolution de la PL au cours de la croissance d'une coquille de ZnSe (en monocouches) sur des NCs cœurs de CdSe. Le rendement quantique maximal de 85% est comparable à celui de la rhodamine (95%) [3].

Les matériaux du point quantique inhomogène possèdent un alignement de bande de type I ou type I Inverse. Dans le cas du type I, la coquille jouera le rôle d'une barrière pour le cœur et dans le cas du type I Inverse, la coquille constitue un puit. La caractéristique originelle de ces nanomatériaux est la possibilité de contrôler leurs propriétés physiques observables en modifiant le diamètre du matériau cœur et les épaisseurs des coquilles. L'étude des boîtes quantiques IQD a débuté dans les années 80, par les auteurs Effros et al [4], Ekimov et al [5] et Brus et al [6]. La boîte quantique inhomogène  $CdS/HgS/CdS$  était le premier système réalisé en 1993 [7], suivi par le système  $CdS/CdSe/CdS$  et ensuite  $ZnS/CdS/ZnS$ . Ces structures sont luminescentes toutes en monocouleur. Afin de générer de la lumière blanche beaucoup de travaux ont visaient la recherche de systèmes boîtes quantiques inhomogènes pouvant émettre spontanément en multi-couleurs. Une telle émission a été réalisée avec le système  $CdSe/ZnS/CdSe/ZnS$  [8] pour des épaisseurs appropriées de la coquille. Selon l'alignement et la position relative des niveaux d'énergie électroniques dans les semi-conducteurs concernés, la coquille peut avoir différentes fonctions dans la structure. La figure 2 donne un aperçu de l'alignement de bande des matériaux massifs, qui sont principalement utilisés dans la synthèse des systèmes cœur/coquille.



**Figure 2** : L'alignement des niveaux d'énergie électroniques des SCs III-V et II-VI en utilisant les décalages de la bande de valence de référence.

Une nouvelle génération de dispositifs optoélectroniques (lasers, détecteurs en infrarouge lointain, mémoires optiques, ordinateur quantique) et microélectronique (électronique de spin, transistor à un électron, ...) a été développée mettant à profit les effets de confinement quantique. Cependant, Les performances de ces dispositifs peuvent être altérées par la présence des impuretés ou les défauts structuraux qui sont source de contraintes perturbant les propriétés physiques puisqu'elles introduisent des états d'énergie au sein de la bande interdite. Ces états d'impuretés (donneurs ou accepteurs) induisent de nouvelles transitions vers les sous-bandes (de conduction ou de valence) comme elles peuvent être après leur ionisation des centres de piégeage des porteurs de charges.

## 2. Propriétés électroniques des points quantiques

Ces nanomatériaux permettent le confinement spatial des porteurs de charges (électrons et trous), ce qui entraîne un changement considérable des propriétés physiques comparées au matériau massif. Dans le cristal massif, les porteurs de charges se déplacent librement. Les états excitoniques, en raison de leur faible énergie de liaison, sont instables à température ambiante et sont difficilement observables à cette température. Le confinement des porteurs, lié à la diminution de la taille, entraîne la quantification des états électroniques. Ceux-ci évoluent depuis un quasi-continuum, pour le cristal massif, vers une série de niveaux d'énergie discrets de type moléculaire pour les nanocristallites. Néanmoins, il semble que la structure cristalline des nanocristaux soit toujours celle du semiconducteur massif. Il apparaît donc raisonnable d'envisager une approche théorique dans le cadre de la physique du solide, en conservant le formalisme du cristal massif et en introduisant l'effet de taille comme une perturbation. Les calculs théoriques sont généralement faits dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe, qui fournit une représentation simple des états électroniques. Les spectres d'énergies des porteurs de charges sont quasi-continus et la densité des états varie comme une fonction de la racine carrée de l'énergie ( $D(E) \propto \sqrt{E}$ ). Par contre, dans les

structures de basse dimensionnalités les porteurs de charges se trouvent confinés dans une ou plusieurs dimensions. Les énergies électroniques sont quantifiées et dépendent de la taille de la nanostructure, l'interaction rayonnement matière est renforcée et les états excitoniques, en raison de leur énergie de liaison qui devient très importante, restent stable ce qui rend leur observation possible même à température ambiante. La densité d'état est considérablement modifiée; elle est en marche d'escalier ( $D(E) \propto \sum_{n_z} \theta(E - E_{n_z})$ ) pour les puits quantiques

(Quantum Well-QW), proportionnelle à l'inverse de la racine carré de l'énergie ( $D(E) \propto \sum_{n_z, n_y} \frac{1}{\sqrt{E - E_{n_z} - E_{n_y}}}$ ) pour un fil quantique (Quantum Well Wire-QWW) et se

comporte comme la fonction de Dirac ( $D(E) \propto \sum \delta(E - E_{n_x} - E_{n_y} - E_{n_z})$ ) pour une boîte

quantique. La quantification totale des niveaux électroniques dans les points quantiques, qui se traduisent dans le domaine optique par des pics d'absorption très marqués, les rendent analogues à des "atomes artificielles" aux paramètres variables. Ces nouveaux systèmes présentent un intérêt particulier car contrairement aux atomes, ils peuvent subir des variations de la taille, de la forme géométrique et par conséquent du nombre de porteurs de charges. Néanmoins, le réseau atomique qui constitue et lie les nanostructures les distingue, toutefois, des atomes soulignant l'importance de l'interaction électron phonon. Pour caractériser les états électroniques dans les points quantiques, on peut reprendre le formalisme de la masse effective utilisé dans le cristal massif. Dans ce formalisme, deux sortes de potentiels vont gouverner le mouvement des particules chargées : électrons et trous. Leur énergie cinétique est quantifiée par le potentiel sphérique d'un puits de rayon  $R$  et leurs interactions sont prises en compte par le potentiel Coulombien. L'influence relative de ces deux énergies permet de différencier divers régimes de confinement.

### Les différents régimes de confinement

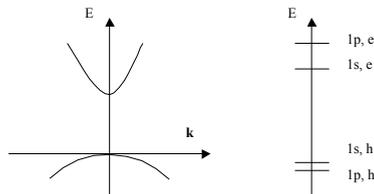
Pour faire une discussion simple des transitions optiques dans les points quantiques, nous prenons le cas d'un semiconducteur à gap direct et nous adoptons le modèle à deux bandes simples, paraboliques et isotopes. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, qui suppose que les dimensions de la boîte quantique dépassent largement la constante du réseau cristallin. Par exemple, une cristallite de  $ZnS$  de 70 Å de diamètre contient 9000 atomes environ. Et dans le cas idéal d'un potentiel de confinement infini, on montre que l'énergie cinétique des particules, dans une nanosphère de rayon  $R$ , prend des valeurs discrètes et inversement proportionnelles au carré du rayon  $R$  :

$$E_{e,nlm} = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\alpha_{n,l}}{R} \right)^2 \quad (1)$$

pour les électrons et

$$E_{h,nlm} = \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \left( \frac{\alpha_{n,l}}{R} \right)^2 \quad (2)$$

pour les trous. Il est usuel de noter les états propres  $(n, l)$  des électrons et des trous de la façon suivante :  $1s, 1p, \dots, 2s, \dots$ , etc. où  $s, p, \dots$ , etc. correspondent à  $l = 0, 1, \dots$ , etc respectivement. A remarquer que, contrairement au cas d'un potentiel Coulombien, l'état  $1p$  est possible dans le cas d'un potentiel de confinement sphérique. La figure 3 montre quelques premiers niveaux d'énergie dans une nanosphère en comparaison avec la dispersion en énergie dans le cas du massif.



**Figure 3 :** Schémas Représentatif du spectre d'énergie d'une particule. A gauche : dans le cas d'un semi-conducteur massif. A droite : niveaux d'énergie d'une particule dans un point quantique (e : électron, h : trou).

On voit que, en absence d'interaction Coulombienne, l'état de plus basse énergie de la électron-trou a une énergie plus grande que le gap du semiconducteur massif d'une quantité :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\pi}{R} \right)^2 \quad (3)$$

soit encore :

$$\Delta E = E_{ex} \left( \frac{\pi a_B}{R} \right)^2 \quad (4)$$

où  $E_{ex}$  et  $a_B$  désignent respectivement l'énergie de liaison et le rayon de Bohr de l'exciton dans le matériau massif.

L'expression (4) montre que pour des petites gouttes quantiques ( $R \ll a_B$ ), le confinement géométrique introduit un déplacement énergétique très grand devant l'énergie de liaison de l'exciton. Si on utilise  $E_{ex}$  comme une mesure de l'importance de l'interaction Coulombienne interbande, on peut en première approximation négliger l'interaction Coulombienne dans les petites gouttes quantiques (système de particules indépendantes). Ainsi, l'énergie du photon nécessaire à la création d'une paire électron-trou est donnée par :

$$\hbar\omega = E_g + E_{ex} \left( \frac{\alpha_{n,l} a_B}{R} \right)^2 \quad (5)$$

En fait, le spectre d'énergie des états électroniques dans une nanosphère est déterminé par l'effet de taille quantique (Quantum Size Effect : QSE) et l'interaction Coulombienne. Ces deux formes d'énergie augmentent lorsque le rayon  $R$  diminue. L'importance relative de ces

deux énergies dépend de la taille de la microcristallite et des paramètres physiques du matériau semiconducteur. Ainsi on peut distinguer trois régimes de confinement :

### 2.1. Régime de faible confinement

Le confinement est dit faible lorsque le rayon de la nanosphère  $R$  est largement supérieur au rayon de Bohr de l'exciton  $a_B (R) \gg a_B$ . Dans ce cas seulement le mouvement du centre de masse de l'exciton est quantifié, pendant que les mouvements relatifs de l'électron et le trou sont à peine affectés. Le déplacement des pics excitoniques du matériau vers les hautes énergies est inversement proportionnel à la masse totale de l'exciton. Dans le formalisme de la fonction enveloppe la position de la raie de plus faible énergie est donnée par l'équation:

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} + \frac{\hbar^2\pi^2}{2MR^2} \quad (6)$$

où  $M = m_e^* + m_h^*$  est la masse totale de l'exciton.

Les énergies des transitions suivantes s'écrivent sous la forme :

$$\hbar\omega = E_g - E_{ex} + \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2MR^2} \quad (7)$$

où  $n$  est un entier.

### 2.2. Régime de fort confinement

Il s'agit d'un régime de fort confinement lorsque le rayon de la nanosphère est très inférieur au rayon de Bohr de l'exciton ( $R \ll a_B$ ). L'effet du confinement est alors prédominant et affecte les mouvements de l'électron et du trou. Ces derniers peuvent être décrits dans un premier temps à l'aide des fonctions d'onde séparées (particules indépendantes), puis l'interaction Coulombienne entre ces particules est traitée comme une perturbation. Brus [11] ont montré dans un calcul de perturbation au premier ordre que l'énergie Coulombienne vaut  $-1.8 \frac{e^2}{\epsilon R}$ . Selon ce résultat, la position de la raie de plus faible énergie dans le spectre d'absorption est donnée par :

$$\hbar\omega = E_g + \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu R^2} - 1.8 \frac{e^2}{\epsilon R} \quad (8)$$

Pour des nanocristaux en régime de fort confinement, on obtient une forte augmentation du gap énergétique et un déplacement significatif des spectres optiques vers les hautes énergies. Les nanocristaux de *PbS* dont l'énergie de liaison de l'exciton est  $E_{ex} = 2 \text{ meV}$  et le rayon de Bohr de l'exciton est  $a_B = 180 \text{ \AA}$  fournissent de bons exemples de confinement fort.

### 2. 3. Régime de confinement intermédiaire

Ce régime est obtenu lorsque le rayon de la nanosphère est plus petit que le rayon de Bohr de l'électron et plus grand que le rayon de Bohr du trou ( $a_h \langle R \langle a_e$ ). Cette condition est réalisée dans le cas usuel où la masse effective du trou est largement supérieure à celle de l'électron. Ainsi, l'effet du confinement géométrique sur l'électron d'une part et le trou d'autre part est considérablement différent. Le confinement est important pour le mouvement des électrons, particules plus légères. Dans ce cas, le mouvement de l'électron est quantifié et l'interaction Coulombienne non négligeable entre l'électron et le trou va influencer le mouvement des trous. Ceux-ci se déplacent essentiellement dans un nuage d'électrons fortement confinés qui produisent un potentiel Coulombien moyen. Il a été montré [12] que l'exciton peut être traité comme un donneur situé au centre de la nanosphère. Cette situation a lieu pour beaucoup de semiconducteurs à gap direct, comme les composés II-VI où l'énergie de liaison de l'exciton  $E_{ex}$  n'est pas très importante et  $a_B$  peut être appréciable. Les nanocristaux de  $CdS$  et de  $CdSe$  de rayon moyen 40-50 Å, dont les rayons de Bohr valent respectivement 30 et 54 Å fournissent ainsi de bons exemples de confinement intermédiaire.

## 3. Propriétés optiques dans les points quantiques

### 3.1. Propriétés optiques des points quantiques

On considère des points quantiques dispersés dans une matrice de verre. La transparence de la matrice de verre rend possible l'étude des spectres d'énergie électroniques par spectroscopie optique. Pour l'expérimentateur, les premiers facteurs à mettre en considération sont la valeur de l'énergie de liaison de l'exciton  $E_{ex}$  et celle de son rayon effectif  $a_B$  dans le cas du semiconducteur massif.

#### Résultats expérimentaux et approches théoriques pour $R \gg a_B$ et $R \langle a_B$

Pour les nanocristaux à base de  $CuCl$ , le rayon de Bohr est petit,  $a_B \sim 7$  Å et l'énergie de liaison de l'exciton est importante  $E_{ex} \approx 200 meV$ , on se trouve en régime de confinement faible. L'exciton conserve alors son caractère quasi-particulaire; il est globalement confiné et on assiste à la quantification du mouvement de son centre de masse. Il en résulte un petit accroissement de l'énergie excitonique et un léger décalage vers le bleu des spectres optiques. La figure 4 [13] présente les spectres d'absorption de cristallites de  $CuCl$  synthétisées dans des verres silicatés. Les spectres de chacun des trois échantillons dont le rayon moyen des cristallites est respectivement 310 Å (courbe 1), 29 Å (courbe 2) et 20 Å (courbe 3), exhibent deux pics excitoniques. Ils résultent de l'excitation des deux excitons de type Mott-Wannier notés  $Z_3$  et  $Z_{12}$ . Lorsque la taille des nanocristaux diminue, les bandes d'absorption se déplacent légèrement vers des énergies plus hautes. La dépendance des énergies excitoniques en fonction du rayon moyen  $\bar{R}$  des nanocristallites est estimée à l'aide de la relation

$$\hbar\omega_{z_3} = E_g - E_{ex} + \frac{0.67 \pi^2 \hbar^2}{2M \bar{R}^2} \quad (9)$$

pour l'exciton  $Z_3$ . A remarquer qu'au facteur numérique près, qui résulte du moyennage sur la fonction de distribution de Lifshitz-Selsov, cette relation est équivalente à la relation obtenue dans le cas de faible confinement

$$\hbar\omega_{z_{1,2}} = E_g - E_{ex} + \Delta_{so} + \frac{0.67 \hbar^2}{2M_h \bar{R}^2} \left[ f\left(\frac{M_l}{M_h}\right) \right]^2 \quad (10)$$

pour l'exciton  $Z_{1,2}$  où  $M_h$  et  $M_l$  désignent la masse de l'exciton lourd et léger,  $\Delta_{so}$  est la valeur de l'éclatement spin-orbit et  $f$  représente la racine d'une équation calculée par Ekimov et al [14].

Comme exemple d'illustration du confinement fort, La figure 4 montre l'évolution du spectre d'absorption des nanocristallites de CdS en fonction de leur rayon moyen  $\bar{R}$ . Lorsque  $\bar{R}$  diminue, on constate une forte augmentation du gap énergétique et un déplacement significatif des spectres optiques vers les hautes énergies. Les auteurs ont attribués les oscillations qui apparaissent dans le spectre à des transitions optiques faisant intervenir des électrons peuplant les niveaux excités de la bande de conduction. Théoriquement, une expression analytique simple permet une description qualitative des résultats observés [15] :

$$\hbar\omega_{l,n} = E_g + 0,71 \frac{\hbar^2}{2\mu\bar{R}^2} \alpha_{l,n}^2 \quad (12)$$

avec une masse effective de l'électron  $m_e = 0.2m_0$ . L'expression (12) donne une possibilité de décrire le décalage vers le bleu du premier pic correspondant au niveau fondamental ( $\alpha_{0,1} = 3.14$ ). La non parabolicité de la courbe de dispersion en énergie pour l'électron et la valeur finie de la barrière de potentiel peuvent être retenus pour décrire le désaccord entre la théorie et l'expérience pour les niveaux supérieurs ( $\alpha_{1,1} = 4.49$  et  $\alpha_{2,1} = 5.76$ ). Kayanuma [16] a également évalué l'énergie de la paire électron-trou dans son état fondamental :

$$E(R) = E_g + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu R^2} - \frac{1.786 e^2}{\epsilon R} - 0.248 E_R \quad (13)$$

où  $\mu$  désigne la masse réduite de la paire électron-trou,  $E_R$  est l'énergie de Rydberg de l'exciton pour le matériau massif et  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite du cristal massif. Le deuxième terme représente l'énergie cinétique de l'électron et du trou et le terme suivant leur attraction Coulombienne. Le dernier terme correspond à l'énergie de corrélation spatiale entre l'électron et le trou. Pour une nanocristallite de CdS de rayon  $R=25 \text{ \AA}$  ; l'énergie cinétique est de l'ordre de 0.42eV, l'énergie coulombienne est de l'ordre de 0.18eV, le terme de corrélation est de 7% de l'énergie totale, et par conséquent l'électron et le trou peuvent être considérés comme des particules indépendantes. L'expression (13) est en accord avec les résultats expérimentaux dans le cas du confinement fort.

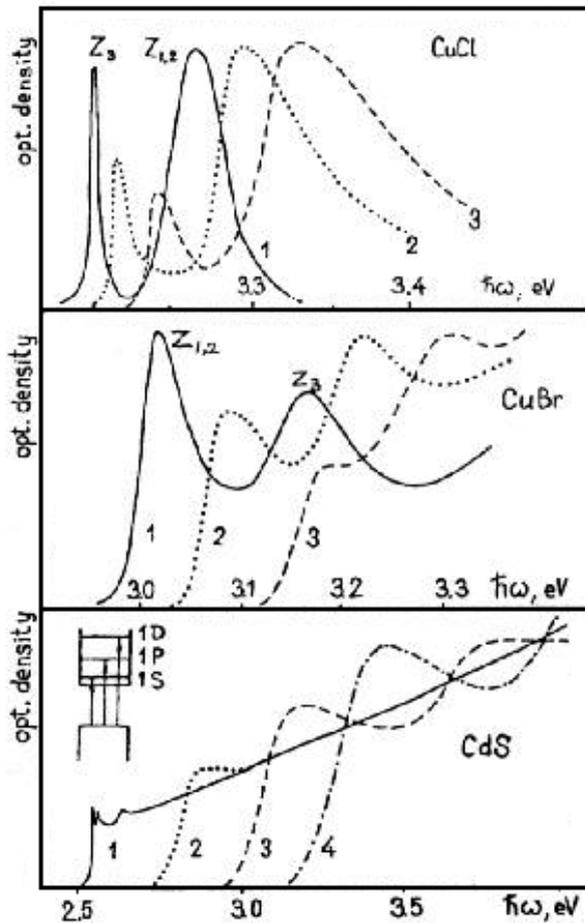


Figure 4 : Spectres d'absorption de nanocristaux d'après Ekimov [14]

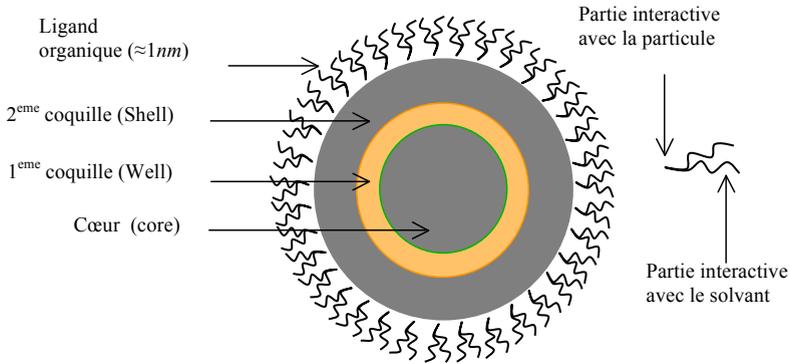
*CuCl* :  $R = 310 \text{ \AA}^0$  (courbe 1),  $R = 29 \text{ \AA}^0$  (courbe 2),  $R = 20 \text{ \AA}^0$  (courbe 3)

*CuBr* :  $R = 240 \text{ \AA}^0$  (courbe 1),  $R = 36 \text{ \AA}^0$  (courbe 2),  $R = 23 \text{ \AA}^0$  (courbe 3)

*CdS* :  $R = 330 \text{ \AA}^0$  (courbe 1),  $R = 23 \text{ \AA}^0$  (courbe 2),  $R = 15 \text{ \AA}^0$  (courbe 3),  $R = 12 \text{ \AA}^0$  (courbe 4)

### 3.2. Propriétés optiques des points quantiques inhomogènes

On considère des nanomatériaux de forme sphérique, constitués d'un matériau cœur de rayon  $r_1$ , recouvert d'une première coquille de rayon  $r_2$ , recouverte à son tour par une deuxième coquille de rayon  $r_3$  formée par un semi-conducteur de même nature que le cœur. Ces objets inorganiques sont recouverts d'une couche de ligands organiques d'épaisseur de l'ordre du nanomètre ( $\approx 1 \text{ nm}$ ) qui les passivent et qui les dispersent sous forme colloïdale dans un solvant. La figure 5 représente schématiquement une de ces nanoparticules.



**Figure 5 :** A gauche représentation schématique d'un nanocrystal de semiconducteurs de type cœur/puit/coquille fonctionnalisé par un ligand organique; à droite représentation schématique du ligand organique ( $\sim 1nm$ ).

Dans les points quantiques inhomogènes considérées Cœur/Puit/Coquille, le matériau puit constitué par l'Antimoniure d'Indium InSb ou le sulfure de Mercure HgS ou l'Antimoniure de Gallium GaSb est caractérisé par un petit gap direct et une grande permittivité électrique optique et par conséquent un grand rayon effectif de Bohr [17] (Table 1), calculé au moyen de la formule (14) suivante :

$$r_B(nm) = \varepsilon_r a_0 \frac{m_e}{\mu} = 0,053 \frac{m_e}{\mu} \varepsilon_r \quad (14)$$

Le calcul des valeurs répertoriées sur le tableau 1 montre que ses matériaux puits possèdent un grand rayon effectif de Bohr, donnant ainsi un excellent exemple de confinement fort et permettant leur étude par une approche de perturbation. Le cœur et la coquille constitués par un même matériau possédant un large gap. Par suite les interfaces se trouvent avec un grand décalage de niveaux d'énergie. L'association Cœur/Puits/Coquille vérifie un désaccord de maille inférieur à 10% augmentant la passivation des interfaces cœur-puit et puits-coquille et augmentant le rendement quantique de photoluminescence [18]. Le tableau 1 donne les paramètres des matériaux utilisés dans les points quantiques inhomogènes étudiés.

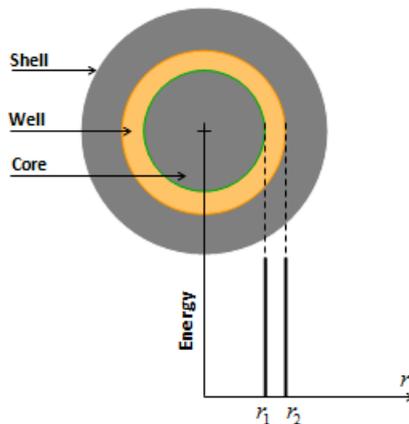
Cœur/Puit/Coquille	Puit	$E_g$ (eV) Well	$E_g$ (eV) Cœur ou Coquille	$m_e^*/m_e$ Well	$m_h^*/m_e$ Well	$r_B$ (nm) Well	$\varepsilon_r$ Well
ZnSe/HgS/ZnSe	HgS	0,50	2.69	0.036	0.044	30.41	11.36
ZnS/HgS/ZnS	HgS	0.68	3.61	0.036	0.044	30.41	11.36
CdS/InSb/CdS	InSb	0.17	2.49	0.014	0.43	69.30	15.70
ZnSe/GaSb/ZnSe	GaSb	0.7	2.69	0.041	0.4	20.25	15.69
CdS/GaSb/CdS	GaSb	0.7	2.49	0.041	0.4	20.25	15.69

**Table 1 :** Le rayon effectif de Bohr, Le Rydberg effectif et les différents paramètres des SC utilisés dans les IQD à 300K [2].

Les dimensions géométriques de ces points quantiques inhomogènes verifient les contraintes du mode de confinement fort  $r_1 \ll r_B$  et  $\Delta r \ll r_B$  par suite l'interaction Coulombienne entre l'électron et le trou est considérée comme un terme correctif et le problème de l'exciton et ses états excitoniques peut être résolu en considérant l'électron et le trou indépendants et puis après tenir compte de l'interaction Coulombienne par approche de perturbation. L'Antimoniure d'Indium InSb, le Sulfure de Mercure HgS et l'Antimoniure de Galium GaSb constituent les matériaux semi-conducteurs formants les puits des nanomatériaux présentés ici [2]. Ils sont couplés avec des semi-conducteurs de gaps larges comme ZnS, ZnSe ou CdS qui renforcent le confinement en imposant un grand écart de gap cœur-puits et puits-coquille. Le matériau formant le cœur et la coquille joue le rôle de barrière et vérifie un désaccord de maille inférieur à 10% pour assurer la passivation du matériau puits et améliorer le rendement quantique de luminescence. Vu cet alignement des niveaux d'énergie, nous modéliserons ces nanomatériaux par un potentiel de puits infini défini par les relations (15) et dont le profil est schématisé par la figure 6

$$V(r) = \begin{cases} V & r_1 < r < r_2 \\ \infty & r < r_1 \text{ ou } r > r_2 \end{cases} \quad (15)$$

Où  $r_1$ ,  $r_2$  sont respectivement les rayons du matériau cœur et matériau puits et  $V$  est le potentiel du matériau puits. Cette valeur est considérée nulle par la suite avec un changement de l'origine des potentiels. Les porteurs de charge sont alors confinés et localisés dans le matériau puits de la première coquille.



**Figure 6 :** Description schématique du profil de potentiel infini de la structure IQD sphérique (coupe dans le plan).

L'investigation des transitions excitoniques dans les points quantiques inhomogènes sphériques à puits de gap étroit et à grand barrière de potentiel, modélisé par une barrière infinie donne d'importantes propriétés électroniques et optiques. En plus de l'efficacité qu'offrent en général les points quantiques inhomogènes en rendement quantique et en photo-

stabilité. Ces nanostructures sont caractérisées par un grand rayon de Bohr effectif. La résolution de l'équation de Schrödinger relative aux états électroniques et de trous ns et np donne un système de niveaux discrets dans le puits qui conservent l'arrangement des énergies des orbitales 1s, 1p., 2s, 2p., 3s, 3p. . Pour des dimensions appropriés du rayon du cœur et de l'épaisseur du puits les niveaux  $1s_e$ ,  $1p_e$ ,  $1s_h$ ,  $1p_h$  sont isolés des autres niveaux supérieurs et le très fort confinement assuré par un grand gap du semiconducteur de cœur et de la barrière, réduit considérablement la relaxation de population et limite le couplage du puits avec l'environnement électrostatique; ce qui qualifie cette nanostructure de système à deux niveaux, isolé, plus cohérent temporellement et luminescent en mono-couleur. Le calcul de l'énergie de liaison excitonique à l'état fondamental montre qu'en régime de fort confinement les méthodes de calcul de perturbation et de Ritz sont en bon accord alors qu'en régime de faible confinement elles divergent [2]. Les deux méthodes montrent que l'énergie de liaison de l'exciton dans son état fondamental est fonction du rayon  $r_1$  du cœur et de l'épaisseur  $\Delta r$  du puits. Cette énergie de liaison augmente si ces deux grandeurs diminuent et l'exciton est plus stable même à température ambiante. Cette propriété favorise le peuplement des états excitoniques; ce qui favorise les recombinaisons radiatives, améliore le rendement quantique et augmente la photoluminescence du point quantique inhomogène. L'étude par la méthode de Ritz fait apparaître remarquablement la limite asymptotique du semi-conducteur massif où l'énergie de liaison de l'exciton approche approximativement de la valeur  $1R^*$  lorsque  $m = r_1 / \Delta r$  tend vers 0 [2].

D'autre part le calcul du gap par la méthode de perturbation montre qu'il est doublement contrôlé par le rayon du cœur et l'épaisseur du puit et peut prendre de grandes valeurs pour de petites épaisseurs et une large gamme de gaps est couverte. Il s'ensuit une large gamme spectrale balayée allant du proche Infrarouge au proche ultraviolet, alors que le même semiconducteur en massif est luminescent en infrarouge seulement. La première transition excitonique est donnée par l'équation [19-20]:

$$h\omega(\text{eV}) = E_g^b + \frac{2,88}{\epsilon_r \Delta r (nm)} \left[ 2,46 \frac{r_B}{\Delta r} - I(m) \right] \quad (16)$$

Avec une excitation appropriée (par exemple UV à 3,1eV) et avec un même semi conducteur une large gamme d'énergie de gap est couverte ce qui correspond à une large gamme spectrale allant du proche ultraviolet PUV au proche infrarouge PIR et qui peut aller jusqu'au moyen infrarouge MR ou au lointain infrarouge LIR. Pour une valeur  $r_1 = 1nm$  du rayon du cœur, une augmentation de l'épaisseur  $\Delta r$  se traduit par un décalage vers le bleu et une large gamme est balayée comme le montre le tableau ci-dessus. Si  $r_1$  prend une valeur supérieure alors un très léger décalage vers les hautes longueurs d'onde est enregistré (ne dépassant pas 6nm pour HgS).

S.C	$r_1(nm)$	$\Delta r(nm)$	$E_g(eV)$	$\lambda(nm)$	Couleur
<b>InSb</b>	1	2,00	8,27	149,92	UV-C
		2,70	4,75	261,02	UV-C
		3,00	3,94	314,68	UV-B
		3,50	3,02	410,54	Violet
		4,00	2,42	512,33	vert
		5,00	1,72	720,83	IR-A
		10,00	0,79	1569,42	IR-B
<b>HgS</b>	1	2,00	5,17	239,80	UV
		2,70	3,045	407,17	Violet
		3,00	2,55	486,20	vert
		3,50	2,00	620,20	rouge
		4,00	1,64	756,00	IR-A
		5,00	1,22	1016,26	IR-A
		10,00	0,66	1867,46	IR-B



**Table 4.10** : Tableau donnant la gamme de gap couverte et celle du spectre d'émission De la BQI à potentiel de puit infini pour trois semi conducteur à gap étroit [19].

Pour une valeur  $r_1 = 1nm$  du rayon du cœur, une augmentation de l'épaisseur  $\Delta r$  se traduit par un décalage vers le rouge et une large gamme est balayée [19-20].

## Références

- [1] L. Goldstein, F. Glas, J. Y. Marzin, M. N. Charasse, and G. Le Roux. Appl. Phys. Lett., 47, 1099, (1985).
- [2] Farid Benhaddou, Thèse de Doctorat: " Etats et transitions excitoniques dans les points quantiques inhomogènes à base de HgS, InSb et GaSb" *defended on 06 October 2017*. Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Université Sidi Mohammed Ben Abdillah - Fès
- [3] Reiss, P.; Bleuse, J.; Pron znd A. Highlym *Nano Lett.* 2002, 2(7), 781-784.
- [4] A.L.Efros, M.Rosen, M.Kuno, M. Nirmal, D.J.Norris, and M.Bawendi. Bandedge, *Phys. Rev. B* 54, 4843, (1996).

- [5] A.I. Ekimov, A.A. Onushchenko, *JETP.Lett.* 40, 1137 (1984).
- [6] Brus, L.E., *J. Chem. Phys.* 1984, 80(9), 4403-4409.
- [7] A. Eychmuller, A. Mews, H. Weller, *Chem. Phys. Lett.* 1993, 208, 59–62.
- [8] J.Th.G. Overbeek, «Colloidal dispersions», édité par J.W. Goodwin, *The Royal Society of Chemistry* (1982)
- [9] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C Gossard, W. Weigman, T. H. Wood and C. A. Burrus, *Phys. Rev. B*, 32, 1043, (1985).
- [10] A. Zounoubi, I. Zorkani, K. El Messaoudi, and A. Jorio, *Phys. Lett. A.*, 321, 220, (2003).
- [11] L.E.Brus, *J.Chem.Phys.*, 79, 5566, (1983).
- [12] A-I- Ekimov, A.I.L. Efros, M.G. ryanov, A.A. onushchenko et s.K. gfiuniloy, *Solide State Comm.*, 69, 565, (1989).
- [13] A.I.Ekimov, *Physica Scripta* 39, 217 (1991).
- [14] A. I. Ekimov, A. A. Onushchenko, A. G. Plyukhin, and At. L. Efros, *Sov. Phys. JETP.* 61, 891 (1985).
- [15] AI Ekimov, AA Onushchenko, *JETP Lett.* 40, 1136 (1984).
- [16] Y. Kayanuma, *Phys. Rev. B* 38, 9797, (1988)
- [17] D Battaglia, B. Blackman, X. Peng, *J. Am. Chem. Soc.* 127 (2005) 10889.
- [18] P. Reiss, J. Bleuse, A. Pron, *Nano Lett.* 2(7) (2002) 781-784.
- [19] F. Benhaddou, I. Zorkani, A. Jorio et A. Feddi, *Physica B* 477 (2015) 100–104
- [20] F. Benhaddou, I. Zorkani, A. Jorio, *AIP ADVANCES* 7, 065112 (2017).

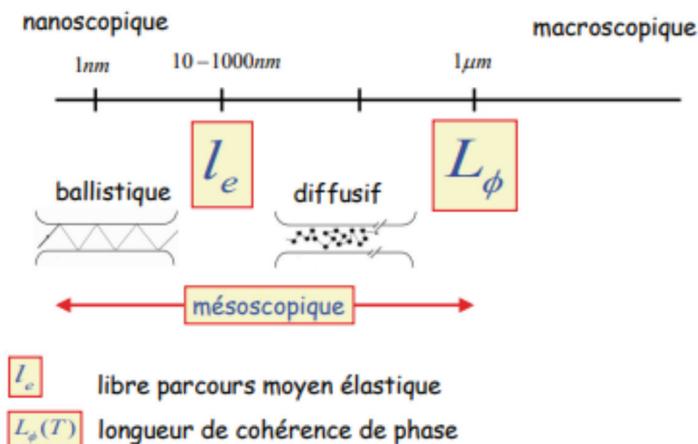
# ETATS LIÉS DANS UN CONTINUUM ET TRANSPARENCE INDUITE DANS LES SYSTÈMES MÉSOSCOPIQUES: APPLICATIONS POUR LE GUIDAGE, FILTRAGE ET DÉMULTIPLEXAGE

*El Houssaine El BOUDOUTI*

*Laboratoire de Physique de la Matière et de Rayonnement,  
Département de Physique, Faculté des Sciences,  
Université Mohammed I, 6000-Oujda*

Les propriétés mésoscopiques des métaux et des semi-conducteurs avec des tailles nanométriques et des échelles de temps très courtes, ont attiré beaucoup d'attention ces dernières années, ouvrant un nouveau domaine riche de la physique. En raison des techniques de fabrication avancées, la grandeur des tailles caractéristiques expérimentalement accessibles a été réduite à des basses dimensions, ce qui a permis la découverte de nombreux phénomènes inconnus auparavant. La miniaturisation des dimensions du dispositif au-delà des échelles de coupure de phase a fourni, par exemple, des preuves expérimentales de l'effet Aharonov-Bohm à l'état solide [1-3].

La transition du comportement classique au comportement mésoscopique a lieu dès que la taille des structures à examiner est comparable à certaines longueurs caractéristiques du système, y compris le libre parcours moyen des électrons, la longueur de relaxation de phase et la longueur d'onde de Fermi [4]. On parle alors des systèmes solides mésoscopiques ayant une taille intermédiaire entre microscopique et macroscopique (voir figure ci-dessous [5]).



Ces nouvelles propriétés sont étudiées dans des systèmes physiques basés sur les semi-conducteurs [6,7] et les supraconducteurs réalisés à l'aide de technique de micro-fabrication. Les électrons présents dans un métal se comportent à la fois comme une particule et comme une onde. A cause du comportement ondulatoire d'origine quantique, les électrons ont une phase dont ils gardent la mémoire sur une distance  $L$ .

Dans les dispositifs électroniques, différents régimes de transport peuvent être rencontrés. Ceux-ci se différencient les uns des autres par le type d'interaction que les électrons subissent durant leur déplacement. On peut regrouper les différentes interactions en deux grandes catégories.

i) La première catégorie: correspond aux collisions élastiques, c.-à-d. sans échange d'énergie, qui sont essentiellement dus aux collisions avec les impuretés ou les défauts du réseau cristallin, elles conservent la phase de l'électron. L'échelle caractéristique associée est la distance moyenne entre deux collisions.

ii) La seconde catégorie: correspond aux collisions inélastiques lors desquelles l'électron échange de l'énergie, ces chocs sont responsables de la perte de cohérence de phase. On définit donc la longueur de cohérence de phase  $L_\phi$  sur laquelle les électrons gardent mémoire de leur phase. Ces chocs proviennent des collisions électron-électron et électron-phonon.

A des températures suffisamment basses ( $T < 1K$ ), ce sont les collisions électron-électron qui dominent et déterminent la longueur  $L_\phi$ . Dans ces conditions, on peut rencontrer, selon l'échelle du parcours électronique  $L$  considérée, trois régimes de transport différents.

- si  $L > L_\phi$  : on se trouve en présence d'un régime de transport diffuse classique pour lequel l'électron subit l'ensemble des collisions élastiques et inélastiques.
- si  $L_e < L < L_\phi$  : seules les interactions élastiques peuvent être rencontrées. Il s'agit alors d'un régime quantique cohérent, appelé aussi régime mésoscopique.
- si  $L < L_e$  : on retrouve un régime de transport balistique, c'est à dire l'électron traverse la structure en ne subissant aucune collision.

Tous au long de cet exposé, on s'intéresse au transport électronique dans des guides d'ondes électroniques unidimensionnels ou fils quantiques. Dans ce contexte, plusieurs travaux de recherche ont été réalisés ces dernières années sur des systèmes sous forme de peignes et de boucles [8-10]. Dans cet exposé, nous montrons la possibilité d'existence des états liés dans un continuum (en anglais: Bound in Continuum (BIC) states), des résonances de transparence induite électromagnétiquement (en anglais: Electromagnetic Induced Transparency (EIT)) et des résonances de type Fano [11-14] dans des structures mésoscopiques unidimensionnelles simples. Notons que tout au long de ce travail, nous nous sommes limités à la discussion et à l'étude d'un modèle unidimensionnel. En effet, un fil quantique unidimensionnel fournit une bonne approximation d'un fil réel de largeur finie à basse température, pour lequel seule la sous-bande inférieure est remplie [15]. Pour des températures plus élevées, les études de conductance des guides d'ondes quantiques devraient utiliser des modèles bidimensionnel et tridimensionnel [16-18] et la formule de Landauer-Büttiker [19,20]. Cependant, dans la littérature, plusieurs modèles

quantiques unidimensionnels [21] ont été proposés et étudiés théoriquement [22,23] et expérimentalement [24].

Cette présentation est composée des quatre parties suivantes:

Dans la partie I, nous avons donné un rappel sur la physique mésoscopique et une description détaillée de la fonction de Green [25,26], qui permet d'obtenir plusieurs propriétés physiques du système composite étudié. Nous avons appliqué ensuite cette méthode pour déterminer les ingrédients de base qui sont les fonctions de Green des fils infinis, semi-infinis, finis et des boucles en présence du flux magnétique. Ces éléments permettent d'étudier n'importe quel système composite à base de ces morceaux de fils quantiques.

Dans la partie II, nous avons étudié une structure mésoscopique simple qui consiste en deux boucles symétriques couplées par un segment et en présence d'un flux magnétique (effet Aharonov-Bohm). Cette structure est conçue pour obtenir une bande interdite de transmission et une résonance de type Fano, ainsi que la possibilité d'existence des états liés dans un continuum (BIC). Une expression analytique générale du coefficient de transmission est obtenue pour différents systèmes en utilisant le formalisme de la fonction de Green. Dans ce travail, l'amplitude de la transmission est discutée en fonction du vecteur d'onde. Nous avons montré que le spectre de transmission de la structure entière peut présenter une bande interdite et une résonance de type Fano sans introduire aucune impureté dans un des bras de la boucle. Nous avons montré que la forme de la résonance Fano et la largeur de la bande interdite sont très sensibles à l'intensité du flux magnétique et la géométrie de la structure.

Dans la partie III, nous avons étudié les résonances de transparence induite électromagnétique (EIT) et les états liés dans un continuum (BIC) pour une structure mésoscopique simple composée de deux boucles de longueurs  $d_1$  et  $d_2$  couplées par un fil de longueur  $d_0$ . Les boucles sont soumises à l'effet du champ magnétique ou l'effet Bohm-Aharonov. Ces investigations sont réalisées par une analyse de l'amplitude du coefficient de transmission obtenu à l'aide de la méthode de la fonction de Green. Cette structure peut présenter une large bande interdite et une résonance EIT dans le spectre de transmission sans introduire d'impureté dans un bras de la boucle. De plus, nous montrons que la forme des résonances EIT et la largeur des bandes interdites peuvent être réajustée au moyen du flux magnétique et de la géométrie de la structure.

Dans la partie IV, nous avons démontré analytiquement et numériquement la possibilité d'existence de l'analogue de la transparence induite électromagnétiquement (EIT) et la rejection induite électromagnétiquement (EIR) dans une structure simple formée par une boucle soumise au flux magnétique ( $\Phi$ ) de longueur  $2d$  attachée verticalement à deux fils semi-infinies (guide d'onde) par un segment de longueur  $d_1$ . Le nombre de boucles attachées au même point du guide est  $N$ . D'abord, nous avons montré qu'en l'absence du flux magnétique ( $\Phi=0$ ) et pour des valeurs particulières de  $d_1$ , la structure peut présenter des états confinés dans la boucle et qui n'interagissent pas avec les états du guide d'onde. Ces états piégés sont situés dans les états continus des deux guides semi-infinis et représentent donc des états BIC. Ces états sont caractérisés par une résonance

de largeur nulle (c'est-à-dire une durée de vie infinie) dans les spectres de transmission et de réflexion. En présence du flux magnétique ( $\Phi \neq 0$ ), les états BIC se transforment en résonances EIR ou EIT selon que la longueur  $d_l$  soit prise entière ou demi-entière (en unité de  $d$ ) respectivement. En plus des résultats numériques, nous avons développé un calcul de développement de Taylor autour des résonances EIT et EIR pour montrer que ces dernières peuvent s'écrire selon la forme de Fano. En particulier, nous avons déduit le paramètre de Fano  $q$  et le facteur de qualité  $Q$  de ces résonances en fonction de  $N$  et du flux magnétique. Nous avons remarqué que  $Q$  décroît en fonction de  $\Phi$  pour les deux résonances, alors qu'il augmente (diminue) en fonction du nombre de résonateurs  $N$  pour EIT (EIR). Ces résultats montrent clairement la possibilité de varier et réajuster l'amplitude et la forme des résonances EIT et EIR au moyen du flux magnétique et du nombre de résonateurs greffés  $N$ . Les résultats théoriques sont obtenus dans le cadre de la méthode de la fonction de Green qui permet de déduire les relations de dispersions, les coefficients de réflexion et de transmission et les densités d'états.

Dans la dernière partie de cet exposé, nous nous sommes intéressés au transport électronique dans une structure mésoscopique simple composée de stubs greffés sur le même site ou sur deux sites différents le long du guide d'onde. Nous avons montré que ces structures peuvent présenter des phénomènes importants tels que les états BIC. Ces états se transforment en résonances EIT et Fano en désaccordant légèrement les longueurs des stubs. Ces résonances sont utilisées ensuite pour proposer et étudier un démultiplexeur mésoscopique formé par un guide d'onde d'entrée et deux guides d'ondes de sortie. Nous donnons des expressions compactes des paramètres géométriques qui permettent un transfert sélectif d'un état donné dans le premier guide d'onde sans perturber le second guide. L'effet de la température sur les résonances de transmission est également étudié et analysé en utilisant la formule de Landauer-Büttiker [18,19]. Les résultats analytiques des relations de dispersion et des coefficients de transmission et de réflexion sont obtenus en utilisant la méthode des fonctions de Green.

Les travaux présentés dans cet exposé ont fait l'objet de quatre publications dans des journaux indexés [27,30].

## Bibliographie

- [1] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115, 485 (1959).
- [2] S. Washburn and R. A. Webb, Adv. Phys. 35, 375 (1986).
- [3] C. J. B. Ford, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, J. E. F. Frost and G. A. C. Jones, Appl. Phys. Lett. 54, 21 (1989).
- [4] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems (Cambridge University Press 1997).
- [5] G. Montambaux, Physique mésoscopique et conduction quantique (Edition 2015-2016).
- [6] C. W. J. Beenakker and H. van Houten, in Solid State Physics: Semiconductor Heterostructures and Nanostructures, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull (Academic, New York, 1991).

- [7] Science and Engineering of One and Zero Dimensional Semi conductors, Vol. 214 of NATO Advanced Study Institute, Series B : Physics, edited by S. P. Beaumont and C. M. Sotomayor Torres (Plenum, New York, 1990).
- [8] B. Babic' and C. Schonenberger, Phys. Rev. B 70, 195408 (2004).
- [9] V. Vargiamidis and Hariton M. Polatoglou, Phys. Rev. B 74, 235323 (2006).
- [10] H. Al-Wahsh, E. H. El boudouti, B. Djafari-Rouhani, A. Akjouj, and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 75, 125313 (2007).
- [11] M. L. Ladrón de Guevara, P. A. Orellana, Phys. Rev. B 73, 205303 (2006).
- [12] M. L. Ladrón de Guevara, F. Claro, P. A. Orellana, Phys. Rev. B 67, 195335 (2003).
- [13] S. Harris, L. Hau, Phys. Rev. Lett. 82, 4611–4614 (1999).
- [14] U. Fano and J. W. Cooper, Phys. Rev. 137, A1364 (1965).
- [15] P. S. Deo and A. M. Jayannavar, Phys. Rev. B 50, 11629 (1994).
- [16] C. R. Liu, L. Huang, H. Luo and Y. C. Lai, Phys. Rev. Appl. 13, 034061 (2020).
- [17] B. J. V. Van Wees, H. Van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwen-hoven, D. van der Marel and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988).
- [18] P. Debray, O. E. Raichev, P. Vasilopoulos, M. Rahman, R. Perrin R and W. C. Mitchell, Phys. Rev. B 61, 10950 (2000).
- [19] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1, 233 (1957).
- [20] M. Büttiker, Phys. Rev. B 38, 9375 (1988).
- [21] T. Ouisse, Electron Transport in Nanostructures and Mesoscopic Devices, Wiley-ISTE, ISBN : 9780470611395 (2008).
- [22] Z. Shao, W. Porod and C. S. Lent, Phys. Rev. B 49, 11(1993).
- [23] R. Zhu, J. Phys. Condens. Matter. 25, 036001 (2012).
- [24] A. R. Mark and P. K. Wiley, Nanostructure Physics and Fabrication, Academic Press, Inc. (London) LTD, international symposium, College Station, Texas, March 13-15, p 165 (1989).
- [25] J. Vasseur, A. Akjouj, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani and E.H. El Boudouti, Surf. Sci. Rep. 54, 1 (2004).
- [26] L. Dobrzynski, E.H. El Boudouti, A. Akjouj, Y. Pennec, H. Al-Wahsh, G. Lévêque and B. Djafari- Rouhani, Phononics, Elsevier (2017).
- [27] T. Mrabti, Z. Labdouti, O. El Abouti, E.H. El Boudouti, F. Fethi and B. Djafari-Rouhani, Phys. Lett. A 382, 613 (2018).
- [28] T. Mrabti, Z. Labdouti, E. H. El Boudouti, F. Fethi, O. El Abouti and B. Djafari-Rouhani, Materials Today: Proceedings 13, 1055 (2019).
- [29] T. Mrabti, Z. Labdouti, A. Mouadili, E. H. El Boudouti and B. Djafari-Rouhani, Physica E 116, 113770 (2020).
- [30] Z. Labdouti, T. Mrabti, A. Mouadili, E. H. El Boudouti, F. Fethi and B. Djafari-Rouhani, Chin. Phys. B 29, 201116 (2020).



**SÉANCE VI**  
**IMAGERIE PAR RÉSONANCE**  
**MAGNÉTIQUE**



# LA RESONANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE : HISTOIRE ET APPLICATIONS

*El Mokhtar ESSASSI*

*Collège des Sciences Physiques et Chimiques  
Académie Hassan II des Sciences et Techniques  
e.essassi@academiesciences.ma*

## ABSTRACT

Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy (NMR) has become a sophisticated and indispensable tool which applies a magnetic field to an atomic nucleus (the most common stable isotopes are  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$ ) and radiofrequency pulses to characterize the resonant frequency of that atomic nucleus according to its chemical and environment surrounding.

NMR spectroscopy has a broad and sensitive history of development and applications. It is the most powerful tool to determine the structure of organic molecules, proteins in solution, polymers, thermoset products, organic and inorganic materials, glasses, supraconductors, liquid crystals, drugs, supramolecular assembly, catalysts and natural products.

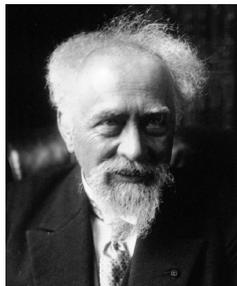
It has been emphasizing the application in biomolecular systems and plays an important role in structural biology and it is also considered as a powerful analytical technology presenting a variety of applications in different disciplines of scientific research, medicine and industries. The most common application of NMR spectroscopy is MRI (magnetic resonance imaging) which has become a staple of medical diagnostics and a useful non-invasive and non-destructive diagnostic tool for imaging soft tissues such as the brain, heart and muscles, and for discovering tumors in many organs.

**Keywords:** Nuclear magnetic resonance spectroscopy, history, magnetic field, atomic nucleus, spin, chemical shifts, dipolar couplage, solid NMR, RMI.

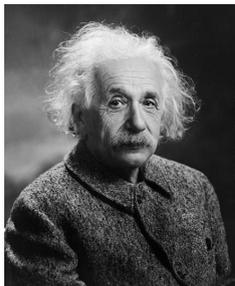
## INTRODUCTION

Il est bien établi que la chimie a pour principaux objectifs, la transformation et la détermination de la structure de la matière. Grâce à la physique quantique et à la microscopie, c'est la théorie atomique, dont Dalton est considéré comme étant le père et

appuyée par Boltzmann et Maxwell, qui a été acceptée par la communauté scientifique, en se basant essentiellement sur les travaux expérimentaux de Jean Perrin, lauréat du prix Nobel de physique de 1926, qui s'est inspiré de l'étude théorique d'Einstein sur le mouvement brownien, tout en exploitant l'invention du microscope au début du XX<sup>ème</sup> siècle.



**Jean Perrin**  
(1870-1942)



**Albert Einstein**  
(1879-1955)



**Niels Bohr**  
(1885-1962)



**Erwin Schrodinger**  
(1887-1961)

De même, la structure de l'atome a été élucidée, en tenant compte, notamment, des travaux de Thomson, Rutherford, Moseley, Bohr, Planck, Einstein, de Broglie, Schrodinger, Pauli, Fermi, Heisenberg, Chadwick, Glashow, Weinberg, Abdus Salam, Higgs et du CERN, permettant, de mettre en évidence les particules élémentaires (l'électron, le neutrino électronique, les quarks up et down), les nucléons (neutrons et protons), les particules élémentaires d'interaction incluant les bosons de jauge (boson Z, boson W, photon et gluon) et le boson de Higgs dont la confirmation de la découverte, au Large Hadron Collider (LHC), avec 99,9999% de certitude a été annoncée par le Conseil européen pour la recherche nucléaire (CERN) en juin 2012. Dans les réactions chimiques, il ya un échange d'énergie qui se fait d'une manière discrète, discontinue donc, quantique; En chimie tout est quantique. Pour comprendre la formation des liaisons, permettant de préparer différentes molécules, on doit faire appel aux concepts de la physique quantique.

## I- LA RMN EN CHIMIE ORGANIQUE

En chimie organique, on fait réagir des composés ayant des propriétés différentes, pour conduire à de nouveaux composés dont on ne connaît pas à priori, les structures correspondantes. Celles-ci peuvent être élucidées, en utilisant de nouvelles méthodes physicochimiques, exploitées dans diverses applications en sciences, médecine et technologies, à l'instar de la spectrométrie de masse, la cristallographie et la résonance magnétique nucléaire qui ont connu, lors des dernières décennies, un développement exceptionnel, grâce à l'informatique.

Tout particulièrement, la résonance magnétique nucléaire (RMN), est considérée comme un outil essentiel et incontournable, pour l'élucidation des structures des petites molécules organiques (poids moléculaires inférieures à  $10^3$ )

Au sein du laboratoire de Chimie Organique Hétérocyclique de la Faculté des Sciences de l'Université Mohammed V de Rabat, il a été possible de mettre au point une synthèse originale de nouveaux dérivés de la 1,5-benzodiazépine dont des représentants possèdent d'intéressantes propriétés physico-chimiques et biologiques mises à profit en médecine, industrie et environnement

Ainsi, la condensation de l'*o*-phénylènediamine avec la 4-hydroxy-6-méthyl-pyran-2-one au reflux du xylène, conduit à la 4*Z*-(2-oxo-propylidène)-1,5-benzodiazépin-2-one. Cette dernière est alkylée par le 1-bromobutane dans les conditions de la catalyse par transfert de phase pour donner la 4*Z*-1-butyl-(2-oxo-propylidène)-1,5-benzodiazépine qui réagit avec l'hydrate d'hydrazine pour donner naissance à un ligand bihétérocyclique qui subit l'action de métaux de transition pour donner des complexes, présentant de remarquables propriétés anti-bactériennes (Schéma 1)

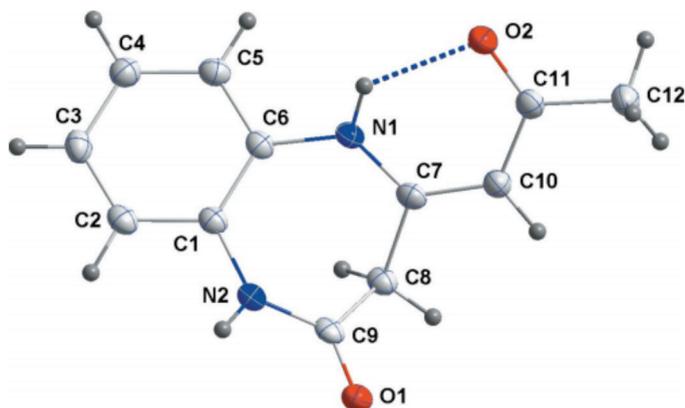
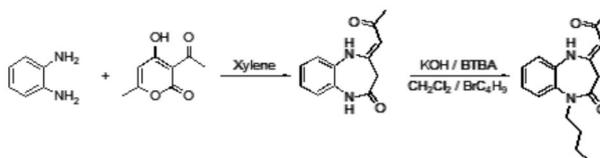


Figure 1 : 4*Z*-(2-oxopropylidène)-1,5-benzodiazépin-2-ones

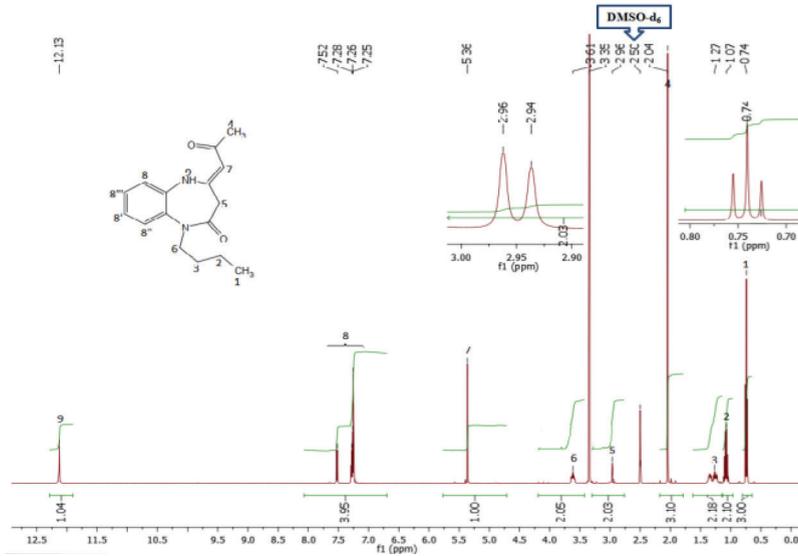
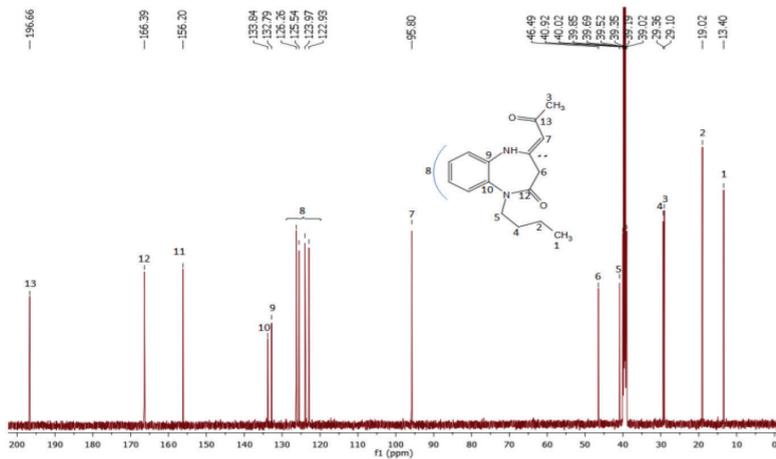


. CKrathkie, K. Karouchi, N. Dege, N.K. Sebbar, A. Ejjourmany, S. Radi, N. N. Adarsh, A. Talbaoui, M. Ferbinteanu, E.M. Essassi and Y. Garcia.  
*New Journal of Chemistry*, 44 (2020) 2210-2221.

**Schéma 1** : Synthèse de la 4*Z*-1-n-butyl-(2-oxo-propylidène)-1,5-benzodiazépin-2-one.

La structure de la 4*Z*-1-butyl-1,5-benzodiazépin-2-one a été établie grâce à la spectrométrie de masse qui étudie les composés à l'état gazeux et ionisés, la résonance magnétique nucléaire du proton et du carbone 13 en phase liquide et confirmée par la diffraction des rayons X, en phase solide.

Les spectres de RMN du proton et du carbone 13, sont présentés dans les figures suivantes:

Spectre RMN  $^1\text{H}$  du (Z)-1-butyl-4-(2-oxopropylidene)-1,5-benzodiazepin-2-oneSpectre RMN  $^{13}\text{C}$  (Z)-1-butyl-4-(2-oxopropylidene)-1,5-benzodiazepin-2-one

Il est à noter que le proton et le carbone 13, sont caractérisés par des rapports gyromagnétiques différents; ce qui permet d'avoir des spectres différents pour chaque noyau et expliquer le phénomène de la RMN, en se basant sur les concepts de la physique quantique.

Le spectre de RMN du proton, met en évidence plusieurs groupes de signaux relatifs aux différents types d'atomes d'hydrogène non magnétiquement équivalents dans la molécule, caractérisés par des déplacements chimiques dont les valeurs sont données en ppm par rapport à une référence qui est généralement le tétraméthylsilane. Aux valeurs élevées correspondent les protons déblindés (le proton lié à l'atome d'azote énaminique, les protons aromatiques, le proton vinylique et les protons du groupe méthylène lié à l'atome d'azote amidique). Les signaux relatifs aux faibles valeurs des déplacements chimiques sont dits blindés (le groupe méthyle et les deux autres groupes méthylènes de la chaîne n-butyle)

De même, on note que le signal de résonance des protons du groupe méthyle de la chaîne n-butyle (tous les 3 évidemment magnétiquement équivalents) est un triplet, ce qui correspond à un couplage, noté J, avec les deux protons du carbone voisin.

De même, le signal du groupe méthylène lié à l'atome d'azote est un triplet (couplage avec les deux protons du groupe méthylène voisin). On observe que ce signal est plus déblindé que les signaux des groupes méthylènes, ce qui traduit sa plus grande proximité avec l'atome d'azote, un élément électronégatif.

Enfin, l'aire d'un signal est proportionnelle au nombre de protons qui lui correspond, ce qui permet de tracer une courbe d'intégration des signaux, constituant, ainsi, un précieux renseignement en vue d'établir la structure du composé étudié.

De la même manière, le spectre de RMN du carbone 13, non découplé, permet d'observer les signaux correspondant aux différents atomes de carbone du composé étudié, mettant en évidence, en particulier, le signal le plus déblindé correspondant au groupe carbonyle cétonique, ainsi qu'un signal, le plus blindé, attribuable au groupe méthyle de la chaîne carbonée.

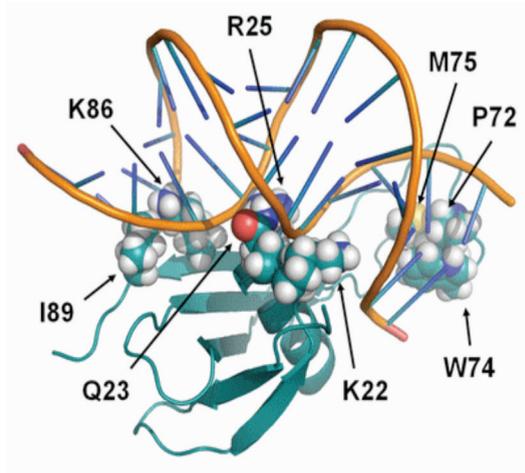
Il est intéressant de noter que la diffraction des rayons X, a permis également d'assigner la configuration Z à la double liaison carbone-carbone exocyclique due à l'établissement d'une liaison hydrogène entre l'hydrogène aminique en position 5 et l'atome d'oxygène du groupe carbonyle cétonique.

Ainsi, la résonance magnétique nucléaire (RMN), a permis de déterminer la structure d'un composé hétérocyclique, en faisant appel, également, aux autres méthodes physico-chimiques ; la spectrométrie de masse et la cristallographie.

## II- LA RMN EN BIOLOGIE

La RMN permet d'étudier, également, de systèmes plus complexes comme les protéines, les matériaux organiques, inorganiques et hybrides.

La RMN est la seule méthode spectroscopique, permettant d'analyser les protéines en solution, lorsqu'il n'est pas possible d'obtenir des monocristaux pour pouvoir les étudier par diffraction des rayons X. (Figure 2)

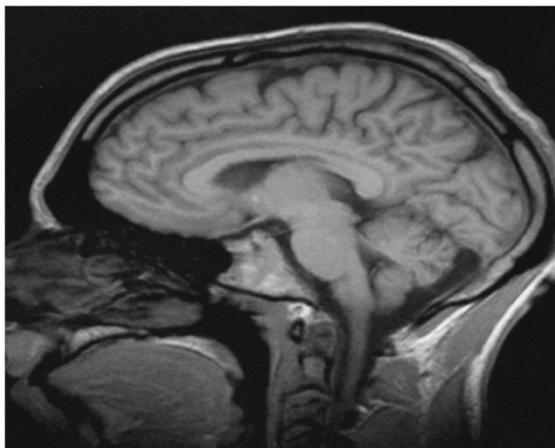


**Figure 2 :** Exemple d'étude (2014) par RMN - Interaction ADN/protéine : la protéine MCI, une petite protéine architecturale de *Methanosarcina* qui courbe et compacte l'ADN de ces Archaea (CNRS UPR 4301)

### III- LA RMN EN MEDECINE

La RMN est, également, à la pointe de l'imagerie par résonance magnétique (IRM). Il est intéressant de noter que les études par RMN, depuis les années 40, ont évolué de la physique de la matière condensée à l'IRM en passant par l'analyse chimique et la biologie structurale.

Ces progrès prodigieux peuvent être attribués aux importants facteurs suivants: l'augmentation du champ magnétique des aimants RMN, l'introduction de la RMN à transformée de Fourier et l'acquisition de spectres de corrélation bifonctionnels



**Figure 3 :** Image IRM d'une tête humaine en pondération T1, en coupe sagittale. La tête est vue de profil, regardant vers la gauche. On y voit le cerveau en gris clair entouré de liquide céphalo-rachidien (en noir)

## IV- LA BELLE HISTOIRE DE LA RMN

Après avoir déterminé la structure de l'atome, en s'appuyant sur la physique quantique, les scientifiques se sont intéressés aux propriétés physiques des noyaux des éléments chimiques, qui permettent de les caractériser, et les utiliser dans divers domaines.

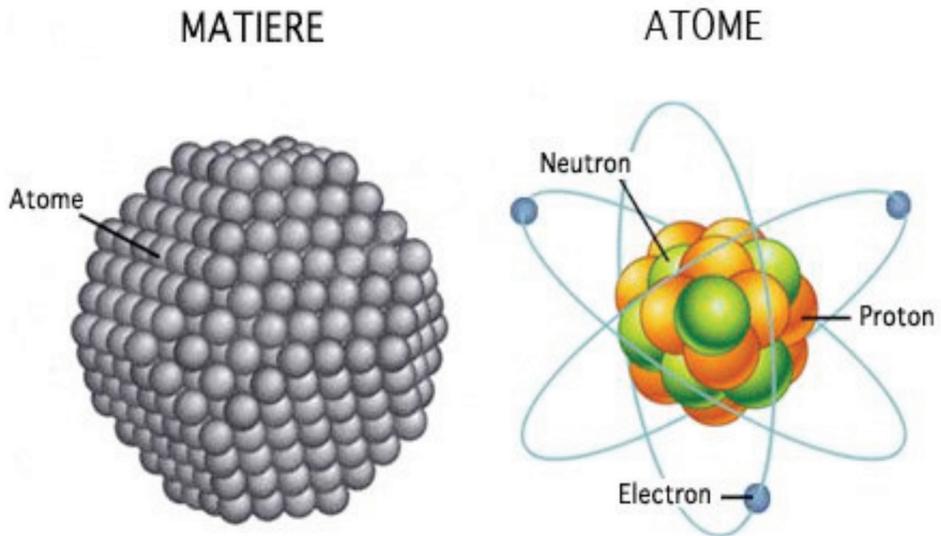


Figure 4 : Structure de la matière

La RMN est basée sur l'effet Zeeman nucléaire. En fait la RMN est une histoire de spin.

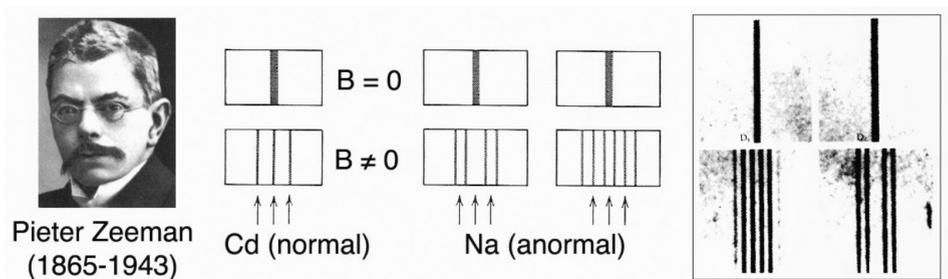


Figure 5 : Expérience de Zeeman

Ainsi, en 1896, Zeeman (étudiant de Heike Kamerling Onnes, inventeur de la supraconductivité et lauréat du prix Nobel de physique en 1913), découvre que les raies spectrales d'une source de lumière soumise à un champ magnétique possèdent plusieurs composantes, chacune d'elles présentant une certaine polarisation. Ce phénomène, appelé par la suite effet Zeeman, confirme la théorie électromagnétique de la lumière. Il partage, en 1902, le prix Nobel de physique avec Hendrik Lorentz «en reconnaissance des extraordinaires services qu'ils ont rendus par leurs recherches sur l'influence du magnétisme sur les phénomènes radiatifs<sup>3</sup>.



Otto Stern (1888-1969)

En 1922, Otto Stern et Walther Gerlach ont mis au point une expérience mettant en évidence l'existence du spin de l'électron. Dans le cas de l'atome d'argent, la séparation en deux faisceaux révèle qu'il existe deux états possibles pour le spin d'atome. Les résultats de cette expérience ont incité Otto Stern à écrire à Niels Bohr pour lui confirmer que l'atome est quantique, comme il l'avait prédit. Ainsi, on peut conclure qu'en chimie tout est quantique.

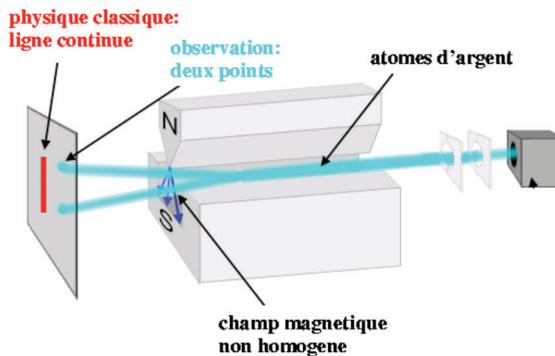


Figure 6 : Expérience de Stern-Gerlach

En 1924, Wolfgang Pauli, lauréat du prix Nobel de physique en 1945, découvre le spin du noyau atomique, montrant que certains noyaux présentent des propriétés magnétiques pouvant être assimilés à de microscopiques boussoles dont l'amplitude absolue dépend de l'isotope étudié.



Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958)

En 1925, pour rendre compte des spectres atomiques, notamment le dédoublement des raies spectrales du sodium, George Uhlenbeck et Samuel Goudsmit découvrent le concept du spin de l'électron. On peut remarquer que le spin électronique est introduit comme un paramètre supplémentaire pour interpréter des résultats expérimentaux.

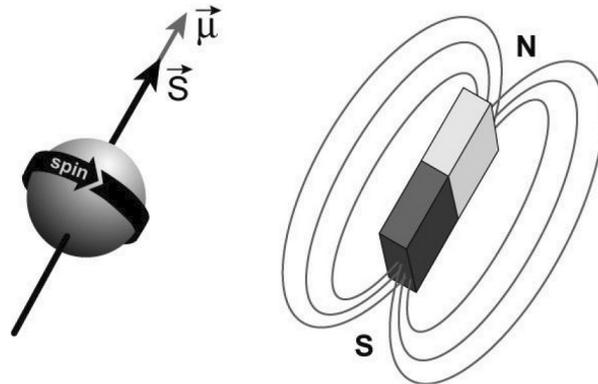


Figure 7 : Représentation schématique du spin nucléaire



George Uhlenbeck (1900-1988) et Samuel Goudsmit (1902-1978)

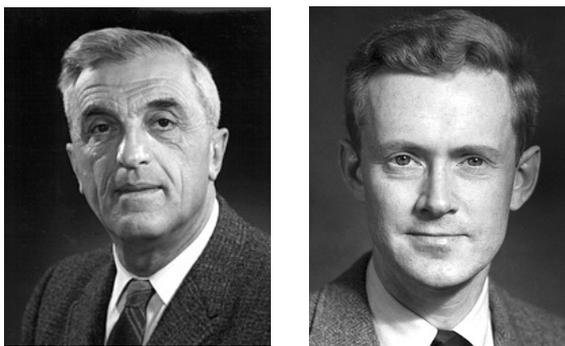
En 1933, Otto Stern, lauréat du prix Nobel en 1943, et ses collaborateurs avaient déterminé le moment magnétique du proton. Sa méthode a été améliorée en 1936 par Rabi, Alvarez et Ramsey, en observant sur des jets atomiques, par effet de résonance avec une onde radio incidente, les moments magnétiques nucléaires de certains atomes, permettant de découvrir le phénomène de la résonance magnétique nucléaire en 1938.



Isidor Isaac Rabi (1898-1986)

Isidor Rabi, physicien américain, a prédit que l'expérience de Stern-Gerlach pourrait être modifiée pour confirmer les propriétés du noyau atomique. Ses techniques pour l'utilisation de la résonance magnétique nucléaire pour discerner le moment magnétique et spin nucléaire d'atomes lui ont valu le prix Nobel de physique en 1944. Il est considéré comme l'un des pères fondateurs du CERN à Genève (Organisation Européenne pour la Recherche Nucléaire).

Les premières mesures du nucléaire par induction magnétique, ont été réalisées, indépendamment en 1946 par deux équipes américaines : Purcell, Torrey et Pound à Harvard; et Bloch, Hansen et Packard à Stanford. Pour ces travaux, qui constituent la base des méthodes actuelles de détection de la RMN, Félix Bloch et Edward Mills Purcell ont reçu le prix Nobel de physique en 1952, couronnant l'émergence d'un nouveau champ de recherche, la RMN dont personne ne soupçonnait, alors, le futur.



**Félix Bloch (1905-1983) et Edward Mills Purcell (1912-1997)**

En 1948, la relaxation dans les liquides a été expliquée par les théories de Bloembergen, Purcell et Pound (BPP).

En 1950, W. Proctor et W. Dickinson, ont découvert, indépendamment, le phénomène de déplacement chimique, constituant, ainsi, une découverte fondamentale pour le développement des applications de la RMN en chimie organique.

Il est à signaler que cette découverte et celle des interactions indirectes, mise au point, indépendamment, en 1951, par Gutowsky et McCall, et Hahn et Maxwell, mettant en évidence la sensibilité de la fréquence de résonance à l'environnement électronique des noyaux, c'est-à-dire aux liaisons chimiques, ont fait entrer la chimie dans le domaine de la RMN (ou l'inverse), faisant de la RMN l'instrument d'une véritable révolution de la chimie structurale. La découverte de l'effet de l'échange chimique sur les spectres de RMN par les équipes Gutowsky-McCall- Slichter-Saïka et Hahn-Maxwell en 1953, est également d'une importance fondamentale.

Ces dernières découvertes ont suscité le commentaire (en privé) de Félix Bloch : «Quand les chimistes pénètrent dans un domaine, il est temps d'en sortir !». Boutade, bien sûr, de la part d'un physicien théoricien, mais aussi une vision prémonitoire que les chimistes deviendraient les utilisateurs majoritaires de la RMN par rapport aux physiciens.

En 1950, Erwin Hahn découvre les échos de spin à la base des nombreuses techniques multi-impulsionnelles utilisées de nos jours. Ils lui ont permis de découvrir les interactions indirectes entre spins nucléaires par de leur cortège électronique, d'importance fondamentale pour la chimie, ainsi que l'effet de l'échange chimique sur leurs spectres résonance.

Le déplacement chimique ou position du signal, est la première information apportée par le spectre RMN sur la structure de la molécule.

La seconde source d'information structurale du spectre provient de la forme des signaux qui découle du couplage spin-spin



**Erwin Hahn ( 1921-2016)**

Au cours des années qui suivent, la RMN était avant tout un outil d'investigation de la matière condensée à cause de sa faible sensibilité, et ne pouvait s'observer que sur un certain nombre de noyaux dans un espace limité, c'est-à-dire sur une matière condensée où les noyaux étaient proches les uns des autres et soumis à des interactions mutuelles, ainsi qu'à des interactions avec le milieu environnant. Ces interactions créent des perturbations apportées à la résonance, qui sont considérées comme plus intéressantes que la fréquence de résonance elle-même et constituent l'objet principal d'investigation.

En 1953, l'effet Overhauser dans les métaux a été découvert. C'est l'effet d'augmentation de la polarisation des spins nucléaires lorsqu'on sature la résonance des électrons de conduction (interprété plus tard par Solomon comme un effet de relaxation croisée et généralisé aux systèmes purement nucléaires)



**Albert Warner Overhauser (1925-2011)**

Solomon en 1955, a découvert la relaxation croisée entre espèces nucléaires différentes. Les équations de Salomon sont utilisées pour calculer le transfert d'aimantation à la suite de la relaxation dans un dipolaire système, et expliquer l'effet Overhauser nucléaire, qui est un outil important dans la détermination de la structure moléculaire

A partir de 1953-1955, les premiers spectromètres de RMN commerciaux à électroaimants de la firme VARIAN, sont apparus. Pour les physiciens, spectromètres «large bande» avec détection synchrone (2 à 16 MHz), et pour les chimistes spectromètres «haute résolution» à 30 MHz protons, puis 40 MHz.

E.R. Andrew, en 1959, a démontré que la rotation d'un échantillon autour d'un axe particulier, l'angle magique, permet l'obtention de spectres résolus, en RMN des solides.

En chimie, les spectaculaires progrès conceptuels ont été rendus possibles par le développement des spectromètres et l'apparition des premiers mais modestes ordinateurs. Ceux-ci ont conduit en particulier à l'abandon presque complet de la méthode en continu au bénéfice de la pratique des impulsions.

Pour les spectromètres, des dates marquantes sont :

- 1961 : sortie du spectromètre A60 par la firme Varian, qui a connu une grande vogue et commencé à transformer la RMN en outil de chimie analytique important.
- 1964 : premier spectromètre (Varian) à aimant supraconducteur, à 200 MHz protons, bientôt poussé à 220 MHz.
- 1964 : expérience importante pour le développement immédiat, la première utilisation de la transformée de Fourier dans un liquide par Anderson et Ernst.
- 1972 : premier spectromètre (Bruker) entièrement dédié aux impulsions transformées de Fourier.

Richard Ernst (Zurich), lauréat du prix Nobel de chimie en 1991, introduisit la RMN par transformée de Fourier, en réalisant l'acquisition du signal dans le domaine temporel, puis en faisant la transformée de Fourier de ce signal au lieu du conventionnel balayage en fréquence, la sensibilité de l'expérience fut augmentée d'un facteur 100.



**Robert R Ernst**

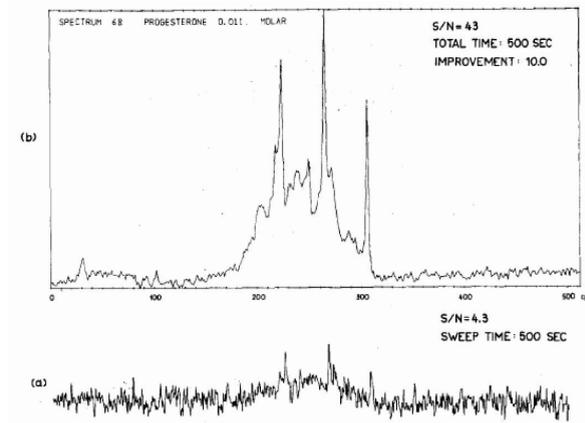
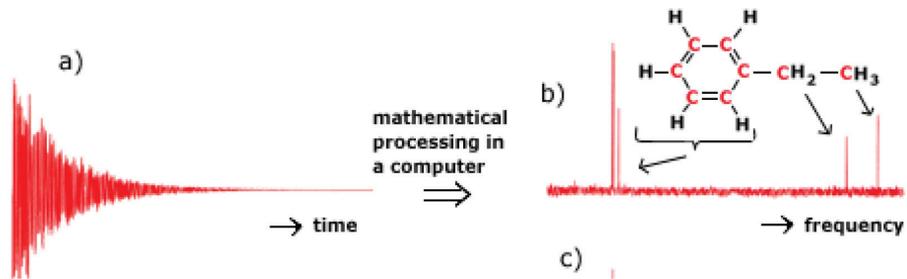


Figure 8 : La RMN par transformée de Fourier

Ce pas de géant pour la RMN en amena un autre : en 1971, lors d'une école d'été en Pologne, Jean Jeener proposa une méthode qui pourrait conduire à l'acquisition de spectres de corrélation bidimensionnels en tirant partie de la transformée de Fourier. Ernst fit la démonstration expérimentale de cette proposition en 1975 et montra qu'il était possible d'établir des connectivités entre les atomes des molécules

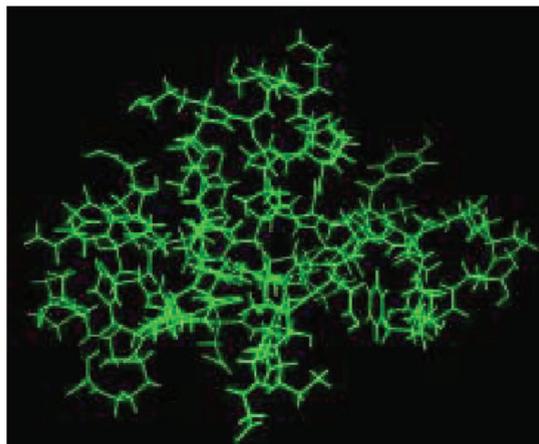


Figure 9 : 1<sup>ère</sup> structure d'une protéine

En 2002, Kurt Wüthrich, chimiste et biophysicien suisse, reçoit, conjointement avec Koichi Tanaka et John J. Fenn, le prix Nobel de chimie pour le développement de la RMN dans la détermination de la structure tridimensionnelle de macromolécules en solution



**Kurt Wüthrich**

En 2003, Paul Lauterbur et Sir Peter Mansfield reçoivent le prix Nobel de physiologie ou médecine pour leur contribution au développement de l'imagerie par résonance magnétique (IRM).



**Paul Lauterbur  
(1929-2017)**



**Sir Peter Mansfield  
(1933-2017)**

## V- LE PHENOMENE PHYSIQUE

La RMN, discipline très élaborée et complexe, ne peut être abordée sans faire appel à la physique, la physique quantique et aux mathématiques. La conception et la compréhension des méthodes mises au point dans ce domaine, nécessitent une sophistication théorique très poussée.

Les noyaux atomiques possédant un nombre impair de protons, de neutrons, ou des deux, auront un spin nucléaire intrinsèque. C'est le cas de l'hydrogène  $^1\text{H}$ , (abondance relative 99,8%), du fluor  $^{19}\text{F}$  (100%), des isotopes  $^{13}\text{C}$  (1,1%),  $^{15}\text{N}$  (0,37%) et  $^{31}\text{P}$  (100%). Ainsi, lorsqu'un noyau atomique ayant un spin non nul, est placé dans un champ magnétique  $B_0$ , le spin nucléaire peut s'aligner, soit dans la même direction, soit dans la direction opposée au champ magnétique. Ces deux

types d'alignement de spin nucléaire, sont caractérisés par des énergies différentes et l'application d'un champ magnétique, facilite la levée de la dégénérescence des spins nucléaires.

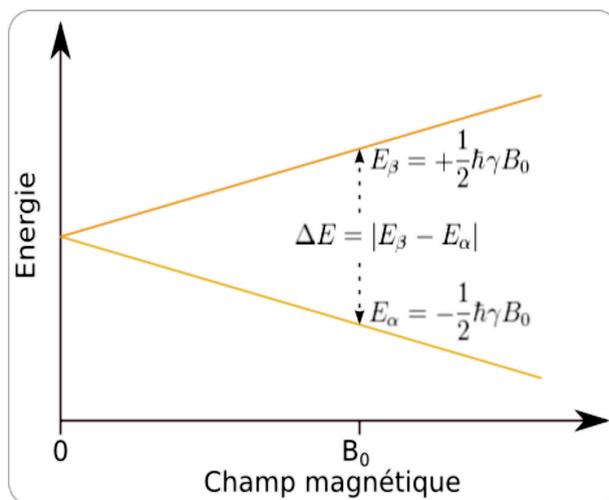


Figure 10 : Schéma énergétique

LA RMN désigne un aspect de la dynamique des spins. En effet, ils sont sensibles aux impulsions magnétiques de fréquence radiofréquence. Ce phénomène est à la base de la RMN qui consiste à manipuler l'état des spins grâce à des impulsions FR et à détecter le champ magnétique qu'ils induisent

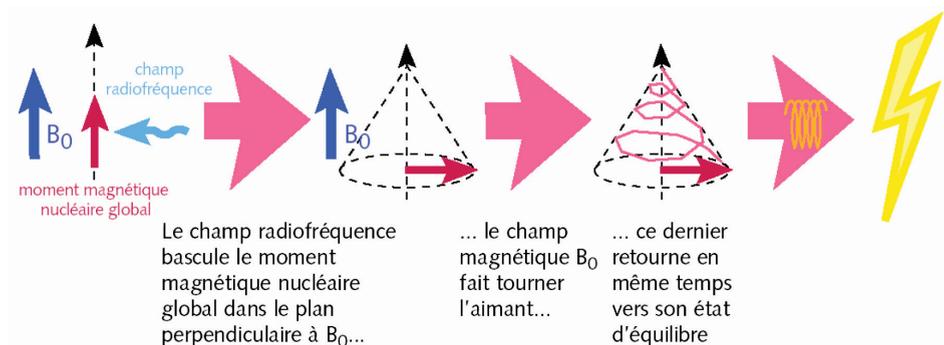


Figure 11 : Le phénomène de la RMN

## VI- L'ENTRÉE DE LA CHIMIE EN RMN (OU INVERSEMENT)

### VI-a- LE DEPLACEMENT CHIMIQUE

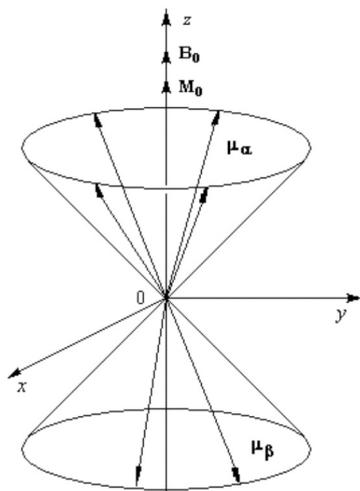
Pour observer le signal de résonance, c'est à dire la transition entre les deux niveaux d'énergie, il faut provoquer le basculement des vecteurs moments magnétiques.

Pour cela on applique un champ  $B_1$ , tournant à la même fréquence que la fréquence de rotation des moments magnétiques, c'est à dire à la fréquence de Larmor.

A l'échelle macroscopique, ce n'est pas un spin que l'on observe mais une collection de spins.

Si l'on regroupe en un point, l'ensemble de ces moments magnétiques on observe deux cônes de moments magnétiques de spin  $m$  qui précessionnent à la fréquence de Larmor, et qui, sous l'action du champ  $B_1$  basculent sans discontinuer entre les deux états  $m=+1/2$  et  $m=-1/2$ .

La magnétisation macroscopique  $M_0$  résultante est fonction de la différence de population des états quantiques magnétiques. Elle dépend de la différence d'énergie entre les états  $m=-1/2$  et  $m=+1/2$  qui est proportionnelle à l'induction  $B_0$  appliquée et au rapport gyromagnétique (rapport entre le moment magnétique et le moment cinétique) qui est une caractéristique de chaque noyau.



**Figure 12 :** Cônes de moments magnétiques de spin

Le champ magnétique secondaire va, ainsi, moduler le champ perçu par chaque noyau d'hydrogène. C'est le phénomène de blindage (ou de déblindage) qui fait que la résonance de chaque noyau est fonction de son environnement.

Notons que la différence des fréquences induite par les différents environnements électroniques, est généralement appelée déplacement chimique, et que l'on mesure par rapport à une référence généralement le tétraméthylsilane (TMS) pour  $^1\text{H}$  et  $^{13}\text{C}$ , est de l'ordre de 0,001% du champ appliqué.

Le champ magnétique ressenti par le noyau observé est  $B_{\text{local}} = B_0 (1-s)$ ,  $B_0$  est le champ magnétique principal et  $s$  est la constante de blindage

Les principaux facteurs qui influencent le déplacement chimique sont la densité électronique, l'électronégativité des groupes proches et les effets d'anisotropie du champ induit

Il y a une relation entre le déplacement chimique, caractéristique de la fonction chimique et situation topologique de l'hydrogène dans la molécule. On comprend donc l'intérêt de la RMN pour le chimiste organicien qui veut établir une structure, sachant que l'hydrogène et le carbone sont les atomes les plus présents dans une molécule.

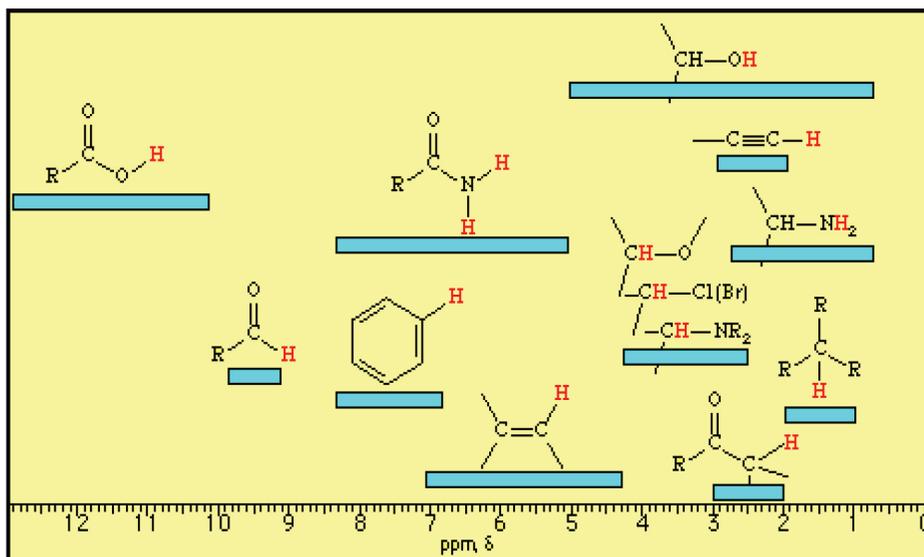


Figure 13 : Quelques déplacements chimiques en RMN  $^1\text{H}$

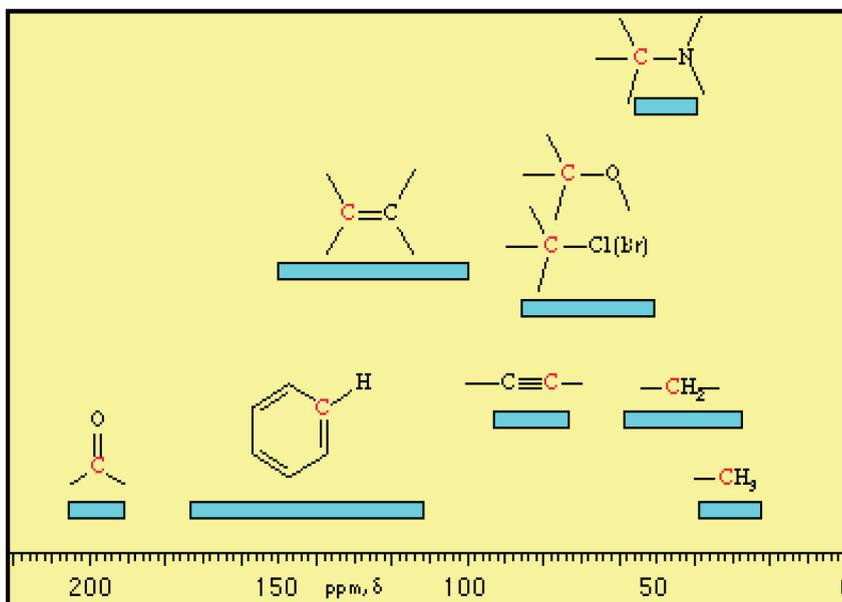
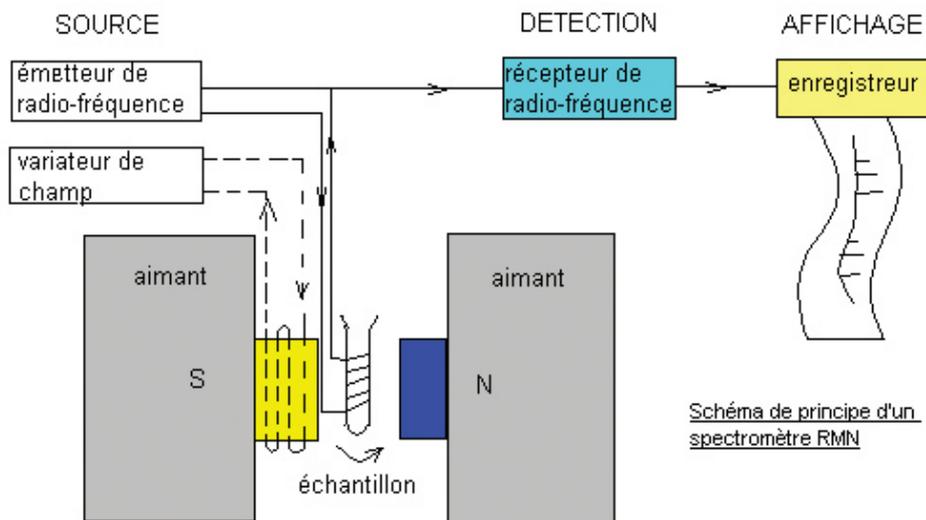


Figure 14 : Quelques déplacements chimiques en RMN  $^{13}\text{C}$

## VI-b- LE COUPLAGE SPIN-SPIN

Le déplacement chimique ou position du signal, est la première information apportée par le spectre RMN sur la structure de la molécule. La seconde source d'information structurale du spectre provient de la forme des signaux qui découle du couplage spin-spin. Les signaux peuvent présenter des structures fines caractéristiques des groupements de noyaux qui les entourent. Ce couplage noté  $J$  et s'effectue par le biais des électrons de liaisons et ne concerne donc que les voisins proches du noyau considéré. Pour simplifier, les protons voisins peuvent être assimilés à des petits aimants qui s'alignent avec le champ  $B_0$  (comportement paramagnétique) ou à l'opposé du champ (diamagnétisme) Dans le cas où un proton a un seul voisin, l'influence de celui-ci entrainera un dédoublement du pic. L'espacement entre les deux pics est noté  $J$  et appelé constante de couplage, avec un chiffre en haut à gauche ( $^nJ$ ) qui indique le nombre de liaisons séparant les noyaux. La constante de couplage est une constante moléculaire exprimée en Hz et est indépendante du champ magnétique  $B_0$ .

Il existe deux mécanismes de couplage entre spins nucléaires: l'interaction dipolaire et le couplage spin-spin indirect appelé également couplage scalaire. Il est à noter que l'interaction dipolaire se fait entre spin à travers l'espace et ne se manifeste que par les spectres en phase anisotrope (solides, cristaux liquides).



**Figure 15 :** Schéma de principe d'un spectromètre de RMN

Le spectromètre RMN est constitué des parties suivantes :

- Un aimant à l'origine du champ  $B_0$ . Aujourd'hui pour obtenir les champs magnétiques requis, on a recours à des cryoaimants qui utilisent des bobines supraconductrices refroidies à l'hélium liquide;

- Un émetteur-récepteur de radiofréquences RF. Cet émetteur est constitué d'une bobine alimentée par un courant alternatif (de fréquence égale à la fréquence de Larmor). Après l'impulsion, cette bobine est utilisée en récepteur pour capter le signal;
- Un ordinateur couplé à l'émetteur-récepteur et aux différents éléments constitutifs de l'appareillage RMN. Il permet à la fois de piloter le spectromètre, de stocker les signaux, de les transformer en spectre exploitable et de piloter l'enregistreur qui va conduire à la réalisation du spectre papier.

Les progrès constants de la RMN sont dus au développement des technologies nécessitant :

- l'utilisation de champs magnétiques de plus en plus intenses, pouvant dépasser 20 teslas! grâce à l'utilisation de solénoïdes constitués de matériaux supraconducteurs qui doivent être refroidis par un système de dewars (un dewar contenant de l'hélium liquide à  $-269^{\circ}\text{C}$  (4K), lui-même entouré d'un second dewar contenant de l'azote liquide à  $-196^{\circ}\text{C}$ );
- la mise au point de techniques de RMN dite impulsionnelle pour les radio fréquences qui servent à exciter les noyaux avec des durée d'impulsions de l'ordre de la microseconde;
- la croissance exponentielle des puissances de calcul des ordinateurs.

L'installation d'un appareil de RMN de haute fréquence requiert, donc, des salles adéquates de surface respectable.

Le champ magnétique appliqué peut avoir une valeur comprise entre 1 et 23,5 Teslas. Ce qui représente 500 000 fois le champ magnétique terrestre ( $4,75 \cdot 10^{-5}$  T). Ainsi, la fréquence de résonance peut varier de 42 à 1000 MHz

Pour réaliser une analyse chimique, on utilise des appareils de 300 à 600 MHz; alors que ceux à 700 à 1000 MHz, sont plutôt réservés à l'étude de molécules très complexes comme les protéines.



**Figure 16 :** Spectromètre de Rmn à aimant supraconducteur

La compagnie Bruker propose aujourd'hui avec un aimant supraconducteur persistant de 23,5 teslas, le premier spectromètre RMN au monde atteignant 1 gigahertz.

### VIII- LA RMN A DEUX DIMENSIONS

C'est à Richard R. Ernst, professeur à l'École Polytechnique de Zurich et lauréat, pour une oeuvre de physicien, du prix Nobel de Chimie de 1991, qu'on doit la découverte de la RMN impulsionnelle qui aura un impact considérable en chimie, biologie et médecine. En effet, en onde continue, seule une partie des spins, à la fréquence courante d'excitation, contribue, à un instant donné, au signal. En RMN impulsionnelle, l'ensemble des spins est excité, en même temps, par une impulsion radiofréquence courte, donc non sélective; après celle-ci, le récepteur est ouvert et le signal de précession libre (Free induced decay: FID en anglais) est mesuré et numérisé. Comme il contient les contributions d'un grand nombre de noyaux, son interprétation directe n'est pas possible. En utilisant la transformée de Fourier, on calcule un spectre en fréquence formellement analogue au spectre obtenu classiquement par enregistrement onde continue.

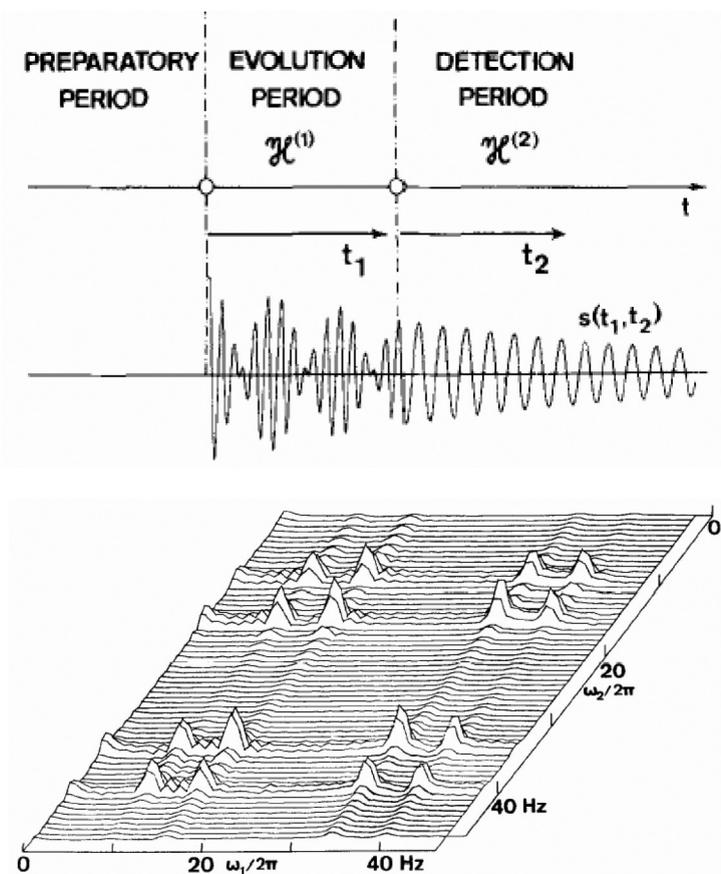


Figure 17 : RMN à deux dimensions

La RMN-2D ou RMN en deux dimensions ou RMN bidimensionnelle, devenue une nouvelle discipline, a été appliquée aux molécules complexes à l'instar des macromolécules biologiques, protéines et acides nucléiques. A l'ETH-Honggerberg de Zurich se trouvait également Kurt Wüthrich, qui s'intéressait déjà à la RMN des protéines. Dans une collaboration exemplaire, ils surent, dès 1980, appliquer la spectroscopie 2D à ces molécules dont on pouvait alors espérer établir la structure en solution, se libérant ainsi, et pour la première fois, de la nécessité de cristallisation. C'est aujourd'hui une réussite complète, par le mariage heureux de la spectroscopie RMN «2D» et de la modélisation moléculaire. Le succès de la méthode poussa également les constructeurs à développer des aimants supraconducteurs de plus en plus puissants, offrant encore plus de sensibilité et de résolution.

En quelques années, des dizaines de séquences RMN sont nées, capables de sonder les connectivités à travers les liaisons (COSY), à travers l'espace (NOESY), par échange chimique (EXSY) ou encore entre hétéroatomes (HSQC). Ceci fut la démonstration que la RMN ne se limitait pas à une méthode pour obtenir les déplacements chimiques des protons d'une molécule, mais qu'elle pouvait s'adapter à une grande diversité de problèmes, allant de la structure tridimensionnelle d'une protéine à la mesure de coefficients de diffusion. La RMN multidimensionnelle, en combinaison avec la capacité que l'on a à manipuler l'hamiltonien apparent de RMN (manipuler l'aimantation dans l'espace, ce qui se traduit au niveau quantique par des rotations de l'hamiltonien dans l'espace des spins) par des impulsions radiofréquence (notion introduite entre autres par Andrew, Waugh et Freeman) permet de créer des expériences RMN qui s'adaptent aux propriétés que l'on veut extraire, de l'affinité d'une enzyme pour un substrat à la dynamique moléculaire d'un catalyseur sur une surface.

## **IX- LA RMN DU SOLIDE**

La résonance magnétique nucléaire (RMN) de l'état solide est l'une des techniques les plus utilisées pour la caractérisation de la structure locale et de la dynamique d'un très grand nombre de matériaux solides cristallins ou amorphes qu'ils soient organiques, inorganiques ou hybrides. Cette technique permet en effet d'observer sélectivement la signature spectroscopique de nombreux noyaux et à priori d'en extraire des informations structurales détaillées. De plus, des expériences RMN de corrélation homo et hétéronucléaire peuvent fournir des informations sur la proximité spatiale et sur les liaisons entre atomes.

L'intérêt des biologistes et chimistes pour la RMN en phase solide prit beaucoup plus de temps à se développer. En effet, s'il est courant d'obtenir des spectres très bien résolus en RMN en phase liquide, ceci est loin d'être le cas en phase solide.

En 1958, Andrew et Lowe proposèrent de faire tourner l'échantillon autour d'un axe incliné par rapport au champ magnétique principal d'un angle correspondant à la diagonale d'un cube, appelé «angle magique». Ils ont, ainsi, obtenu un spectre présentant des signaux un peu moins larges.

Afin d'observer les noyaux atomiques étudiés avec une meilleure sensibilité, différentes techniques de transfert d'aimantation du proton vers les hétéronoyaux ont été développées, comme les méthodes INEPT («Insensitive Nuclei Enhanced by Polarization Transfer») et CPMAS («Cross Polarization Magic Angle Spinning») en RMN des solutions et RMN en phase solide, respectivement.

La RMN en phase solide ne semblait pas du tout adaptée à l'étude structurale de systèmes biologiques tels que les protéines. Cette technique fut plutôt utilisée comme méthode de caractérisation de la composition chimique, de la conformation locale et de la dynamique de polymères tels que les composés ligno-cellulosiques. En parallèle aux développements méthodologiques, l'abandon des électroaimants pour des aimants supraconducteurs permet de faire avancer la RMN. Dans le cas particulier de la RMN en phase solide, ces hauts champs magnétiques combinés au développement de sondes permettant de faire tourner l'échantillon à des vitesses de plus en plus élevées ont permis un énorme gain en résolution, en moyennant de mieux en mieux les couplages dipolaires, ainsi qu'en sensibilité.

L'étude de protéines par RMN en phase solide a été réalisée grâce aux importants progrès dans la préparation des échantillons. Les premières protéines analysées étaient lyophilisées ou déshydratées par sublimation, permettant d'obtenir une poudre. Ainsi, une légère variation de la structure locale de la protéine, conduit à un élargissement des raies

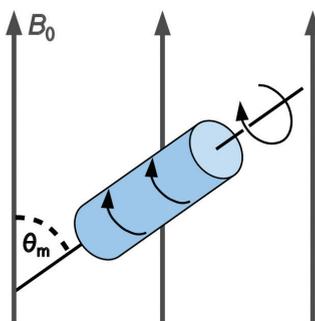
La RMN des solutions a permis d'étudier des molécules d'intérêt biologique, à l'instar des 8500 structures de protéines recensées dans la «Protein Data Bank». Cependant, cette technique présente, néanmoins, une limitation liée à la taille du système étudié. En effet, dans une molécule de plus grande taille, le mouvement brownien est ralenti, induisant des problèmes de relaxation qui engendrent des spectres de RMN présentant des raies larges. Depuis le début des années 2000, la RMN en phase solide est devenue une alternative intéressante à la RMN des solutions.

La RMN en phase solide possède l'avantage certain qu'elle n'est pas limitée en théorie par la taille des molécules. De plus, elle permet l'étude de systèmes non abordables par la RMN en phase liquide ou par d'autres techniques de caractérisation telles que la cristallographie de rayons X. C'est ainsi qu'il a été possible d'aboutir à la structure tridimensionnelle de protéines formant des fibrilles, impliquées dans les maladies neurogénéralives telles Alzheimer et Parkinson, et à la structure de protéines membranaires. Trente et une structures (tout type de protéines confondues) sont actuellement disponibles dans la PDB. Les limitations de la RMN en phase solide à son application en biologie, biochimie ou chimie sont cependant encore nombreuses. Tout d'abord, un problème de sensibilité : le temps consacré à une expérience reste très important, notamment à cause des temps de relaxation (ou temps de retour à l'équilibre) très longs rencontrés dans les échantillons. Il en découle que la sensibilité des expériences par unité de temps reste très insuffisante. Ensuite, malgré l'amélioration apportée par la rotation à l'angle magique, les vitesses de rotation de plus en plus importantes et le développement de hauts champs magnétiques, la résolution de spectres de biomolécules reste encore bien médiocre. Ceci pose un problème lors de l'étude de gros systèmes. La plus grosse protéine étudiée à ce jour en RMN en phase solide possède une masse de seulement 17,6 kDa alors que les protéines étudiées en solution atteignent 900 kDa !

Enfin, de nombreux progrès sont encore à prévoir dans le développement méthodologique. Notamment, il est nécessaire de mettre au point des séquences dites de «recouplage» qui permettent de réintroduire les interactions dipolaires moyennées par la rotation à l'angle magique. En effet, de la force de ces interactions entre les spins peuvent être tirées des informations portant sur la distance ou les angles entre les noyaux. La somme des «contraintes structurales» recueillies sur un échantillon peut mener au calcul de la structure tridimensionnelle du système étudié. A ce jour, de telles séquences existent déjà, mais les contraintes «à longue distance» entre les spins, les plus importantes d'un point de vue structurale, sont encore trop difficilement détectées et en trop petit nombre.

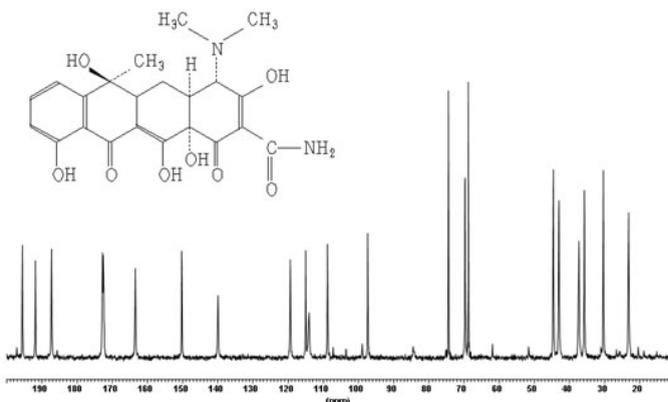
L'échantillon à analyser est mis dans un tube parfaitement cylindrique, qui, après son introduction dans la sonde, va être mis en rotation très rapide de façon à assurer une parfaite homogénéité du champ magnétique perçu par l'ensemble des spins. En effet, cet échantillon contient un très grand nombre de molécules, il faut donc obtenir un champ  $B_0$  le plus homogène possible dans tout le volume qu'il occupe, de façon à ce que deux protons analogues sur deux molécules différentes produisent des signaux identiques qui pourront se cumuler.

La contrainte d'homogénéité du champ statique est capitale.



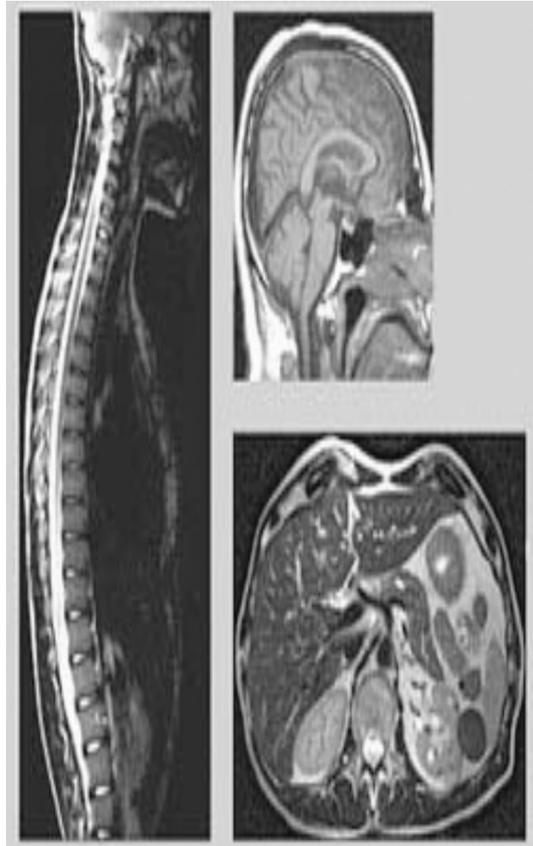
**Figure 18 :** Rotation d'un échantillon autour d'un axe particulier, l'angle magique

**$^{13}\text{C}$  CP/MAS of Tetracycline hydrochloride (21.1 T, MAS 20 kHz)**



**Figure 19 :** Spectre  $^{13}\text{C}$  CP/MAS d'une tétracycline solide

## X- L'IMAGERIE PAR RESONANCE MAGNETIQUE (IRM)



**Figure 20** : l'IRM de différents tissus

En 1973, un progrès important est accompli : s'inspirant des méthodes de reconstruction d'images utilisées en tomodensitométrie, Paul Lauterbur réalise pour la première fois une «imagerie» (qu'il baptise Zeugmatographie) basée sur la RMN, en utilisant le principe des gradients qui permettent de capturer l'image d'une «coupe virtuelle» d'un objet en deux dimensions. Simultanément mais de façon indépendante, Peter Mansfield propose une méthode similaire et introduit en 1977, la technique d'imagerie écho-planaire permettant la capture de nombreuses images en un temps relativement court. Le premier objet connu du grand public à avoir été étudié par IRM est un poivron, après un essai sur deux tubes capillaires.

Dans les années qui suivent, la technique évolue rapidement notamment grâce aux progrès réalisés en informatique et en électronique qui permettent de mettre en œuvre des méthodes numériques coûteuses en temps de calcul. Ainsi en 1975, Richard R. Ernst propose d'utiliser la transformée de Fourier pour analyser le codage en fréquence et en phase du signal IRM.

Les premières images de tissus humains seront produites en 1975 par Mansfield; en 1977 sera réalisée la première image d'un corps humain vivant par Damadian qui dirigera ensuite la fabrication des premiers appareils commerciaux.

Après plusieurs années d'évolution, l'IRM est donc devenue une technique puissante du domaine de l'imagerie médicale, lequel est sans cesse en développement. En reconnaissance de «leurs découvertes concernant l'imagerie par résonance magnétique», Peter Mansfield et Paul Lauterbur furent récompensés par le Prix Nobel de physiologie ou médecine en 2003.

Le centre européen NeuroSpin est en passe de devenir le plus grand centre au monde d'imagerie par résonance magnétique. L'un de ses objectifs est d'élucider le «code neural», autrement dit, comprendre comment l'information est codée dans le cerveau.

L'imagerie par résonance magnétique (IRM) est une technique d'imagerie médicale permettant d'obtenir des vues en deux ou en trois dimensions de l'intérieur du corps de façon non invasive avec une résolution en contraste relativement élevée.

L'IRM repose sur le principe de la résonance magnétique nucléaire (RMN) qui utilise les propriétés quantiques des noyaux atomiques pour la spectroscopie en analyse chimique. L'IRM nécessite un champ magnétique puissant et stable produit par un aimant supraconducteur qui crée une magnétisation des tissus par alignement des moments magnétiques de spin. Des champs magnétiques oscillants plus faibles, dits «radiofréquence», sont alors appliqués de façon à légèrement modifier cet alignement et produire un phénomène de précession qui donne lieu à un signal électromagnétique mesurable.

La spécificité de l'IRM consiste à localiser précisément dans l'espace l'origine de ce signal RMN en appliquant des champs magnétiques non uniformes, des «gradients», qui vont induire des fréquences de précession légèrement différentes en fonction de la position des atomes dans ces gradients. Il est alors possible de reconstruire une image en deux dimensions puis en trois dimensions de la composition chimique et, donc, de la nature des tissus biologiques explorés.

A partir du moment où la RMN 2D a commencé à fournir une véritable cartographie de molécules complexes avec la mise en oeuvre des différentes séquences décrites précédemment, il était évident que les spécialistes de l'imagerie médicale allaient entrer en piste.

Nos tissus sont principalement constitués d'eau possédant deux atomes d'hydrogène liés à un atome d'oxygène (H<sub>2</sub>O); ce qui a incité, les chercheurs à tenter de faire de la RMN du proton sur un corps humain, et essayer, ensuite, de différencier les signaux obtenus pour les transformer en image par les moyens informatiques de traitement de données.

La RMN devient alors IRM, sigle qui a l'avantage de ne pas contenir la lettre N de nucléaire qui pourrait faire peur aux patients, alors que l'énergie, mise en jeu dans une expérience de RMN, est dérisoire, surtout si on la compare à un cliché de RX.

Peter Mansfield et Paul Lauterbur ont été les premiers à produire des images à partir de la RMN.

L'échantillon (un corps humain) est introduit dans un tube de 60 cm de diamètre environ, siège d'un puissant champ magnétique constant produit par un aimant supraconducteur, pouvant atteindre 10 Teslas (bientôt plus).

Tous les spins se mettent alors à tourner comme des gyroscopes. Un champ oscillant est créé, pendant un temps très bref, par des bobines de gradient de champ (réparties autour du tube) dans les trois directions de l'espace pour provoquer l'excitation des noyaux.

Après l'arrêt de cette impulsion, les noyaux reviennent à leur position initiale, c'est ce que l'on appelle la relaxation. L'expérience est répétée, une antenne réceptrice enregistre les signaux de précession des atomes qui résonnent dans la zone explorée.

Un puissant ordinateur va traiter les signaux obtenus (c'est à dire une très grande quantité de données et reconstituer une image en trois dimensions.

En résumant d'une façon grossière, on peut dire qu'au cours d'une IRM, on mesure l'aimantation résultante en chaque point des tissus analysés. Comme cette aimantation est proportionnelle à la quantité de noyaux d'hydrogène présents, et que les tissus se distinguent par leur contenu en eau, la carte des aimantations résultantes reproduit l'anatomie de ces tissus.

L'obtention d'une image nécessite donc 5 étapes : a):exciter la matière (les protons); b): encoder la position avec un gradient de champ; c): recueillir un signal d'écho avec une antenne; d): décoder la position avec la transformée de Fourier; e): dessiner la zone correspondant à cette position avec une teinte plus ou moins claire selon la quantité de signal

En IRM, la fonction représente l'état du champ électromagnétique (le signal) et sa transformée de Fourier est son image.

Lorsque le système récupère le signal il remplit donc un espace mathématique qui est appelé espace de Fourier ou espace des K.

Cet espace K va contenir toutes les informations nécessaires à la formation de l'image. On passe ensuite de l'espace K à l'image par transformée de Fourier

En imagerie médicale, l'IRM est principalement dédiée à l'imagerie du système nerveux central (cerveau et moelle épinière), des muscles, du cœur et des tumeurs. Grâce aux différentes séquences, on peut observer les tissus mous avec des contrastes plus élevés qu'avec la tomodensitométrie; en revanche, l'IRM ne permet pas l'étude des corticales osseuses (tissus «durs») trop pauvres en hydrogène, ni donc la recherche fine de fractures où seul l'œdème péri-lésionnel pourra être observé.

L'examen IRM n'est pas invasif et n'irradie pas le sujet. Cela en fait donc un outil de prédilection pour la recherche impliquant la personne humaine, et notamment en neurosciences cognitives.

## CONCLUSION

L'histoire de la spectroscopie RMN est intimement liée à celle de la matière et de l'atome. Sans les études théoriques réalisées par d'éminents scientifiques, faisant appel à la physique quantique et corroborées par l'expérimentation, la RMN ne serait jamais découverte et développée.

De même, la chimie, discipline qui s'intéresse à la structure et à la transformation de la matière, a connu un développement exceptionnel en exploitant différentes méthodes physicochimiques, à l'instar de la spectrométrie de masse et la résonance magnétique nucléaire qui ont connu, lors des dernières décennies, un développement exceptionnel, grâce à l'informatique. La RMN, constitue un outil essentiel et incontournable, pour l'élucidation des structures des petites molécules organiques, mais également de systèmes plus complexes comme les protéines, les matériaux organiques, inorganiques et hybrides.

La RMN de l'état solide est l'une des techniques les plus utilisées pour la caractérisation de la structure locale et de la dynamique d'un très grand nombre de matériaux solides cristallins ou amorphes qu'ils soient organiques, inorganiques ou hybrides. Cette technique permet en effet d'observer sélectivement la signature spectroscopique de nombreux noyaux et a priori d'en extraire des informations structurales détaillées. De plus, des expériences RMN de corrélation homo et hétéronucléaire peuvent fournir des informations sur la proximité spatiale et sur les liaisons entre atomes.

Initialement utilisée pour la simple détermination de structure des molécules, l'analyse RMN est maintenant devenue incontournable dans toutes les problématiques concernant le vivant et en particulier dans tous les phénomènes dynamiques complexes qui font aujourd'hui l'objet de recherches intensives.

La mise au point de spectromètres à très haut champ, combinée aux techniques multidimensionnelles et aux progrès de l'informatique, font de la RMN un outil de choix dans la détermination de la structure tridimensionnelle d'une protéine et donc dans l'étude du protéome humain

L'imagerie par résonance magnétique (IRM) est devenue une technique puissante du domaine de l'imagerie médicale, lequel est sans cesse en développement. En imagerie médicale, elle est principalement dédiée à l'imagerie du système nerveux central (cerveau et moelle épinière), des muscles, du cœur et des tumeurs. Grâce aux différentes séquences, on peut observer les tissus mous avec des contrastes plus élevés qu'avec la tomodensitométrie.

L'examen IRM n'est pas invasif et n'irradie pas le sujet. Cela en fait donc un outil de prédilection pour la recherche impliquant la personne humaine, et notamment en neurosciences cognitives.

## Références

- F. Bloch, *Phys.Rev*, 70, 460 (1946)
- W. C. Dickinson, «Dependence of the  $^{19}\text{F}$  Nuclear Resonance Position on Chemical Compound», *Physical Review*, vol. 77, n° 5, 1950, p. 736 (DOI 10.1103/PhysRev.77.736.2).
- W.G. Proctor, F.C. Yu, «The Dependence of a Nuclear Magnetic Resonance Frequency upon Chemical Compound», *Physical Review*, vol. 77, n° 5, 1950, p. 717 (DOI 10.1103/PhysRev.77.717)
- R. Andrew, A. Bradbury et R. G. Eades, «Removal of Dipolar Broadening of Nuclear Magnetic Resonance Spectra of Solids by Specimen Rotation», *Nature*, vol. 183, n° 4678, 1959, p. 1802-1803 (DOI 10.1038/1831802a0)
- R.R. Ernst, W.A. Anderson, *Rev. Sci. Instr.*, 37, 93 (1966)
- M.P. Williamson, T.F. Havel, K. Wüthrich, *J. Mol. Biol.* 182 295 (1985)
- Ernst RR, Anderson WA. Application of Fourier transform spectroscopy to magnetic resonance. *Rev Sei Instrum* 1966; 37 : 98-102. - Aue WP, Bartholdi E, Ernst --- RR. Twodimensional spectroscopy. Application to nuclear magnetic resonance . *J Chem Phys* 1976; 64 : 2229-46.
- Kumar A, Welti D, Ernst RR. NMR Fourier zeugmatography. *J Magn Reson* 1975; 18 : 69-83.
- Ernst RR, Bodenhausen G, Wokaun A. Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions. Oxford : Oxford Science Publications.1987, p610.
- F. Castellani, B. van Rossum, A. Diehl, M. Schubert, K. Rehbein, H. Oschkinat, *Nature*, 420, 98 (2002).
- A. Lesage, L. Duma, D. Sakellariou, L. Emsley, *J. Am. Chem. Soc.*, 123, 5741-7 (2001)
- J.P. Lavergne: <https://www.jeanpierrevarlenge.com/sciences/chimie-vivant-une-si-longue-histoire/xlvii-image-magn%C3%A9tique-1-une-histoire-de-spin/>
- K. Chkirate, K. Karrouchi, N. Dege, N.K. Sebbar, A. Ejjoumany, S. Radi, N. N. Adarsh, A. Talbaoui, M. Ferbinteanu, E.M. Essassi and Y. Garcia. *New Journal of Chemistry*, 44 (2020) 2210-2221.
- M. Goldman, Histoire de la RMN, l'actualité chimique - mars 2004 - n° 273.

## IMAGERIE PAR RÉSONANCE MAGNÉTIQUE FONCTIONNELLE

*Nazik ALLALI*

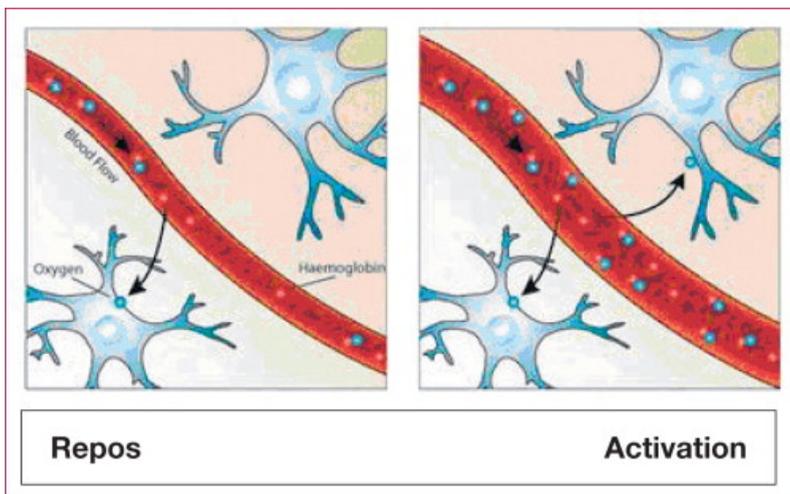
*CHU, Faculté de Médecine, Université Mohammed V, Rabat,  
Vice-présidente de la Société marocaine de radiologie*

### IRMF ET CERVEAU

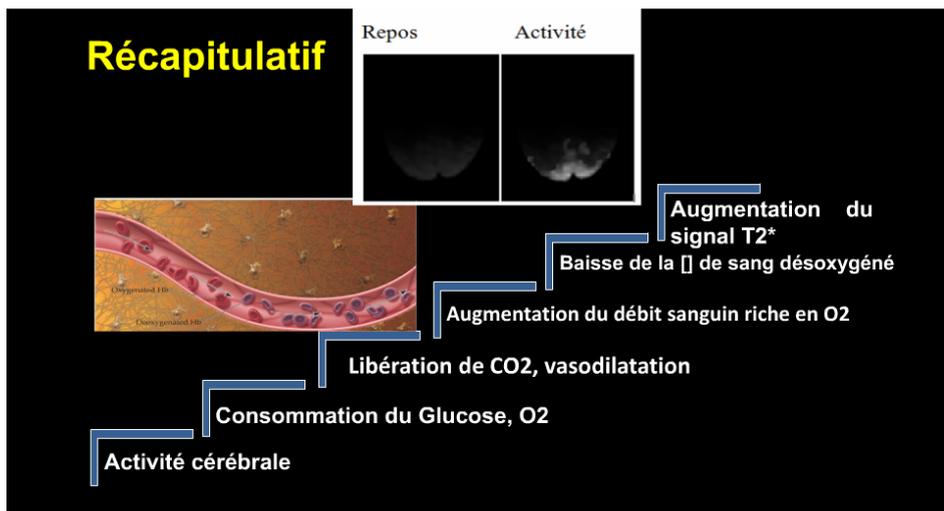
- **L'IRM fonctionnelle a pour but de visualiser, sur une image d'IRM, les aires cérébrales qui sont activées lors de la réalisation d'une tâche**
- on peut faire appel à des fonctions motrices, sensibles, sensorielles ou cognitives.

### Principe de l'IRMF

- *L'IRM fonctionnelle (IRMF): examen non invasif et non irradiant, utilise le même matériel que pour l'IRM conventionnelle,*
- Le principe de l'IRMF repose sur **la méthode BOLD (Blood Oxygenation Level Dependent)** qui permet de visualiser les variations de perfusion cérébrale. En effet, l'activation cérébrale entraîne, localement, à la fois :
  - une augmentation conséquente du débit sanguin cérébral ;
  - une augmentation de la consommation d'oxygène proportionnellement moins importante.

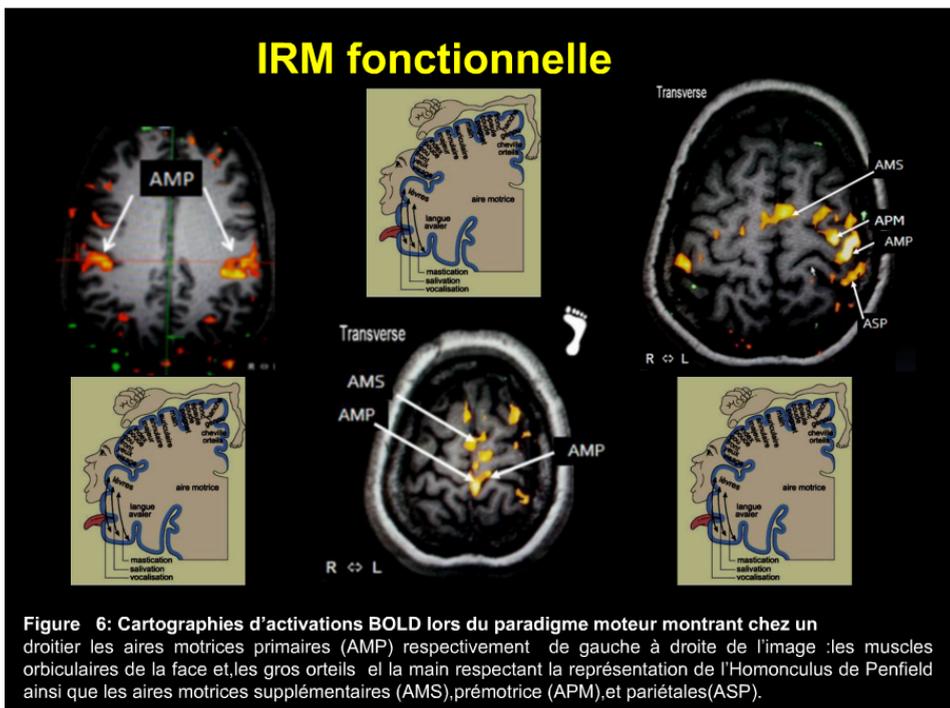


Le signal BOLD. Lors de l'activation neuronale, il existe localement une augmentation du flux sanguin et un apport supplémentaire d'oxygène qui sera consommé localement. La désoxyhémoglobine contient du fer ferreux ( $Fe^{++}$ ) à l'origine du magnétisme de cette molécule, ce qui génère une modification du champ magnétique local (modification en T2) de l'aire activée .



## Déroulement d'un examen d'IRMf

- La réalisation d'une exploration d'IRM fonctionnelle comprend, habituellement, une alternance de périodes de repos (ou de contrôle) et de périodes d'activation durant laquelle le sujet réalise une tâche ou durant laquelle on lui transmet une stimulation.
- Ce cycle en forme de « blocs » (on/off), alternant activation et repos, est appelé un paradigme.
- Si l'on prend l'exemple d'une activation motrice (mouvements d'opposition du pouce et des doigts de la main), cette tâche sera effectuée pendant une durée de 30 secondes suivie d'un repos de 30 secondes, puis de nouveau effectuée durant 30 secondes, etc.
- Une acquisition, en basse de résolution, sera effectuée durant l'ensemble du paradigme (activation et repos).
- Les modifications de signal dues à l'effet BOLD étant très faibles, cette multiplication des mesures est indispensable, ce qui implique l'acquisition d'un très grand nombre d'images.
- Les résultats sont ensuite présentés sous forme de cartes statistiques qui sont superposées à une image anatomique haute résolution, réalisée au préalable



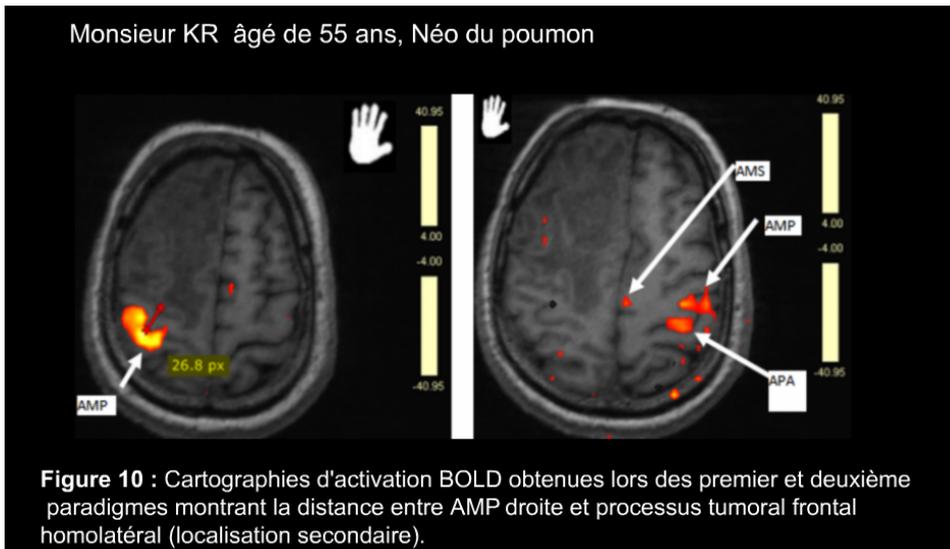
- **La complexité du langage** nécessite plusieurs paradigmes comme la répétition de mots, l'écoute d'histoires, la reconnaissance d'objets pour distinguer l'aire de Broca et l'aire de Wernicke
- **L'étude du cortex visuel** on peut utiliser un système de projection sur un écran associé à un miroir fixé sur l'antenne ou des lunettes spéciales permettant la transmission des images.
- **L'étude du cortex auditif** : les stimulations auditives sont transmises par l'intermédiaire d'écouteurs (ou d'un casque) disponibles, en général, sur tous les appareils.

## Applications de l'IRMf

- L'IRMf ne permet pas de mesurer directement l'activité neuronale, mais qu'elle met en évidence les variations de flux sanguin liées à cette activité. Elle est encore essentiellement un outil de recherche
- Certaines applications peuvent actuellement s'effectuer en routine clinique.

### **Le repérage préchirurgical**

- Evaluation des aires fonctionnelles motrices et sensibles, ainsi que des aires du langage dans le cadre de résections de tumeurs.
- Evaluation du risque chirurgical
- Evaluation de la réorganisation fonctionnelle cérébrale et de la récupération



### En épilepsie :

- L'IRM fonctionnelle couplée à l'EEG (IRMf/EEG) est la technique pour cartographier les réseaux épileptiques chez le patient durant des sessions de l'ordre de 30 minutes.
- L'IRMf est utilisée pour estimer des régions cérébrales dont l'activité métabolique et vasculaire corrèle avec l'apparition de pointes intercritiques et/ou de crises non convulsives sur l'EEG.
- Cette technique, lourde en termes expérimentaux et d'analyse de données, est encore peu répandue.

### Autres

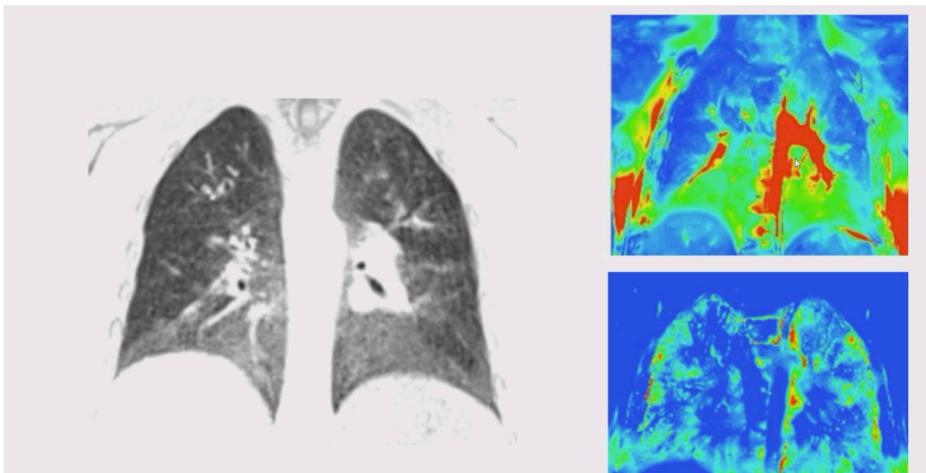
- Troubles cognitifs
- Déficience intellectuelle
- Développement des approches pharmacologiques

## IRM F ET UROLOGIE

- L'uro-IRM fournit des images anatomiques, mais également des données fonctionnelles, sans exposition aux radiations ionisantes.
- Elle permet l'évaluation de la fonction rénale séparée, de l'excrétion, et la quantification de l'obstruction.
- Elle est ainsi très complémentaire à l'échographie dans l'évaluation des uropathies obstructives de l'enfant.
- En cas de disponibilité suffisante, l'IRM remplace avantageusement l'urographie intraveineuse.

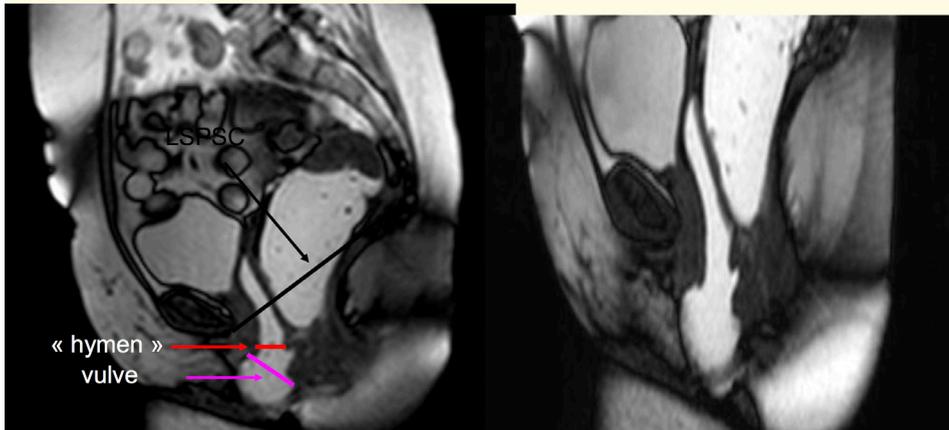


## IRM FONCTIONNELLE ET POUMON



# IRM F ET PROLAPSUS

## Stadification



## CONCLUSION

- L'IRM F est une technique non irradiante.
- Technique prometteuse
- Beaucoup de domaine de recherche
- IRM F et cerveau va nous permettre de comprendre les difficultés des connexions neuronales



# RÔLE DE LA SUPRACONDUCTIVITÉ, COMME ÉTAT QUANTIQUE MACROSCOPIQUE, DANS LA CRÉATION DE CHAMPS MAGNÉTIQUES INTENSES

*Mohamed AZZOUZ*

*Professeur, Université Internationale de Rabat  
Aerospace and Automotive Engineering School et Laboratoire LERMA*

## Résumé

La supraconductivité est un état purement quantique fascinant de la matière. Elle permet la conduction électrique sans perte de chaleur sous l'effet Joule. Pour cela, des supraconducteurs sont utilisés afin de créer des champs magnétiques intenses. De nombreux chercheurs travaillent sur des matériaux novateurs afin de réaliser la supraconductivité à des températures critiques encore plus élevées. Dans ce papier, je résumerai le travail que je mène avec mes collaborateurs de l'université Mohammed V sur des matériaux novateurs basés sur les cuprates à haut  $T_c$ . Ces derniers sont composés de couches d'oxyde de cuivre et de réservoirs de charge inter-couches. Lorsqu'ils ne sont pas dopés, ces cuprates sont des isolants antiferromagnétiques. Nous avons proposé de concevoir des matériaux en combinant des couches alternées des parents de cuprates dopés aux trous et d'autres dopés aux électrons. L'un de nos objectifs était de proposer des cuprates non dopés qui peuvent être soit un isolant antiferromagnétique ou un métal quantique. Le terme métal quantique que nous avons introduit signifie un métal caractérisé par un ordre antiferromagnétique à longue portée ou seulement de fortes corrélations antiferromagnétiques. Il s'agit donc d'un état fondamental stable contre toute autre perturbation. Les nouveaux états métalliques recherchés pourraient être des précurseurs pour des états supraconducteurs exotiques en l'absence ou en présence de dopage. En utilisant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT), nous avons étudié deux composés  $\{La\}\{Pr\}CuO_4$  et  $\{La\}\{V\}CuO_4$  qui illustrent les différentes physiques décrites ci-dessus. Les accolades signifient que la préparation de ces composés devrait se faire en déposant une couche contenant Pr, puis une couche de  $CuO_2$ , puis enfin la couche La pour le matériau hypothétique  $\{La\}\{Pr\}CuO_4$  par exemple. La configuration formée par les positions des atomes des réservoirs de charge par rapport à la couche de  $CuO_2$  est un facteur important dans la nouvelle procédure que nous avons proposée.

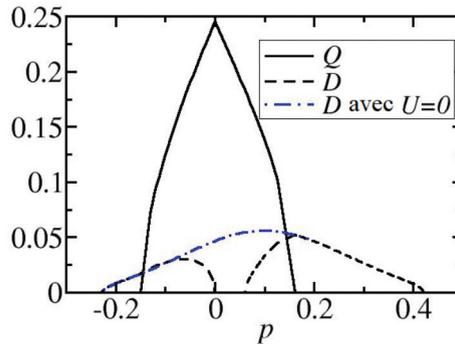
## Introduction

Le phénomène quantique fascinant de la supraconductivité a déjà été appliqué dans des dispositifs tels que les machines d'imagerie par résonance magnétique (IRM), les aimants supraconducteurs utilisés dans les accélérateurs de particules et les trains Maglev, etc. Les supraconducteurs conventionnels utilisés dans ces applications ont des températures critiques supraconductrices  $T_c$  très basses, ce qui signifie que le très coûteux hélium liquide doit être utilisé pour le refroidissement. Les supraconducteurs en cuprate [1] avec un  $T_c$  beaucoup plus élevé utilisent de l'azote liquide comme fluide de refroidissement et pourraient produire des champs magnétiques permanents beaucoup plus intenses que ceux produits par les supraconducteurs conventionnels. Cependant, leur utilisation en pratique est limitée en partie par le fait qu'il n'est pas possible de les utiliser seuls pour réaliser des fils électriques puisqu'ils sont cassants (brittle). Les matériaux supraconducteurs utilisés en IRM sont typiquement le niobium-titane, NbTi, avec  $T_c = 9,4$  K. D'autres scanners IRM utilisent du niobium-étain, Nb<sub>3</sub>Sn avec  $T_c = 18,3$  K. Il est bien connu que les cuprates ou tout autre matériaux supraconducteurs novateurs à haut  $T_c$  et avec des propriétés mécaniques adéquates pourraient révolutionner l'IRM, la technologie des accélérateurs de particules, les trains à lévitation magnétique, les aimants pour la recherche scientifique à haut champ, les voyages dans l'espace et l'énergie de fusion, [1].

Trouver donc de nouveaux matériaux supraconducteurs avec des  $T_c$  plus élevés que ce qui a été déjà réalisé jusqu'à présent augmenterait encore la force des champs magnétiques et réduirait les coûts énergétiques dans les applications technologiques concernées. La recherche de tels matériaux est attrayante et fait l'objet du présent article. Avec des collègues de l'Université Mohammed V de Rabat, nous avons proposé de concevoir des matériaux faits en alternant des couches d'oxyde de cuivre dopées aux trous et d'autres dopés aux électrons, dans le but de trouver de nouveaux matériaux parents pour des supraconducteurs intéressants. Nous avons performé des calculs basés sur la DFT pour deux composés proposés pour lesquels nous avons calculé les structures cristallines, les structures de bande et la conductivité optique. Les résultats de ce travail ont fait l'objet d'un manuscrit soumis pour être publiés dans le journal Physical Review B [2]. Dans le présent papier, je résumerais les raisons qui ont motivé ce travail ainsi que les résultats intéressants que nous avons déjà pu obtenir.

Le diagramme de phases ( $p, T$ ) des cuprates à haut  $T_c$ , où  $p$  est le dopage et  $T$  la température, est caractérisé par deux phases importantes en plus de la phase supraconductrice; la phase antiferromagnétique (AF) proche du dopage nul et la phase connue sous le nom du pseudogap (PG), qui borde la phase supraconductrice et qui intervient pour des niveaux de dopage supérieurs à ceux de la région AF. En dessous de la température PG,  $T^l$ , la densité d'état est caractérisée par une dépression au niveau de Fermi sans qu'un ordre à longue portée conventionnel soit clairement observé dans cette phase. La théorie de l'antiferromagnétisme rotatif (RAFT), que j'ai établie en 2003, décrit la phase PG en termes de l'ordre antiferromagnétique rotatif (RAF) non conventionnel [3,4]. Cette approche permet de calculer un diagramme de phase ( $p, T$ ) comparable au diagramme de phase expérimental, et elle est basée sur des ordres concurrents, c'est-à-dire la concurrence entre la supraconductivité et l'ordre RAF, [5-9]. Notez que l'ordre RAF peut être interprété comme de l'ordre AF émanant de celui qui se produit au voisinage

du dopage nul. Il est important de noter aussi que RAF est un phénomène purement quantique puisqu'il résulte des fluctuations quantiques du spin.



**Figure 1 :** Les paramètres d'ordre RAF,  $Q$ , et supra,  $D$ , sont montrés en fonction du dopage  $p$  pour le modèle d'Hubbard étendu avec  $U = 2.Bt$ ,  $t' = -0.16t$ ,  $t'' = 0.01t$ ,  $t''' = -0.05t$  et un couplage d-wave  $V = 0.85t$  dans le cadre de la théorie RAFT [2,3].  $t$  est l'énergie des sauts électroniques aux proches voisins,  $t'$  est celle aux second proches voisins,  $t''$  aux troisièmes proches voisins, et  $t'''$  aux quatrième proches voisins. Pour  $U = 0$ , le paramètre RAF est nul et le paramètre supra est non nul (ligne pointillée bleue) pour les dopages proches du demi-remplissage  $0 < p < 0.05$ .

## Motivation de l'approche

Lorsque le couplage responsable de l'ordre RAF n'est pas pris en compte dans la théorie RAFT, le diagramme de phase est constitué uniquement du dôme de la supraconductivité qui est optimal proche du dopage nul (ligne pointillée bleue dans la figure 1). Mais en présence de ce couplage, la supraconductivité est détruite au voisinage du dopage nul; le dôme supra se scinde en deux plus petits dômes, l'un dans le régime du dopage aux trous et l'autre dans le régime du dopage aux électrons (lignes pointillées noires dans la figure 1). Dans ce cas, l'ordre RAF domine auprès de  $p = 0$ , (ligne noire pleine de la figure 1). Ceci m'a amené à proposer que si un mécanisme qui améliore la supraconductivité au voisinage du dopage nul au détriment de l'ordre AF et du comportement PG est trouvé, alors des matériaux avec des propriétés physiques améliorées et des températures critiques supraconductrices plus élevées pourraient probablement être réalisées. Notre approche consiste à proposer l'utilisation de la substitution chimique dans les cuprates à haute  $T_c$  en couches et une nouvelle façon de préparation de matériau afin de concevoir de nouveaux composés aux propriétés modifiées et améliorées: nous proposons des matériaux constitués de couches alternées de cuprates dopés aux électrons et aux trous et étudier l'effet de différentes configurations lorsque les positions des atomes des réservoirs de charge sont échangées entre les couches supérieures et inférieures des réservoirs par rapport à la couche de  $\text{CuO}_2$ . L'idée essentielle est de chercher à contrarier l'ordre antiferromagnétique et les corrélations antiferromagnétique dans la phase PG afin de favoriser la supra ou un état métallique novateur.

Ce travail est donc la première tentative dans la recherche de tels matériaux novateurs à haut  $T_c$  où la supraconductivité pourrait être améliorée au détriment de l'antiferromagnétisme et/ou des corrélations AF dans le voisinage immédiat du dopage zéro. Nous venons de finir un travail sur les matériaux purement non dopés et nous planifions de considérer

l'effet du dopage sur ces matériaux comme suite naturelle. Nous avons utilisé la DFT pour étudier l'effet de différentes configurations d'atomes dans les réservoirs de charge au sein de la cellule unité sur les propriétés physiques telles que la conductivité optique, l'ordre AF et la densité d'états (DOS).

## Rappel de l'approche RAFT

La théorie RAFT est basée sur le concept de paramètre d'ordre rotatif [3,4] d'abord appliqué au modèle de Kondo sur réseau unidimensionnel [10]. Ce concept a été généralisé au cas des cuprates à haut  $T_c$  pour lesquels plusieurs propriétés ont été calculées et comparées aux résultats expérimentaux avec un très bon accord [5–9]. Cette théorie a donné des résultats en général compatibles avec les données expérimentales pour les propriétés thermodynamiques [4], Raman [5], la spectroscopie par photoémission à résolution angulaire [6], la conductivité optique [7,11], et la résonance magnétique [12]. Le paramètre d'ordre RAF est une aimantation vectorielle bidimensionnelle avec une amplitude non nulle et une phase dépendante du temps. Cette dépendance temporelle fait de RAF un exemple d'ordre caché formant un état liquide de spin avec un gap présentant des nœuds. RAFT est basé sur l'antiferromagnétisme de spin contrairement aux théories de courants orbitaux [13–15] basées sur des orbites cachées antiferromagnétiques. RAFT fait partie des théories faisant appel à la compétition entre une sorte de magnétisme et la supraconductivité, contrairement aux théories basées sur des paires de Cooper préformées dans la phase PG [16]. Un argument en faveur d'une théorie basée sur l'antiferromagnétisme de spin plutôt que l'antiferromagnétisme orbital est que l'antiferromagnétisme inhabituel observé par Fauqué et Coll. (voie ci-bas) compte les événements de spin flip [17]. Ce dernier ne peut être défini que pour un spin 1/2. Si on suppose la conservation du moment cinétique dans le processus de diffusion de neutron sur un cristal, un spin flip pour le neutron doit être compensé par un spin flip dans l'excitation du système, et cela peut se produire uniquement pour le spin intrinsèque de l'électron ; le courant orbital a un moment cinétique entier (0, 1, etc.). Comme j'ai dit dans la Réf. [12], cet argument éliminera normalement la candidature de toute théorie basée sur les courants orbitaux pour l'explication de la phase PG.

Le paramètre d'ordre tournant ou rotatif de RAF est nommé  $Q = Qe^{i\Phi(t)}$ . Ce paramètre complexe a deux composantes; une amplitude et une phase dépendante du temps. L'amplitude est une aimantation alternée à cause des corrélations AF et la phase  $\Phi(t)$  a été récemment interprétée dans le cadre de la résonance magnétique à  $Q_{\pi\pi} = (\pi, \pi)$ , [12].

L'aimantation rotative alternée  $Q_L$  est liée à l'opérateur  $S_i^+ = C_i^+ C_i$  du spin, et elle peut donc être interprétée comme une mesure des fluctuations quantiques de spin. En effet,  $Q_i = \langle C_i^+ C_i^+ \rangle$  représente la moyenne statistique de ces fluctuations de spin quantiques. RAFT propose qu'en dessous de la température PG,  $T^1$ , ces fluctuations de spin quantiques donnent naissance à l'ordre rotatif caché dont le paramètre d'ordre est  $Q$ . Cet ordre ne brise pas la symétrie par rotation, et de ce fait ne devrait pas se manifester comme un pic élastique dans les expériences de neutrons. Il est intéressant de noter que l'ordre RAF et l'ordre supra sont chacun décrits par un paramètre d'ordre complexe à deux composantes et sont en compétition dans RAFT.

Dans RAFT, les couches de  $\text{CuO}_2$  des cuprates à haut  $T_c$  sont considérées comme des systèmes ouverts capables d'échanger des électrons ou trous avec les réservoirs de charge qui se trouvent entre ces couches. Par conséquent, dans la résolution des équations auto-cohérentes (champ moyen) de cette théorie, le nombre de particules dans les couches de  $\text{CuO}_2$  change en fonction de la température  $T$  alors que le potentiel chimique est indépendant de  $T$ , [18]. Ceci diffère du cas d'un système d'électrons fermé où le nombre de particule ne dépend pas de  $T$  mais le potentiel chimique dépend de  $T$ . Cette hypothèse de RAFT reflète bien l'idée que ce sont les couches de  $\text{CuO}_2$  qui dominent les propriétés physiques des cuprates à haut  $T_c$  [19].

Concernant les propriétés magnétiques des cuprates à haut  $T_c$  dopés aux trous, les données expérimentales collectées indiquent de manière convaincante une interaction très étroite entre la supraconductivité et des formes différentes du magnétisme. Ces formes sont résumées dans la Réf. [12], et je me contente de mentionner l'ordre inhabituel à  $q = 0$  et la résonance magnétique à  $Q_{AF} = (\pi, \pi)$  :

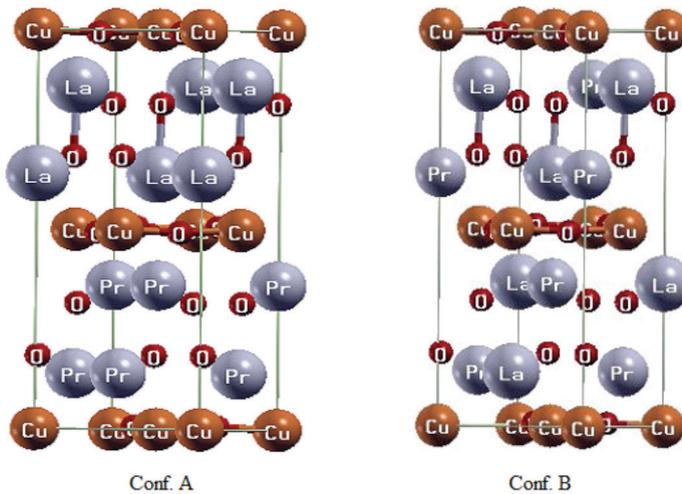
Un ordre antiferromagnétique statique à  $q = 0$  a été découvert par Fauqué et Coll. [17] dans le matériau  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  dans le régime du dopage au trou. Ce type d'ordre a été aussi observé dans le même régime pour le cuprate monocouche  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+d}$  [20]. Cet ordre se développe exactement en dessous de la température  $T^1$  du PG [21] qui dépend du dopage, ce qui indique l'existence d'un lien étroit entre le PG et cet ordre antiferromagnétique inhabituel. L'apparition de cette transition est corroborée par des mesures de l'effet Kerr polaire par Xia et Coll. [22] qui indique la présence d'un magnétisme local. La température sous laquelle cet effet apparait est très comparable à et a la même dépendance en dopage que  $T^1$ .

## Interprétation du module $Q$ du paramètre d'ordre rotatif

Comme déjà mentionné, dans RAFT, la définition du paramètre d'ordre RAF  $Q_i = \langle C_{i\uparrow} C_{i\downarrow}^+ \rangle$  indique que le module de  $Q_i$  peut être interprété comme la probabilité pour qu'un événement spin-flip se produise.  $C_{i\sigma}^+$  ( $C_{i\sigma}$ ) est l'opérateur de création (annihilation) d'un électron avec spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . En effet, l'application de l'opérateur  $C_{i\uparrow} C_{i\downarrow}$  à un état où le site  $i$  est occupé avec un électron avec spin up retourne ce spin à l'état de spin down. Inversement, l'opérateur  $C_{i\downarrow} C_{i\uparrow}^+$ , qui est l'Hermitique conjugué de  $C_{i\uparrow} C_{i\downarrow}$ , fait basculer l'état de spin down vers l'état de spin up. Il est donc clair que le mécanisme physique qui donne naissance à l'ordre RAF est purement quantique. La probabilité pour l'évènement spin-flip peut également être écrite macroscopiquement comme le rapport du nombre d'évènements spin-flip sur le nombre total des évènements de spin-flip et des évènements sans spin-flip dans une expérience adéquate capable de compter de tels évènements. La diffusion neutronique polarisée réalisée dans l'expérience de Fauqué et ses collaborateurs a fait précisément cela [17] en comptant les processus spin-flip. En résumé encore une fois, le module du paramètre d'ordre rotatif mesure donc la probabilité pour qu'un évènement spin flip purement quantique se produise. Macroscopiquement, cet évènement donne naissance à l'ordre antiferromagnétique rotatif car la phase du paramètre d'ordre dépend du temps.

## Interprétation de la phase $\Phi(t)$ du paramètre d'ordre rotatif

En 2015, j'ai utilisé la phase du paramètre d'ordre RAF pour interpréter le pic de résonance observé expérimentalement dans les cuprates à haut  $T_c$  dopés par trous [12]. J'ai montré que la phase de ce paramètre d'ordre peut s'écrire  $\phi(\mathbf{r}) = \omega_{sf}\mathbf{r}$ , où  $\omega_{sf}$  est la fréquence de rotation de  $Q_L$ . L'énergie  $\hbar\omega_{sf}$  a été interprétée comme l'énergie de résonance. Les expériences de neutrons polarisés de Fauqué et Coll. ont mesuré l'amplitude du paramètre d'ordre RAF mais les expériences de résonances de Rossat-Mignod ont plutôt mesuré cette énergie  $\hbar\omega_{sf}$ , donc sa phase [23]. L'ordre RAF est donc responsable de l'apparition d'un pic à une fréquence  $\omega_{sf}$  non nulle. La dépendance en dopage de cette fréquence, calculée dans RAFT, montre une tendance très proche de celle de la dépendance en dopage expérimentale de l'énergie de résonance du spectre d'excitations magnétiques en sablier. Notez que la résonance magnétique, intervenant dans le spectre en sablier (hour-glass), marque les énergies d'excitation magnétique en fonction du transfert du moment  $q$  pour les matériaux dopés aux trous [23]. Contrairement à l'ordre à  $q = 0$ , le spectre du sablier met clairement en évidence l'importance des corrélations antiferromagnétiques usuelles puisque ce spectre est centré autour de  $Q_{AF} = (\pi, \pi)$ , où la résonance a été observée pour la plupart des cuprates dopés aux trous [23,24].



**Figure 2 :** La structure cristalline proposée pour la configuration A de  $\{La\}\{Pr\}CuO_4$  sans mélange de La et Pr dans le réservoir de charge entre et la configuration B pour  $\{La\}\{Pr\}CuO_4$  avec mélange de La et Pr. La structure proposée pour  $\{La\}\{V\}CuO_4$  est obtenue en remplaçant Pr par V dans les deux configurations, [2].

## A la recherche de matériaux supraconducteurs exotiques

Armé de toute cette compréhension, décrite ci-haut, nous avons entamé notre requête de matériaux exotiques avec des états fondamentaux mélangeant de fortes corrélations AF ou de l'ordre AF mélangés à des propriétés métalliques. Nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et optiques de deux matériaux hypothétiques à base de cuprates à haut  $T_c$ , et nous avons soumis un papier afin qu'il soit publié dans la revue *Physical Review B* [2]. Ce manuscrit se trouve sur [arXiv:2008.02360](https://arxiv.org/abs/2008.02360). Nous avons décrit une nouvelle façon de préparer de tels matériaux en déposant une après l'autre des couches du réservoir de charge et des couches de  $\text{CuO}_2$ . Plus précisément, dans ce manuscrit, [2], les deux matériaux hypothétiques sont: (i)  $\{\text{La}\}\{\text{Pr}\}\text{CuO}_4$ , qui se révèle être un isolant de Mott AF dans les deux configurations de mélange ou de non-mélange entre La et Pr dans les réservoirs de charge, et (ii)  $\{\text{La}\}\{\text{V}\}\text{CuO}_4$ , qui se révèle être un métal quantique caractérisé par un ordre AF. La figure 2 montre les cellules unités proposées pour  $\{\text{La}\}\{\text{Pr}\}\text{CuO}_4$  et  $\{\text{La}\}\{\text{V}\}\text{CuO}_4$ . Les accolades dans les formules chimiques indiquent que l'on distingue entre les cas où il y a mélange ou non entre les positions des différents atomes dans les réservoirs de charge.

La figure 3 montre les densités d'état (DOS) pour ces deux matériaux. Pour  $\{\text{La}\}\{\text{Pr}\}\text{CuO}_4$ , un gap d'énergie ou les états électroniques sont inexistantes est observé clairement pour les deux configurations. Ce gap est 1.33 eV pour la configuration A et 1.35 eV pour B. Cependant, la DOS ne présente pas de gap au niveau de Fermi pour les deux configurations du composé  $\{\text{La}\}\{\text{V}\}\text{CuO}_4$ . Ceci fait de ce dernier un métal que l'on a qualifié de quantique car le calcul de l'aimantation magnétique révèle un ordre AF avec une valeur voisinant  $0.6m_B$  pour les deux configurations. Nous avons donc proposé une recette pour transformer un isolant AF de Mott en un métal quantique avec un ordre AF.

Nous avons attribué la différence importante entre les états fondamentaux de ces deux matériaux à la différence significative des rayons des atomes Pr et V. En revanche, nos calculs de DOS partiels ont montré que l'atome qui domine le DOS près du niveau de Fermi est le vanadium V, ce qui signifie que cet atome est responsable pour le caractère métallique du matériau proposé  $\{\text{La}\}\{\text{V}\}\text{CuO}_4$ . Une conséquence intéressante de ce résultat est le fait que la physique à basse énergie pour ce composé ne peut pas être dominé par les couches de  $\text{CuO}_2$  contrairement aux cuprates à haut  $T_c$  ordinaires.

Notre travail préliminaire devrait pouvoir stimuler d'autres études tant expérimentalement que théoriquement. Parmi les problèmes qui peuvent être abordés, il y a l'effet du dopage sur nos matériaux hypothétiques et la possibilité de réaliser de nouveaux états comme la supraconductivité. En outre, le gap d'énergie trouvé dans l'isolant de Mott  $\{\text{La}\}\{\text{Pr}\}\text{CuO}_4$  est plus petit que dans  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , ce qui peut suggérer des applications potentielles dans les systèmes optoélectroniques proches du spectre visible.

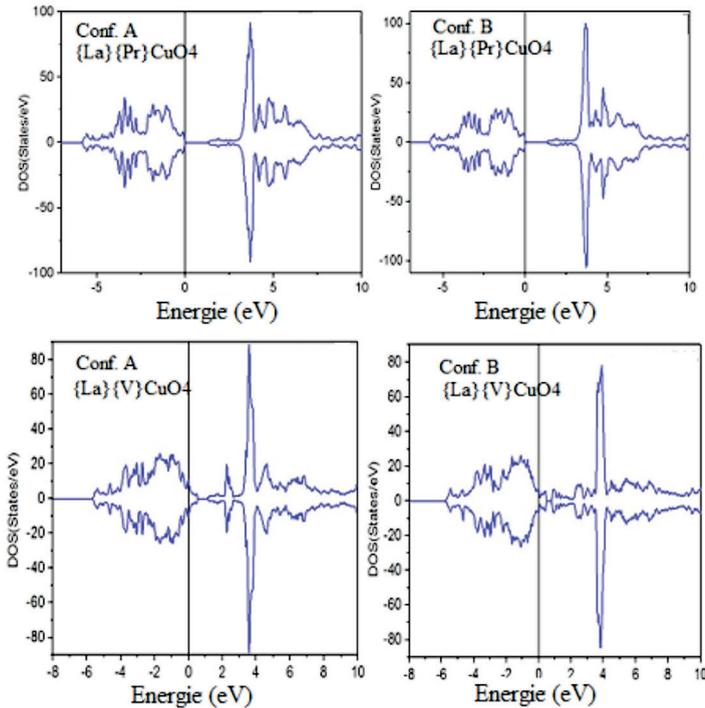


Figure 3 : Le DOS est montré pour les configurations A et B d  $\{La\}\{V\}CuO_4$  et  $\{La\}\{Pr\}CuO_4$ . Le DOS a été calculé dans l'approximation GGA+U, [2]

## Conclusion

Le matériau proposé  $\{La\}\{Pr\}CuO_4$  se révèle être un isolant ordonné antiferromagnétiquement, mais le matériau  $\{La\}\{V\}CuO_4$  présente un comportement métallique coexistant avec l'ordre AF à longue portée. Cet état pourrait constituer un véritable état fondamental et il est donc appelé un métal quantique, contrairement aux états métalliques conventionnels qui ne sont pas stables contre les perturbations conduisant à des états ordonnés non métallique lorsque la température s'approche de 0 K. Finalement, le présent travail est une première étape dans notre requête pour des matériaux exotiques à base de cuprate à haut  $T_c$ . Le lecteur pourrait trouver d'amples détails dans la référence [2].

## Références

- [1] J. G. Bednorz, K. A. Müller *Z. Physik B - Condensed Matter* 64 (1986) 189. and R. Weinstein, I.G. Chen, J. Liu, J. Xu, V. Obot, and C. Foster, *Journal of applied physics*, 73(10) (1993) 6533.
- [2] S. Er-Rahmany, M. Loulidi, A. El Kenz, A. Benyoussef, and M. Azzouz, Soumis à *Phys. Rev. B* (Août 2020), [arXiv:2008.02360](https://arxiv.org/abs/2008.02360) [cond-mat.str-el].
- [3] M. Azzouz, *Phys. Rev. B* 67 (2003) 134510.
- [4] M. Azzouz, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 174523.

- [5] M. Azzouz, K.C. Hewitt, H. Saadaoui, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 174502.
- [6] M. Azzouz, B.W. Ramakko, G. Prezzena-Pitman, *J. Phys.: Condens. Matter* 22 (2010) 345605.
- [7] E.H. Bhuiyan, G. Prezzena-Pitman, M. Azzouz, *Physica C: Superconductivity and its Applications* 473 (2012) 61.
- [8] M. Azzouz, *Physica: Superconductivity and its Applications C* 480 (2012) 34.
- [9] M. Azzouz, *Symmetry* 5 (2013) 215
- [10] M. Azzouz, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 710
- [11] H. Saadaoui, M. Azzouz, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 184518.
- [12] M. Azzouz, *Physica C: Superconductivity and its Applications* 508 (2015) 36.
- [13] C.M. Varma, *Phys. Rev. B* 55 (1997) 14554.
- [14] C.M. Varma, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 155113.
- [15] S. Chakravarty, R.B. Laughlin, D.K. Morr, C. Nayak, *Phys. Rev. B* 63 (2001) 094503.
- [16] V.J. Emery, S.A. Kivelson, *Nature* 374 (1995) 434.
- [17] B. Fauqué, Y. Sidis, V. Hinkov, S. Pailhès, C.T. Lin, X. Chaud, P. Bourges, *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006) 197001.
- [18] M. Azzouz, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 052501.
- [19] P. W. Anderson, *Science* 235 (1987) 1196.
- [20] Y. Li, V. Baledent, N. Barisic, Y. Cho, B. Fauqué, Y. Sidis, G. Yu, X. Zhao, P. Bourges, M. Greven, *Nature* 455 (2008) 375.
- [21] T. Timusk, B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* 62 (1999) 61.
- [22] J. Xia et al., *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 127002.
- [23] J. Rossat-Mignod, L.P. Regnault, C. Vettier, P. Bourges, P. Burlet, J. Bossy, J.Y. Henry, G. Lapertot, *Physica C* 185–189 (1991) 86.
- [24] Masaki Fujita, Haruhiro Hiraka, Masaaki Matsuda, Masato Matsuura, John M. Tranquada, Shuichi Wakimoto, Guangyong Xu, Kazuyoshi Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* 81 (2012) 011007.





