

Titre de la thèse :

Étude théorique des marches quantiques dissipatives sur des réseaux moléculaires complexes.

Résumé :

Ce travail de thèse porte sur l'étude théorique et numérique de la marche quantique d'excitons sur des graphes moléculaires de topologie complexe. Le contexte de cette étude s'inscrit dans deux univers très voisins : celui de la communication quantique d'information (informatique quantique), et celui du transport d'énergie à l'échelle nanométrique (Biologie quantique, développement d'énergie durable ...).

En premier lieu, nous nous intéressons au transfert d'information quantique réalisé par un exciton en présence d'un environnement perturbateur de phonons locaux. Dans ce contexte, nous introduisons une approche théorique dépassant les méthodes usuelles de traitement du système exciton-phonon sur des réseaux moléculaires de petite taille. Nous montrons notamment que cette approche permet de caractériser avec précision le phénomène de décohérence quantique engendré par l'environnement phononique. Dans ce contexte, nous démontrons aussi que cette théorie permet de prédire l'existence de comportements non-markoviens exotiques (réurrences quantiques de l'information, décohérence incomplète...). Pour prouver l'efficacité de nos développements, nous comparons finalement la théorie avec une méthode numérique permettant de traiter le système exciton-phonon de manière exacte.

Dans un second temps, nous étudions comment la présence d'un piège local absorbant sur un graphe peut permettre de réaliser un processus de super-absorption excitonique (On parle alors de "transition de super-radiance"). Le but de cette étude est d'observer dans quelle mesure la force du processus de piégeage peut permettre d'optimiser l'absorption d'un exciton lors de sa marche quantique sur un graphe moléculaire en forme d'étoile étendue. Dans ce contexte, nous démontrons notamment que la symétrie du graphe peut posséder une influence importante quant à l'apparition du phénomène de super-absorption.