

THÈSE

pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Louis Pasteur (Strasbourg I)

(Spécialité: Physique de la Matière Condensée)

par

Elise Gambetti-Césaire

Effet des corrélations électroniques et du spin sur les courants permanents dans des anneaux unidimensionnels désordonnés.

Composition du jury

PRÉSIDENT :	M. Jean Richert
RAPPORTEURS :	M. Gert-Ludwig Ingold M. Jean-Louis Pichard
DIRECTEUR DE THÈSE :	M. Rodolfo Jalabert
CODIRECTEUR DE THÈSE :	M. Dietmar Weinmann

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg



Remerciements

Le travail de thèse que j'ai effectué s'est déroulé au sein de l'IPCMS, Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg, dans le laboratoire du Groupe d'Etudes des Matériaux Métalliques (GEMM).

Je tiens à remercier mes directeur et codirecteur de thèse, Monsieur **Rodolfo Jalabert** et Monsieur **Dietmar Weinmann**, professeur et chargé de recherche au GEMM, de m'avoir pris en thèse et dans l'équipe mésoscopique composée actuellement de Guillaume, Gabriel et Pablo.

Je remercie sincèrement mes rapporteurs externes, Monsieur **Gert Ingold** et Monsieur **Pichard** d'avoir accepté de relire mon manuscrit et de faire partie de mon jury.

Je remercie tout particulièrement Monsieur **Jean Richert** d'avoir accepté de relire mon manuscrit et d'avoir accepté d'être à la fois rapporteur interne et Président du Jury.

Je remercie M.Drillon et M. Pierre Rabu de m'avoir prodigué leur aide et leurs conseils à propos d'un problème que je traitais.

Merci à Catherine (pour les livres, les prêts, les articles, les cafés, les gâteaux, le soutien ...). Sans oublier Dominique (homme à tout faire et indispensable) et Mme Reindhardt. Merci à Fabrice Maingot, informaticien à l'IPCMS, et Philipp Brune, qui m'ont donné la version initiale du programme, à ceux du CINES (notamment Eric Boyer qui m'a aidée à automatiser le lancement du programme sur les machines du CINES). Un grand remerciement à Romaric (administrateur de Seven) qui m'a aidée à paralléliser le programme.

Merci aux thésards du GEMM et de l'IPCMS Julien, Adrian et Romaric, Madjid, Hadj et Nadjib, Ahmed, Mircea. Merci à Sébastien qui a partagé mon bureau pendant trois ans.

Je remercie également tous ceux qui m'ont entourée lors de cette épreuve : je les remercierai de vive voix.

RESUME

On étudie l'influence du désordre et de l'interaction sur les courants permanents dans des anneaux unidimensionnels d'électrons fortement corrélés modélisés par l'hamiltonien de Hubbard-Anderson. L'outil numérique DMRG est utilisé afin de calculer les énergies des états fondamentaux à N corps pour des conditions de bord périodique et antipériodique, ce qui permet d'obtenir la raideur de charge qui est une mesure du courant permanent.

Pour des désordres non nuls, on trouve une augmentation des courants permanents quel que soit le remplissage pour des valeurs modérées de l'interaction pour un nombre pair d'électrons. Ce comportement est qualitativement différent de celui obtenu pour des fermions sans spin, ce qui confirme l'influence du spin dans la hausse des courants permanents.

L'étude de la longueur de localisation à demi-remplissage permet de confirmer cet effet délocalisant et de l'extrapoler vers des systèmes plus grands.

Dans la limite des interactions fortes, la raideur de charge décroît lorsque l'interaction augmente. On trouve deux lois de décroissance différentes avec l'interaction si on est à demi-remplissage ou en dehors.

A demi-remplissage seulement, pour de fortes interactions, le désordre fait augmenter le courant permanent. Ce phénomène inattendu est confirmé par le comportement de la longueur de localisation et persiste pour des systèmes plus grands.

Dans un calcul analytique, le terme cinétique de l'hamiltonien est traité en perturbation afin de calculer les corrections à l'énergie et la sensibilité de phase.

On retrouve les lois de décroissance dans la limite des fortes interactions.

Un développement limité par rapport au désordre est effectué et permet de trouver une dépendance de la sensibilité de phase avec le désordre. A demi-remplissage, ceci confirme que le désordre fait augmenter les courants permanents.

ABSTRACT

We study the combined effect of disorder and interaction on the persistent current in one-dimensional rings with strongly correlated electrons within the Hubbard-Anderson hamiltonian. The DMRG algorithm is used to compute the many-body ground-state energies for periodic and antiperiodic boundary conditions in order to obtain the stiffness which is a measure for the persistent current.

For moderate values of the interaction, we find an increase of the stiffness when the disorder is non zero whatever the filling is for an even number of electrons. This is qualitatively different from the behaviour of spinless fermions, confirming the spin effect in the increase of the persistent current.

A study of the localization length at half-filling confirms the existence of this increase and allows to extrapolate towards bigger systems.

In the strong interaction limit, the stiffness decreases while the interaction increases. Two different power laws are found characterizing this decrease at and away from half-filling. Only at half-filling, the disorder increases the persistent current at strong interaction. The effect is consistent with the behavior of the localization length.

An analytical approach is developed in the strong interaction limit to confirm the features found numerically.

The kinetic energy term is treated as a perturbation and leads to corrections to the many-body ground-state energies and the phase sensitivity. An expansion in the disorder strength permits to deduce the disorder dependance of the phase sensitivity.

At half-filling, this confirms that persistent currents are enhanced by the disorder.

Table des matières

Liste des figures	vi
Liste des tables	xiv
Introduction	1
1 Des systèmes mésoscopiques et de leurs propriétés : quelques généralités	6
1.1 Les différents régimes de transport	7
1.1.1 Quelques longueurs caractéristiques	7
1.1.2 Les divers régimes de transports	9
1.2 Modèle de Drude	11
1.2.1 Effet Shubnikov-De Haas	13
1.2.2 Effet Hall quantique ou les modes transverses	14
1.3 Transport dans les systèmes mésoscopiques	16
1.3.1 De la conductance	17
1.3.2 Généralisation à plusieurs contacts	19
1.3.3 Fluctuations universelles de la conductance	20
1.4 Phénomènes d'interférences	23
1.4.1 La phase de Berry	23
1.4.2 Phase de Berry et effet Aharonov-Bohm	24
1.4.3 Localisation faible	28
1.5 Conclusion	31
2 Les courants permanents	32
2.1 Courant permanent : une définition théorique	32
2.1.1 Expression du courant permanent	37
2.1.2 Le poids de Drude	38
2.1.3 Ecriture du poids de Drude	40
2.2 De l'aspect expérimental des courants permanents	41

2.2.1	Fabrication des anneaux	42
2.2.2	Mesure des courants sur un grand nombre d'anneaux	44
2.2.3	Mesure des courants dans un seul anneau	45
2.3	Modélisation du système	46
2.4	Conclusion	48
3	Modèles de Hubbard et d'Anderson	49
3.1	Modèle de Hubbard	52
3.1.1	Quelques cas limites du modèle de Hubbard	53
3.1.2	Les symétries de l'hamiltonien de Hubbard	58
3.1.3	Le modèle de Hubbard en une dimension	61
3.2	Modèle d'Anderson	62
3.3	La localisation d'Anderson	64
3.3.1	La théorie d'échelle	65
3.3.2	La localisation en une dimension	66
3.3.3	La transition d'Anderson-Mott en une dimension	67
3.4	Conclusion	68
4	La méthode numérique DMRG	69
4.1	La méthode DMRG	70
4.1.1	Introduction à la méthode	70
4.1.2	Principe de la méthode	72
4.1.3	Algorithme pour des systèmes infinis	74
4.1.4	Algorithme pour des systèmes finis	76
4.2	DMRG pour le modèle de Hubbard-Anderson	79
4.3	Vérification de quelques limites	86
4.3.1	Les électrons libres	86
4.3.2	Systèmes désordonnés à interaction nulle	89
4.3.3	Le cas sans désordre	90
4.3.4	La symétrie particule-trou	91
4.3.5	Comparaison de résultats entre diagonalisation exacte et calcul par DMRG	92
4.4	Conclusion	93
5	Une étude numérique des courants permanents : influence du désordre et des interactions	94
5.1	Hors demi-remplissage	95
5.1.1	Comportement des échantillons	98

5.1.2	Comportement des moyennes	99
5.2	Le cas du demi-remplissage	105
5.2.1	Comportement des échantillons	111
5.2.2	Comportement des moyennes	113
5.3	Comparaison	117
5.4	Conclusion	127
6	Effet combiné des interactions et du désordre sur le comportement de la longueur de localisation	128
6.1	Longueur de localisation à désordre nul	130
6.2	Longueur de localisation pour différents désordres	134
6.3	Interprétation	139
6.4	Conclusion	141
7	Courant permanent dans la limite des interactions fortes	143
7.1	Cas d'un anneau de Hubbard-Anderson dans la limite des interactions fortes	144
7.2	Demi-remplissage	147
7.2.1	Analogie avec le modèle de Heisenberg : modèle de Hubbard à demi-remplissage	147
7.2.2	Calcul de la sensibilité de phase à demi-remplissage dans la limite des fortes interactions	149
7.2.3	Etude des poids de l'état fondamental	157
7.3	Le hors demi-remplissage	159
7.3.1	Obtention des états de fondamentaux	161
7.3.2	Calcul de la sensibilité de phase	164
7.4	Conclusion	168
	Conclusion	170
	A Deux électrons sur trois sites	172
	Bibliographie	178

Table des figures

1.1	<i>Longueurs caractéristiques et régimes de transport correspondants. On se place dans le cas de transport cohérent, à basse température, lorsque le désordre est faible. D'après [12, 11].</i>	11
1.2	<i>Schéma de l'expérience de Hall [15]. On applique un champ magnétique \mathbf{B} perpendiculairement au courant dans l'échantillon et une tension apparaît dans la troisième direction. Cette tension peut ensuite être reliée aux propriétés du système.</i>	14
1.3	<i>Effet Hall quantique dans un échantillon de GaAs-GaAlAs à 30 mK [15]. La résistance de Hall ρ_{xy} (ordonnées de droite) et la composante diagonale de la résistivité ρ_{xx} (ordonnées de gauche) sont tracées en fonction du champ magnétique B (en abscisse). ρ_{xx} présente une valeur nulle là où les plateaux de ρ_{xy} apparaissent. . .</i>	16
1.4	<i>Schéma énergétique de la configuration considérée. μ_1 et μ_2 sont les potentiels chimiques des réservoirs de gauche et de droite respectivement, μ_A et μ_B sont ceux des conducteurs cohérents de chaque côté de la barrière respectivement [9].</i>	17
1.5	<i>Schéma d'un anneau unidimensionnel. On intègre le terme supplémentaire dû à la phase de Berry le long de l'anneau.</i>	25
1.6	<i>Interférences entre deux trajectoires électroniques dans l'anneau (points A, B, C et D).</i>	27
1.7	<i>Représentation de chemins allers-retours de r pouvant mener à des corrections dans la conductance en raison d'interférences quantiques. D'après [38].</i>	29
2.1	<i>Niveaux d'énergie de l'anneau unidimensionnel avec et sans désordre [32]. Les traits pleins représentent les niveaux d'énergie sans désordre.</i>	35
2.2	<i>Anneau d'or de diamètre $1\mu\text{m}$, d'épaisseur 18nm et de largeur 90nm [38].</i>	41

2.3	<i>D'après [9]. Allure de la bande de conduction et de valence à l'interface entre AlGaAs et GaAs avant puis après que le transfert de charge ait eu lieu.</i>	43
3.1	<i>Schéma d'un anneau unidimensionnel traversé par un flux ϕ perpendiculaire à la surface de l'anneau. Les cercles vides symbolisent les sites sur lesquels les électrons viendront se placer.</i>	51
3.2	<i>Représentation schématique du remplissage des $N/2$ niveaux d'énergie les plus bas du système avec N électrons sans interaction. D'après [84].</i>	54
3.3	<i>Exemple d'arrangement de quatre électrons sur trois sites dans la limite atomique.</i>	55
3.4	<i>Exemple de sauts entre deux sites pour des électrons de spin opposé menant à des corrections de deuxième ordre en t.</i>	57
3.5	<i>Représentation schématique de la fonction β par la théorie d'échelle en une, deux et trois dimensions [96].</i>	66
4.1	<i>Représentation des éléments de base de la méthode DMRG. La ligne en pointillé entourant le bloc et le site constitue le bloc élargi. Un autre bloc élargi va venir se connecter au site afin de former les superblocs [88].</i>	73
4.2	<i>Le superbloc est la connection de deux blocs élargis. Les sites représentés au milieu sont les sites rajoutés à chaque bloc respectif pour former chaque bloc élargi [88]. Une fois ces blocs élargis connectés entre eux, on obtient le superbloc.</i>	74
4.3	<i>Deux étapes dans l'algorithme DMRG des systèmes infinis [88]. L'étape a montre la formation du superbloc, constitué de deux blocs élargis de taille $l + 1$ (b). Les étapes c et d correspondent à la formation du superbloc constitué de deux blocs élargis de taille $l + 2$.</i>	76
4.4	<i>Deux étapes dans la méthode DMRG des systèmes finis [88]. L'étape a consiste à former un superbloc à partir d'un bloc élargi de taille $l + 1$ à gauche et un de taille $L - l - 2$ comme l'indique l'étape b. Les étapes c et d correspondent aux étapes qui permettent d'agrandir le bloc de gauche. La taille du bloc de gauche est alors de $l + 2$ et celle de droite est de $L - l - 3$.</i>	78
4.5	<i>Tous les états possibles d'un site.</i>	80

4.6	<i>Un site et un demi-site qui contient un électron. Différentes possibilités de placer un électron sur un site et demi. Les sites impairs sont réservés aux spins up et les pairs aux spins down.</i>	82
4.7	<i>Un site et un demi-site qui contient deux électrons. Différentes possibilités de placer deux électrons sur un site et demi. On considère à nouveau les sites pairs (spins down) et sites impairs (spins down).</i>	83
4.8	<i>Un site et un demi-site qui contient trois électrons. Seule une possibilité de placer trois électrons sur un site et demi existe.</i>	84
4.9	<i>Comportement de la quantité δ en fonction de la taille M du système. δ représente la différence entre le résultat donné par le programme DMRG utilisé et la calcul analytique.</i>	88
4.10	<i>Comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour différents systèmes à demi-remplissage et à désordre nul.</i>	90
4.11	<i>Comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour différents systèmes hors demi-remplissage à désordre nul.</i>	91
4.12	<i>Comparaison du comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour deux systèmes: $M = 10$ et $N = 8$ et $M = 10$ et $N = 12$. Ceux-ci présentent un comportement identique en raison de la symétrie particule-trou.</i>	92
5.1	<i>Comportement de la moyenne et d'un échantillon de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = 9$ et $N = 8$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes obtenues à partir d'une centaine d'échantillons. L'erreur statistique est plus petite que la taille des symboles.</i>	96
5.2	<i>Comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = 10$ et $N = 8$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes obtenues sur une centaine d'échantillons. Les erreurs statistiques représentées par des barres d'erreur au sein des symboles.</i>	97
5.3	<i>Probabilité de distribution de $\log D$ pour $U = 5$ et $W = 5$ pour le système $M = 10$ et $N = 8$. La ligne en pointillé représente la gaussienne fittée à partir des données numériques.</i>	100
5.4	<i>Probabilité de distribution de $\log D$ pour $U = 1$ et $W = 2$ pour le système $M = 9$ et $N = 8$. La ligne en pointillé représente la gaussienne fittée à partir des données numériques.</i>	101

5.5	<i>Variance de log D avec l'interaction U pour M = 10 et N = 8 et pour différents désordres W. Dans la limite des interactions fortes, celle-ci réaugmente lorsque le désordre W augmente.</i>	102
5.6	<i>Variance de log D avec l'interaction U pour M = 9 et N = 8 et pour différents désordres W. Dans la limite des interactions fortes, celle-ci réaugmente lorsque le désordre W augmente.</i>	103
5.7	<i>Comportement de D pour de très fortes interactions pour M = 9 et N = 8. La loi de décroissance de la raideur de charge dans la limite des fortes interactions est en 1/U.</i>	106
5.8	<i>Comportement de la moyenne D en fonction de U pour M = 10 et N = 8. La loi est en 1/U.</i>	107
5.9	<i>Comportement de la moyenne et d'un échantillon de log D en fonction de l'interaction U pour M = N = 6 pour diverses valeurs de désordres W = 0, 2, 5, 9. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes.</i>	108
5.10	<i>Comportement de la moyenne et d'un échantillon de log D en fonction de l'interaction U pour M = N = 10 pour diverses valeurs de désordres W = 0, 2, 5, 9. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes.</i>	109
5.11	<i>Comportement de la moyenne et d'un échantillon quelconque de log D en fonction de l'interaction U pour M = N = 14 pour diverses valeurs de désordres W = 0, 2, 5, 9. Les moyennes sont représentées par des symboles et l'échantillon par les lignes.</i>	110
5.12	<i>Comportement de log D pour un échantillon en fonction de l'interaction U pour M = N = 20 pour des valeurs du désordre W = 0, 2, 5, 9. Seul un échantillon a été représenté (lignes).</i>	111
5.13	<i>Données de log D en fonction de log U pour un échantillon M = N = 20. On montre le comportement en $1/U^{M-1} = 1/U^{19}$ pour un échantillon donné.</i>	113
5.14	<i>Probabilité de distribution P de log D calculée sur 100 échantillons pour M = N = 14 à U = 9 et W = 5. Les barres représentent la distribution de log D obtenue numériquement, et la ligne en pointillé la gaussienne fittée à partir des données numériques.</i>	114
5.15	<i>Variance de log D avec l'interaction U pour M = N = 14 et M = N = 10. Dans la limite des interactions fortes, la variance diminue lorsque l'interaction augmente.</i>	116

5.16	<i>Données de $\log D$ en fonction de $\log U$ pour un échantillon et la moyenne pour $M = N = 10$. On montre le comportement en $1/U^{M-1} = 1/U^9$. Les lignes montrent le comportement d'un échantillon individuel et les symboles sont représentatifs des moyennes.</i>	118
5.17	<i>Données de $\log D$ en fonction de $\log U$ pour la moyenne pour $M = N = 14$. On montre le comportement en $1/U^{M-1} = 1/U^{13}$. Les symboles sont représentatifs des moyennes.</i>	119
5.18	<i>Comportement de $\log D$ pour un échantillon composé de $M = 9$ sites et contenant $N = 8$ électrons pour des interactions négatives U.</i>	121
5.19	<i>Comportement de la raideur de charge D en fonction de l'interaction U pour un échantillon $M = N = 10$ pour différents désordres.</i>	123
5.20	<i>Comportement de $\log D$ en fonction de U pour $M = 10$ et différents remplissages $N = 4, 6, 8, 10$. La loi de décroissance dans la limite des fortes interactions est en $1/U$ dans le cas du hors demi-remplissage et en $1/U^{M-1}$ pour le demi-remplissage.</i>	124
5.21	<i>Comportement de $\log D$ pour un échantillon individuel dans le cas d'électrons ($M = N = 10$) et de $\log(2D)$ ($M = 10$ et $N = 5$) dans le cas de fermions sans spin pour des valeurs de l'interaction $[0, 10]$ et des valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les symboles représentent les valeurs de $\log D$ avec spin et les lignes celles des fermions sans spin.</i>	125
5.22	<i>Comportement de $\log D$ pour un échantillon individuel dans le cas d'électrons ($M = 10$ et $N = 8$) et de $\log(2D)$ ($M = 10$ et $N = 4$) dans le cas de fermions sans spin pour des valeurs de l'interaction $[0, 10]$ et des valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les symboles représentent les valeurs de $\log D$ avec spin et les lignes celles des fermions sans spin.</i>	126
6.1	<i>Comportement de la raideur de charge $\log D$ en fonction de la taille du système M pour $U = 5$ et $U = 8$.</i>	131
6.2	<i>Longueur de localisation ξ à désordre nul $W = 0$ pour le cas d'un nombre pair de sites ($M = 6, 10, 14$). Les symboles représentent les valeurs de ξ obtenues à partir des données numériques de $\log D$. Les lignes joignent ces points.</i>	132
6.3	<i>Comportement de la longueur de localisation $\xi\Delta$ en fonction de l'interaction U/t, avec $t = 1$ pour des interactions modérées, $3 < U < 8$. Δ est la gap de charge de Lieb-Wu.</i>	132

6.4	<i>Comportement de l'inverse de la longueur de localisation ξ^{-1} en fonction du logarithme de l'interaction $\ln(U/t)$, avec $t = 1$, pour de fortes interactions lorsque $U > 10$ dans le cas d'un nombre de sites pair. Les symboles représentent les valeurs de ξ^{-1} obtenues à partir des données numériques de $\log D$. La ligne en pointillé est la solution analytique $\xi^{-1} = -1.48 + \ln(U/t)$, donnée par l'Ansatz de Bethe.</i>	133
6.5	<i>Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $W = 2$ et $U = 1$. Les symboles représentent les moyennes effectuées sur une centaine d'échantillons. La ligne en pointillé montre la droite fittée à partir de ces résultats.</i>	135
6.6	<i>Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $W = 9$ et $U = 5$. Les symboles représentent les moyennes effectuées sur une centaine d'échantillons. La ligne en pointillé montre la droite fittée à partir de ces résultats.</i>	135
6.7	<i>Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $U = 10$ pour $W = 2$. Les symboles représentent les moyennes obtenues à partir d'une centaine d'échantillons. Les lignes sont les droites joignant les points entre eux.</i>	136
6.8	<i>Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $U = 10$ pour $W = 9$. Les symboles représentent les moyennes obtenues à partir d'une centaine d'échantillons. Les lignes sont les droites joignant les points entre eux.</i>	137
6.9	<i>Longueur de localisation ξ en fonction de l'interaction U obtenue à partir d'un nombre de sites pair.</i>	138
7.1	<i>exemple de séquences de sauts d'ordre $n = M = 6$ contribuant à la sensibilité de phase et connectant un même état β à lui-même pour le cas particulier de spins alternés.</i>	152
7.2	<i>exemple de séquences de sauts d'ordre $n = M = 6$ contribuant à la sensibilité de phase et connectant une des deux configurations de spins alternées β à l'autre β'.</i>	153
7.3	<i>Dépendance de ΔE en fonction du désordre d'un échantillon individuel $M = N = 10$. Les données données par les symboles sont comparées aux résultats donnés par la théorie en perturbation (lignes).</i>	156
7.4	<i>Comportement des poids des états de base dans l'état fondamental en fonction de la taille $M = N$ du système.</i>	158

7.5	<i>Comportement du logarithme des poids des états de base dans l'état fondamental en fonction de la taille M du système lorsque l'on est à demi-remplissage $M = N$.</i>	159
7.6	<i>Exemple d'un seul saut permettant de passer d'un état β quelconque à un autre β'.</i>	162
A.1	<i>Etats de base et amplitudes de transition dans le cas de deux électrons de spins différents sur trois sites.</i>	174

Liste des tableaux

4.1	<i>Données du programme à $U = W = 0$ au demi-remplissage.</i>	87
4.2	<i>Données du programme à $U = W = 0$ hors demi-remplissage.</i>	88
4.3	<i>Données du programme à $U = 0$ hors demi-remplissage.</i>	89
4.4	<i>Données du programme à $U = 0$ au demi-remplissage.</i>	89
5.1	<i>Facteurs d'augmentation de deux échantillons $M = 9, N = 8$ et $M = 10$ et $N = 8$ pour $W = 2$.</i>	98
5.2	<i>Facteurs d'augmentation de deux échantillons $M = 9, N = 8$ et $M = 10$ et $N = 8$ pour $W = 5$.</i>	99
5.3	<i>Facteurs d'augmentation de deux échantillons $M = 9, N = 8$ et $M = 10$ et $N = 8$ pour $W = 9$.</i>	99
5.4	<i>Facteur d'augmentation de moyennes à $W = 2$.</i>	104
5.5	<i>Facteur d'augmentation de moyennes à $W = 5$.</i>	104
5.6	<i>Facteur d'augmentation de moyennes à $W = 9$.</i>	105
5.7	<i>Facteurs d'augmentation pour des échantillons à $W = 2$.</i>	112
5.8	<i>Facteurs d'augmentation pour des échantillons à $W = 5$.</i>	112
5.9	<i>Facteurs d'augmentation pour des échantillons à $W = 9$.</i>	112
5.10	<i>Facteurs d'augmentations des moyennes pour $W = 2$.</i>	115
5.11	<i>Facteurs d'augmentations des moyennes pour $W = 5$.</i>	115
5.12	<i>Facteurs d'augmentations des moyennes pour $W = 9$.</i>	117
6.1	<i>Facteurs d'augmentation de la longueur de localisation.</i>	139
7.1	<i>Exemple de répartition des électrons \uparrow ou \downarrow (fonctions i_k) correspondant à un état de base de l'hamiltonien de Hubbard (voir texte).</i>	145

Introduction

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre de la physique de la matière condensée, plus spécifiquement dans le domaine de la physique mésoscopique. Il s'agit d'une physique se situant à la frontière de la physique classique et de la physique microscopique puisque les systèmes étudiés contiennent beaucoup d'atomes mais conservent des propriétés de cohérence de phase. En effet, ces systèmes ont la particularité d'être d'une dimension L inférieure à la longueur de cohérence de phase l_ϕ au-delà de laquelle la phase de la fonction d'onde de l'électron est détruite. Ainsi, l'électron, lorsqu'il se déplace dans ces systèmes, conserve sa cohérence de phase, propriété de la mécanique quantique. Cette propriété aura besoin d'être comprise puisque les dimensions des circuits va en diminuant et que ce phénomène de cohérence de phase sera rencontré en électronique. Le domaine de la physique mésoscopique est donc très porteur et permettra de nombreuses avancées sur le plan tant théorique qu'expérimental.

Dans ce travail, on s'est intéressé à des anneaux mésoscopiques qui présentent la particularité d'être parcourus par un courant, nommé courant permanent, lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique. Ceux-ci avaient été prédits par Büttiker et al. [1] et furent mesurés par la suite sur des anneaux isolés [2] ainsi que sur des ensembles d'anneaux [3]. De nombreux travaux ont été effectués afin d'expliquer ce phénomène, sans parvenir à une description satisfaisante. En effet, les travaux analytiques ne permettaient pas d'expliquer l'ordre de grandeur du courant mesuré, qui est beaucoup plus grand que les prédictions théoriques pour des électrons sans interaction dans des anneaux désordonnés et il fut proposé d'inclure les interactions dans la description du courant. Malgré de nombreuses tentatives, les travaux théoriques ne permettent toujours pas de rendre compte quantitativement de ces courants. De plus, ne considérer que les interactions ne mène pas à une compréhension des valeurs expérimentales; bien au contraire, l'ajout des interactions ne mène qu'à une

diminution des courants permanents dans des anneaux propres tout comme la considération du désordre seul. De nombreuses études ont permis de constater que seule la considération de désordre **et** d'interaction permettront de décrire une augmentation des courants permanents due aux interactions. Depuis, ces études ont permis de montrer que ces deux paramètres sont essentiels dans la compréhension du phénomène de courants permanents [4, 5].

Ce travail se propose d'inclure un facteur négligé dans beaucoup de descriptions numériques, le spin. Pour ce faire, nous utilisons un modèle unidimensionnel sur réseau, où l'anneau est représenté par une chaîne de sites, et décrivons celui-ci à l'aide de l'hamiltonien d'Hubbard-Anderson. Cet anneau est soumis à un champ magnétique perpendiculaire au plan de l'anneau et donc à l'influence d'un flux ϕ caractérisé par des conditions de bord entre le dernier et le premier site de l'anneau. Ainsi, on calcule deux énergies, une à flux nul, l'énergie périodique $E(0)$, et l'autre $E(\pi)$ telle que $\Phi = \frac{2\pi\phi}{\phi_0} = \pi$ (où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux), dite énergie antipériodique. Le problème le plus important est de considérer à la fois le désordre et les interactions sur un même plan mais ceci est délicat car dans ce cas, le problème n'est pas intégrable analytiquement et nécessite de recourir à l'instrument numérique. C'est le choix opéré dans cette thèse. Le programme utilisé est basé sur la méthode DMRG (Density Matrix Renormalization Group) et permet de traiter des systèmes tels que les anneaux ou les chaînes.

Après avoir testé et ajusté le programme, la sensibilité de phase $\Delta E = E(0) - E(\pi)$ pouvait alors être calculée à partir des énergies des états fondamentaux à multi-particules lorsque le système est traversé par un flux nul ou un flux tel que $\Phi = \pi$.

La raideur de charge $D = \frac{M}{2}\Delta E$, où M est le nombre de sites de l'anneau, peut donc être évaluée afin de permettre de connaître le comportement des courants permanents à température nulle et peut également être reliée à la conductivité à fréquence nulle [6].

Plan du mémoire:

Le premier chapitre présente une brève revue de certains phénomènes illustrant la physique mésoscopique. On rappellera entre autre, les divers régimes de transport au sein de la physique mésoscopique et on abordera le transport dans les systèmes mésoscopiques ainsi que les différents phénomènes d'interférences tels la localisation faible ou l'effet Aharonov-Bohm.

Le second chapitre est consacré aux courants permanents. On abordera le plan théorique tout comme l'aspect expérimental. On introduira également

le problème de la description de ces courants permanents et comment celle-ci a été abordée dans ce travail.

Le troisième chapitre sera dévolu à une introduction sur les modèles de Hubbard et d'Anderson, ainsi qu'un rappel sur la théorie de la localisation. Ceci permet de conclure que ni les interactions ni le désordre ne peuvent prétendre à délocaliser les systèmes unidimensionnels étudiés: seule une compétition entre ces deux effets physiques pourra ainsi mener éventuellement à une délocalisation. Cela permet de justifier le choix de l'hamiltonien de Hubbard-Anderson afin de décrire les anneaux mésoscopiques prenant en compte les interactions électroniques et les défauts dus aux impuretés.

Le quatrième chapitre abordera l'outil numérique utilisé. On y explique comment on a choisi l'algorithme DMRG et comment le programme a dû inclure un nouveau paramètre qu'est le spin. Des vérifications dans le but de valider le programme et de montrer que celui-ci permet d'obtenir les limites connues sont faites et permettent de prétendre à son bon fonctionnement.

Le cinquième chapitre concerne l'étude numérique de la raideur de charge, donc des courants permanents, lorsque, pour divers désordres, on rajoute les interactions. A désordre nul (sans désordre), le courant permanent décroît lorsque l'on augmente les interactions. En revanche, on constate une augmentation de la raideur de charge et du courant permanent, comparée aux valeurs de la limite d'Anderson à interaction nulle, dès que l'on introduit un très faible désordre pour des valeurs modérées de l'interaction (tandis que pour des fermions sans spin, une augmentation du courant permanent est obtenue pour de faibles désordres [7]). Cette augmentation de la raideur de charge par rapport à sa valeur sans interaction pour une force d'interaction modérée constitue le premier phénomène remarquable de notre travail et ce comportement existe quel que soit le nombre de sites et le remplissage. Cependant, le facteur d'augmentation dépend du désordre de telle sorte que le courant permanent peut se trouver augmenté de plusieurs fois sa valeur sans interaction. Ce fait pourrait être le précurseur de la très forte augmentation du courant permanent trouvée lors des expériences.

Le second point fort de cette étude numérique réside dans la limite des fortes interactions. On peut scinder l'étude en deux parties: les systèmes à demi-remplissage et ceux hors demi-remplissage.

Considérons tout d'abord les systèmes à demi-remplissage. Dans la limite de très fortes interactions, on trouve un courant permanent qui diminue en $1/U^{M-1}$ où U est la force de l'interaction et M le nombre de sites, et correspond à la limite connue de l'isolant de Mott. On constate également que,

contrairement à la limite d'Anderson en absence d'interactions, **le désordre augmente le courant permanent dans la limite de fortes interactions**. Ce fait, constaté numériquement, sera également démontré analytiquement dans le dernier chapitre. Ces phénomènes sont obtenus quelle que soit la taille de l'anneau.

Par la suite, des systèmes hors demi-remplissage furent étudiés. La différence réside tout d'abord dans le fait que les courbes de la raideur de charge tracées en fonction de l'interaction pour différents désordres ne se croisent pas. Hors demi-remplissage, le désordre ne fait plus augmenter le courant permanent dans la limite d'interaction forte. De surcroît, dans cette limite, la raideur de charge D décroît en $1/U$ et ne sature pas, contrairement aux fermions sans spin [5].

Dans le sixième chapitre, nous étudions de la localisation des électrons dans ces anneaux. Ce travail a été effectué afin de confirmer cette croissance très importante trouvée, en moyenne comme pour chaque échantillon, de la raideur de charge D en fonction de U . La longueur de localisation a été calculée pour un nombre de sites pairs et impairs afin de montrer qu'un effet de délocalisation fort a lieu, qui pourrait être précurseur de la transition métal-isolant trouvée en deux dimensions. Il résulte de cette étude que l'augmentation dépend du désordre et qu'elle est obtenue pour tout désordre fini. A désordre nul, on vérifie que la longueur de localisation décroît, confirmant la localisation opérée lorsque l'interaction augmente. On confirme par ce biais que le phénomène de délocalisation se produit bien et de manière très forte lorsque désordre et interaction sont en compétition.

Le septième et dernier chapitre étudie le comportement de la sensibilité de phase dans la limite des très fortes interactions. On décompose l'étude en deux parties : systèmes à demi-remplissage et hors demi-remplissage.

A demi-remplissage, dans la limite de fortes interactions, les degrés de liberté orbitaux des électrons sont bloqués et la partie en spin de l'hamiltonien de Hubbard peut être réécrite comme l'hamiltonien de Heisenberg de spin $1/2$. Son état fondamental est déterminé grâce à la règle de Marshall [8] si le nombre de sites est pair. Le calcul perturbatif de la sensibilité de phase $|E(\pi) - E(0)|$ à partir de cet état fondamental a permis de conclure que, en raison de la symétrie particule-trou, les termes de puissance impaire du développement en désordre de cette quantité s'annulent et que le désordre augmente le courant permanent proportionnellement à $(W/U)^2$, où W est la force du désordre, dans cette limite de grande interaction, appelée limite de Mott-Hubbard. Ce développement a été effectué pour un nombre de sites

pairs, et ainsi, un nombre pair d'électrons, tandis que l'outil numérique permet d'étendre ce résultat à des systèmes possédant un nombre impair de sites (et d'électrons).

Hors demi-remplissage, un autre comportement est obtenu et cela peut être expliqué en écrivant l'état fondamental comme une superposition des états.

Chapitre 1

Des systèmes mésoscopiques et de leurs propriétés : quelques généralités

Ce chapitre introductif va me permettre de donner une introduction à la physique mésoscopique. Le préfixe "mesos" provient du grec et signifie "milieu"; la physique mésoscopique serait donc la physique du milieu, on pourrait dire la physique d'entre le microscopique et le macroscopique. En effet, cette physique décrit des systèmes contenant de nombreux atomes, ainsi, il est possible de définir des notions telles le niveau de Fermi que l'on trouve dans les solides. Cependant, puisque la taille des systèmes considérés reste néanmoins petite et que l'on se place à température basse, on peut parler de niveaux d'énergie et de cohérence de phase, notions relatives à la physique microscopique. Dans ce régime de paramètres, les systèmes auraient donc la particularité de présenter simultanément des propriétés de la physique microscopique et macroscopique, notamment la cohérence de phase, propriété fondamentale de la mécanique quantique. L'interaction entre les ondes des particules passant par des chemins différents vont mener à des phénomènes d'interférence, caractéristiques de la physique mésoscopique. Depuis de nombreuses années, ce domaine qu'est la physique quantique, peut être atteint expérimentalement et fait l'objet d'une intense recherche: l'intérêt réside dans ses implications tant théoriques qu'expérimentales. Du point de vue

théorique, la physique mésoscopique pourrait aider à la compréhension de nombreux problèmes toujours pas résolus tels la décohérence. De plus, sur le plan expérimental et industriel, la tendance actuelle est à la miniaturisation des circuits électroniques et cela mènera inévitablement à rencontrer des problèmes dus à la cohérence de phase. C'est pourquoi une étude approfondie de cette physique se révèle très utile. Ce chapitre va permettre de brièvement présenter les aspects les plus étonnants de la physique mésoscopique, notamment ceux existant en raison des interférences quantiques. On mentionne ici quelques livres introduisant à la physique mésoscopique [9, 10, 11].

1.1 Les différents régimes de transport

L'étude du transport électronique dans le régime mésoscopique met en évidence les longueurs caractéristiques pertinentes qui seront présentées par la suite. Ici, les longueurs pertinentes sont la longueur d'onde de Fermi λ_F , le libre parcours moyen l_e , la longueur de phase l_ϕ ainsi que la longueur de localisation ξ . Considérer ces différentes quantités va permettre de distinguer et définir les divers régimes de transport.

1.1.1 Quelques longueurs caractéristiques

Définissons maintenant quelques longueurs caractéristiques relatives aux dimensions des systèmes physiques étudiés [10, 12].

Longueur d'onde de Fermi λ_F

Considérons un modèle d'électrons dans un métal dans lequel les interactions électron-électron sont décrites par une masse effective. L'équation de Schrödinger correspondant à l'hamiltonien $H = -\sum_j \frac{\hbar^2 \nabla_j^2}{2m}$ ($j = 1, \dots, N$ particules) peut être séparé en N équations de Schrödinger indépendantes de la façon suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = \epsilon \Psi . \quad (1.1)$$

Cette équation à une particule a pour solution des ondes planes $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ indexées par le vecteur d'onde \mathbf{k} . Les énergies permises valent $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. On considère qu'à température nulle, les électrons occupent les états qui ont des énergie inférieures ou égales à l'énergie de Fermi ϵ_F . Seuls les électrons

proches du niveau de Fermi ϵ_F vont participer à la conduction. Ces électrons vont être reliés à la longueur d'onde de Fermi $\lambda_F = 2\pi/k_F$. Cette longueur est très petite, de l'ordre de quelques dizaines d'Angströms dans les métaux et peut être plus grande dans les semiconducteurs.

Libre parcours moyen électronique l_e et collisions élastiques

Lorsqu'un électron se déplace dans le système (cristal), il subit des collisions sur les impuretés du réseau. Ces diffusions sont élastiques dans la mesure où l'énergie des électrons n'est pas changée et reste bien définie. Toutefois, ces dernières introduisent un changement de phase dans la fonction d'onde et changent le vecteur d'onde, mais ces déphasages introduits sont spécifiques à un échantillon donné ou une configuration du désordre fixée. Ces collisions élastiques sont cohérentes en ce qui concerne la phase des fonctions d'onde. On appelle libre parcours moyen l_e la distance moyenne après laquelle le vecteur d'onde d'un électron à l'énergie de Fermi est à une distribution aléatoire. Les électrons participant à la conduction se déplacent à la vitesse de Fermi v_F et on a : $l_e = v_F \tau_e$, où τ_e le temps de relaxation de la quantité de mouvement due aux collisions élastiques.

Longueur de cohérence de phase l_ϕ et collisions inélastiques

D'autres collisions, différentes de celles présentées ci-dessus, conduisent à la destruction de la phase de la fonction d'onde électronique. Les déphasages introduits lors de ces collisions inélastiques sont incontrôlables et imprévisibles car ceux-ci sont dus à l'agitation thermique (collisions avec des phonons) et aux collisions électron-électron. Ces processus sont à l'origine de la perte de cohérence de phase. Ces collisions changent l'énergie de la particule et sont appelées collisions "inélastiques". On définit alors la longueur de cohérence de phase l_ϕ comme étant la longueur sur laquelle l'électron garde la mémoire de sa phase. Soit τ_ϕ la durée lors de laquelle la cohérence de phase est considérée comme conservée. Pour des systèmes quasi-unidimensionnels, cette durée varie comme $\tau_\phi \propto T^{-p}$ en fonction de la température avec $p \simeq \frac{2}{3}$ [10, 12].

En réalité, τ_ϕ n'est pas strictement égal à la durée de vie des états propres du système considéré τ_{in} car un autre processus vient se greffer à ceux déjà décrits, celui de la diffusion avec retournement de spin qui ne dépend pas de la température et qui entraîne $\tau_\phi^{-1} = \tau_{in}^{-1} + \tau_{spin}^{-1}$. Lorsque $\tau_\phi \lesssim \tau_e$, c'est-à-dire quand les électrons se déplacent en ligne droite entre deux collisions inélastiques, on écrit $l_\phi = v_F \tau_\phi$. Quand $\tau_\phi \gg \tau_e$, les électrons subissent plusieurs collisions avant de perdre la mémoire de leur phase et le trajet moyen n'est donc pas une ligne droite; il faut alors moyenner la distance parcourue en considérant la distribution angulaire aléatoire prise après les

collisions et le nombre de trajectoires (τ_ϕ/τ_e) de longueur $v_F\tau_e$ entre ces collisions [9]. On obtient alors : $l_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$ où on a défini D comme le coefficient de diffusion. Avec $D = \frac{v_F l_e}{d}$ et d la dimension du système, on obtient $l_\phi = \sqrt{(v_F^2 \tau_e \tau_\phi)/d}$.

Ainsi, on va pouvoir définir le régime mésoscopique. On se place dans le cas où l'électron garde la mémoire de sa phase, donc, on doit s'affranchir des collisions inélastiques. Pour cela, L étant la taille du système considéré, il faudra se placer à des températures suffisamment basses afin que $L < l_\phi$: les expériences sont donc souvent réalisées à très basse température, de l'ordre de 100 mK, et pour des systèmes ayant des tailles de l'ordre du micron. C'est ainsi que l'on définit le régime mésoscopique.

Longueur de localisation ξ

On appelle désordre toutes les formes possibles d'impuretés présentes dans le système. La force du désordre est caractérisée en comparant la longueur d'onde de Fermi au libre parcours moyen. Le désordre est faible et alors $\lambda_F \ll l_e$, si les collisions successives entre électrons et impuretés sont séparées dans l'échelle λ_F . Entre deux collisions, les fonctions d'onde électronique peuvent être assimilées à des ondes planes. La notion de trajectoire a un sens et une approche semi-classique peut être envisagée. Si le désordre est plus fort, de telle sorte $\lambda_F \geq l_e$, la notion de trajectoire perd tout son sens et le régime est alors purement quantique. En présence de désordre, les interférences quantiques peuvent mener à la localisation des fonctions d'onde dont les enveloppes décroissent exponentiellement avec la distance. Cette décroissance est caractérisée par une nouvelle longueur ξ , **la longueur de localisation**. Le système est alors appelé isolant d'Anderson si $L > \xi$.

1.1.2 Les divers régimes de transports

La comparaison des quantités ci-dessus va permettre de distinguer divers régimes de transport. Considérons un système de longueur L . Comparer cette longueur L avec les différentes longueurs caractéristiques mentionnées au paragraphe ci-dessus va donner lieu à une classification des différents types de transport. La force du désordre est donnée en comparant les deux régimes suivants :

- régime diffusif classique :

c'est le cas où $L > l_\phi$ et les collisions sont essentiellement inélastiques et détruisent toute cohérence possible, ainsi, le transport est indépendant de la forme du système. La statistique régit donc les propriétés de tels systèmes qui sont décrites par le modèle de Drude [13]. Dans la suite, on ne considère que des systèmes mésoscopiques lorsque $L < l_\phi$.

– régime localisé : On se trouve dans le cas où $\lambda_F \lesssim l_e$ et $l_\phi > L > \xi$. Le système est un isolant et les fonctions d'onde sont localisées dans des régions finies de l'espace. Le désordre peut être à l'origine de cette localisation et est responsable d'une transition métal-isolant. Pour des températures très basses, le transport ne se produit que par des sauts des électrons entre les états localisés.

– régime diffusif mésoscopique :

on se place toujours dans le cas de faible désordre ($\lambda_F \ll l_e$), mais cette fois, on a $L > l_e$ et l'électron subit donc un grand nombre de collisions lors de la traversée de l'échantillon. Sa trajectoire est influencée par ses nombreux chocs élastiques et peut être assimilée à une marche aléatoire diffusivité classique. Le temps de diffusion de la particule s'introduit alors de façon évidente et s'écrit classiquement : $\tau_D \propto \frac{L^2}{D}$ avec D la constante de diffusion. Rappelons que $\tau_\phi > \tau_D$ puisque l'on s'est placé dans le cadre du régime mésoscopique.

– régime balistique :

lorsque $L < l_e < l_\phi$, soit quand les dimensions du système sont inférieures au libre parcours moyen, le transport est dit *balistique*. Les électrons se déplacent librement sans rencontrer aucune collision d'aucune sorte, ni élastique ni inélastique, sauf sur les bords de l'échantillon. Ce cas correspond au régime de faible désordre, c'est-à-dire lorsque $\lambda_F \ll l_e$. Les trajectoires des électrons sont une succession de réflexions sur les bords de l'échantillon; ainsi la forme de l'échantillon a une influence importante sur les propriétés de transport du système.

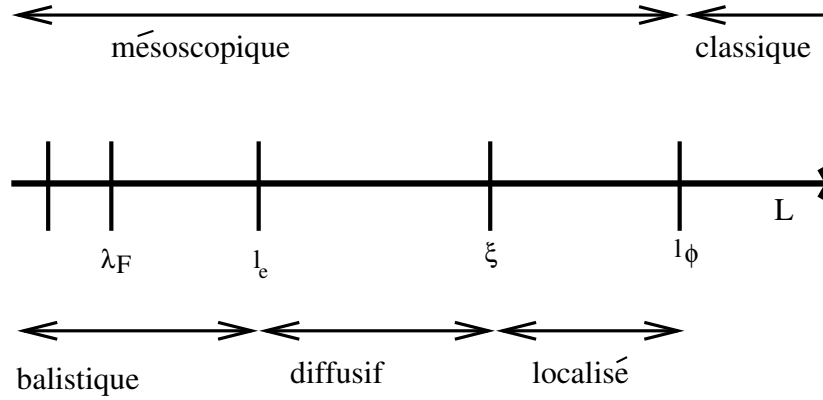


FIG. 1.1: Longueurs caractéristiques et régimes de transport correspondants. On se place dans le cas de transport cohérent, à basse température, lorsque le désordre est faible. D'après [12, 11].

1.2 Modèle de Drude

La mesure de la conductivité dans un champ magnétique peu intense, est un des outils de base requis dans la caractérisation des films semiconducteurs puisqu'elle permet de déterminer la densité de charge n_s ainsi que la mobilité μ de manière individuelle, contrairement à la conductivité en champ nul qui ne donne que le produit des deux.

Dans le cas d'un champ magnétique nul, on a à faire au cas du régime diffusif classique et les électrons de conduction se meuvent de manière désordonnée et subissent de nombreuses collisions avec les impuretés ou les défauts du réseau.

L'application d'un champ électrique \mathbf{E} soumet les électrons à une force $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ et induit une vitesse de dérive des électrons \mathbf{v}_d .

On obtient alors une égalité entre le taux de perte de leur moment en raison de la diffusion et le gain provenant du champ électrique :

$$-\frac{d\mathbf{p}}{dt}_{\text{diffusion}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}_{\text{électrique}} \quad (1.2)$$

soit,

$$\frac{m\mathbf{v}_d}{\tau_e} = -e\mathbf{E} \quad (1.3)$$

Les électrons acquièrent alors une vitesse de dérive, $\mathbf{v}_d = -e\mathbf{E}\tau_e/m$, m étant la masse effective des électrons et τ_e le temps de relaxation ou temps moyen entre deux collisions [13]. On définit ensuite la mobilité électronique μ_e par $\mathbf{v}_d = -\mu_e\mathbf{E}$ c'est-à-dire :

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m}. \quad (1.4)$$

La densité du courant correspondant s'écrit :

$$\mathbf{j}_d = -en_s\mathbf{v}_d = en_s\mu_e\mathbf{E}. \quad (1.5)$$

et l'on définit alors la conductivité électrique du modèle de Drude

$$\sigma_{\text{el}}^0 = en_s\mu_e = \frac{e^2n_s\tau_e}{m}.$$

Si l'on rajoute un champ magnétique faible \mathbf{B} , les électrons sont soumis à la force de Lorentz $\mathbf{F} = -e\mathbf{v}_d \times \mathbf{B}$ qui modifie leur mouvement et par là même, leur conductivité électrique.

Elle induit une déflexion des électrons vers le côté de l'échantillon. Par conséquent, il y a une accumulation de charges et une tension latérale qui apparaît. Ce phénomène est appelé effet Hall.

La conductivité électrique devient une grandeur tensorielle de dimension deux et vaut [9] :

$$\overleftrightarrow{\sigma} = \frac{\sigma_{\text{el},0}}{1 + (\omega_c\tau_e)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau_e \\ \omega_c\tau_e & 1 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

où $\sigma_{\text{el},0}$ est la conductivité de Drude sans champ magnétique et $\omega_c = eB/m$ la fréquence cyclotron. Le tenseur de résistivité s'obtient en inversant le tenseur de conductivité :

$$\overleftrightarrow{\rho} = \frac{1}{\sigma_{\text{el},0}} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau_e \\ -\omega_c\tau_e & 1 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

et on a : $\rho_{xx} = \sigma_0^{-1}$, $|\rho_{xy}| = |\rho_{yx}| = (\mu B)/\sigma_0 = B/|e|n_s$. Ainsi, ce simple modèle de Drude permet la prédiction de la constance de la résistance longitudinale ainsi que de la croissance linéaire de la résistance de Hall en fonction

du champ magnétique. En réalité, ces lois ne sont valables qu'à champ faible et sous champ fort, on constate un désaccord prononcé, notamment que la résistivité longitudinale ρ_{xx} présente des oscillations que l'on surnomme oscillations de Shubnikov-De Haas. Bien que ce type d'oscillations ne soient pas uniques aux conducteurs bidimensionnels et aient déjà été observées dans des métaux, cet effet se révèle être plus fort dans les semiconducteurs [9].

1.2.1 Effet Shubnikov-De Haas

Considérons l'expression de τ_e ; celle-ci est inversement proportionnelle à la densité d'états au niveau de Fermi $\tau_e^{-1} \propto n(E_F)$ [9]; par conséquent, la résistivité longitudinale ρ_{xx} est proportionnelle à $n(E_F)$. La mesure de la résistance longitudinale $R_{xx} = \rho_{xx}L_x/L_y$, grandeur macroscopiquement observable, permet de connaître la variation de la densité d'états; pour un système en deux dimensions, celle-ci est caractérisée par un ensemble de pics de Dirac à champ magnétique fort :

$$n(E) = \frac{2eB}{h} \sum_n \delta(E - E_n) \quad (1.8)$$

avec $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$. A basse température, les niveaux de Landau E_n sont remplis jusqu'au niveau de Fermi et en faisant varier le champ \mathbf{B} , l'espacement entre les niveaux de Landau $\hbar\omega_c$, nommé également gap cyclotron, augmente proportionnellement à $B = |\mathbf{B}|$. De ce fait, les niveaux de Landau E_n se décalent vers les hautes énergies lorsque le champ appliqué s'amplifie sachant que le nombre d'états dans chaque niveau de Landau est égal à $2eB/h$ et que la densité électronique n_{2D} moyenne est constante. La résistivité ρ_{xx} parcourt un cycle d'oscillations pendant que l'énergie de Fermi se déplace du centre d'un niveau de Landau à un autre niveau. Ainsi, le potentiel chimique μ_c se déplace entre les deux niveaux de Landau afin de maintenir la densité

$$\begin{aligned} n_{2D} &= \int_0^{+\infty} n(E)f(E)dE \\ &= \int_0^{+\infty} n(E)\frac{1}{1+\exp(\beta(E-\mu_c))}dE. \end{aligned} \quad (1.9)$$

toujours constante. $f(E)$ est la fonction de Fermi.

La résistance R_{xx} assujettie à ces variations de la densités d'états au niveau de Fermi oscille avec le champ magnétique. Elle passe ainsi d'un maximum pour les valeurs où le niveau de Fermi coïncide avec un niveau

de Landau à un minimum lorsque E_F est entre deux niveaux E_n [14]. Ces oscillations sont appelées oscillations Shubnikov-De Haas et sont périodiques en $1/B$.

1.2.2 Effet Hall quantique ou les modes transverses

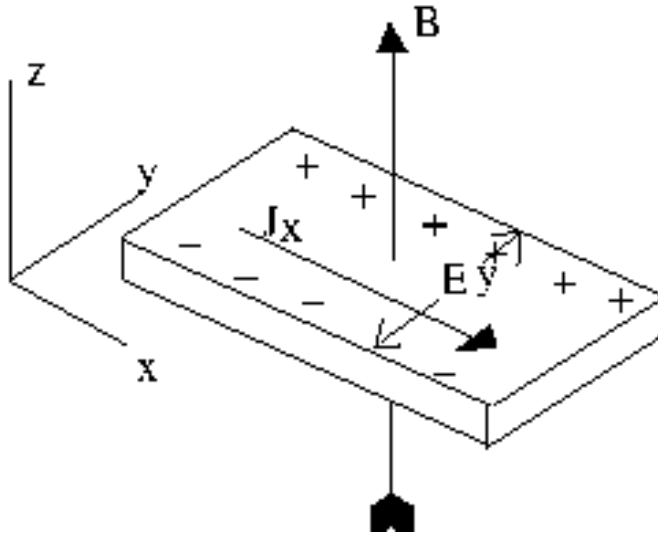


FIG. 1.2: Schéma de l'expérience de Hall [15]. On applique un champ magnétique \mathbf{B} perpendiculairement au courant dans l'échantillon et une tension apparaît dans la troisième direction. Cette tension peut ensuite être reliée aux propriétés du système.

L'effet Hall classique dans un gaz bidimensionnel d'électrons se traduit par une variation linéaire de la résistance transverse en fonction du champ donnée par les relations $R_{xy} = B/n_{2D}e$ ($R_{xy} = \rho_{xy}$). Cependant, sous des champs plus forts, une quantification de ρ_{xy} apparaît et ce phénomène fut mesuré expérimentalement par von Klitzing *et al* [16]. Cette découverte met en évidence des plateaux dans les courbes $R_{xy}(B)$ à des valeurs extrêmement précises et quantifiées valant :

$$R_{xy} = \frac{h}{\nu e^2} \quad (1.10)$$

où ν est entier non nul, égal au facteur de remplissage des niveaux de Landau en prenant en compte le spin des électrons. C'est l'**effet Hall quantique entier**. Sa valeur est donnée en calculant le rapport de la densité de porteurs divisée par la dégénérescence des niveaux de Landau :

$$\nu = \frac{n_{2D}}{eB/\hbar} \quad \text{avec } \nu = 1, 2, \dots \quad (1.11)$$

Un exemple de résultat expérimental est montré en figure 1.3. Une approche théorique basée sur la théorie de Kubo [17, 18, 19] qui donne l'expression du courant dans l'approximation de la réponse linéaire à l'application d'un champ externe permet d'interpréter l'effet Hall quantique entier. Tenant compte des imperfections du système, la densité d'états n'est pas nulle en dehors des niveaux de Landau. Pourtant, les états qui se trouvent à cette énergie sont localisés et ne contribuent pas à la conductivité de l'échantillon.

Tant que l'énergie de Fermi coïncide avec les états localisés, c'est-à-dire que celle-ci est donc située entre les niveaux n et $n + 1$, la résistivité de Hall ρ_{xy} est constante et égale à h/ne^2 . Ainsi, les plateaux correspondant à un facteur de remplissage impair sont dus à la levée de dégénérescence de spin d'un niveau d'énergie lorsque le niveau de Fermi se situe dans le gap de Zeeman $g\mu_B B$, a contrario des plateaux correspondant à un facteur de remplissage pair alors que le niveau de Fermi se trouve positionné dans le gap cyclotron $\hbar\omega_c$. La seule anicroche de ce modèle se situe dans le fait de considérer que tous les électrons conduisent le courant de Hall, qu'ils se situent dans les états localisés comme dans les états étendus. Ce paradoxe fut résolu par Prange qui argua que la perte du courant de Hall est exactement compensée par un accroissement du courant de Hall porté par les électrons restant dans les états étendus [20].

Depuis fut découvert l'effet Hall quantique fractionnaire en 1982. Lorsque l'on augmente le champ magnétique et que l'on descend à des températures plus basses, on observe des plateaux supplémentaires dans la résistance de Hall pour des remplissages **fractionnaires** (non entiers) [21]. La quantification de la résistance de Hall, pour des valeurs fractionnaires du facteur de remplissage ν , [21] peut être interprétée par le biais de fortes interactions coulombiennes et des corrélations électroniques [22].

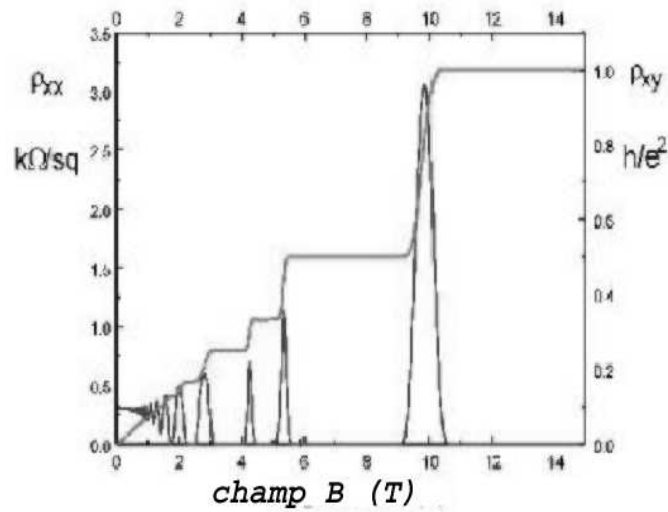


FIG. 1.3: Effet Hall quantique dans un échantillon de GaAs-GaAlAs à 30 mK [15]. La résistance de Hall ρ_{xy} (ordonnées de droite) et la composante diagonale de la résistivité ρ_{xx} (ordonnées de gauche) sont tracées en fonction du champ magnétique B (en abscisse). ρ_{xx} présente une valeur nulle là où les plateaux de ρ_{xy} apparaissent.

1.3 Transport dans les systèmes mésoscopiques

On considère des systèmes macroscopiques dont la longueur est L et la largeur W . La conductance G d'échantillons de grande taille obéit à la loi d'Ohm $G = \sigma W/L$, loi d'échelle perdant sa validité lors de la réduction des dimensions. Des corrections doivent s'opérer sur cette loi: la première est l'incorporation d'une résistance de contact, la seconde vient des interférences quantiques. Par conséquent, que la conductance ne décroît plus linéairement avec la décroissance de la largeur W [9]. La dépendance en longueur L n'est alors plus celle de la loi d'Ohm. Landauer et Büttiker ont pris en compte ces considérations et développé un formalisme qui relie le courant qui circule dans un conducteur à la probabilité de transmission d'un électron à l'énergie de Fermi à travers ce même conducteur, formulation amplement

employée afin d'interpréter de nombreux résultats expérimentaux en physique mésoscopique tels l'effet Hall quantique entier [23].

1.3.1 De la conductance

Afin de mesurer les propriétés de transport telle la conductivité, le système considéré maintenant sera connecté à des fils, eux-mêmes reliés aux appareils de mesure. Une fois connecté, l'échantillon présente une résistivité finie. On considère un système sans corrélations électroniques. On va dériver la formule de Landauer pour la conductance G dans un système mésoscopique. Considérons un système cohérent unidimensionnel relié à deux réservoirs d'électrons par l'intermédiaire de deux fils idéaux comme le symbolise la figure 1.4.

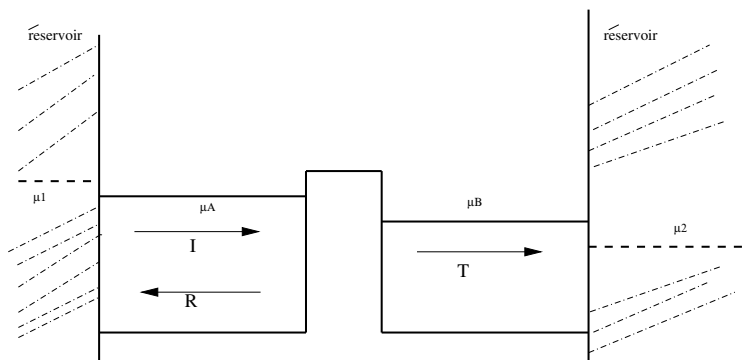


FIG. 1.4: Schéma énergétique de la configuration considérée. μ_1 et μ_2 sont les potentiels chimiques des réservoirs de gauche et de droite respectivement, μ_A et μ_B sont ceux des conducteurs cohérents de chaque côté de la barrière respectivement [9].

On suppose que les réservoirs absorbent tous les électrons incidents quelle que soit leur énergie ou leur phase et fournissent des électrons avec une énergie inférieure à leur potentiel chimique μ_i , sans aucun rapport avec les électrons absorbés [24]. Soient μ_1 et $\mu_2 < \mu_1$ les potentiels chimiques respectivement des réservoirs de gauche et de droite du conducteur, $v(E)$ la vitesse des électrons de l'énergie E et $n_+(E)$ la densité d'états électroniques allant de

la gauche vers la droite et d'énergie E . On se place à température nulle. Le courant émis par le réservoir de gauche dans l'intervalle d'énergie $\mu_1 - \mu_2$ est donné par :

$$I' = - \int_{\mu_2}^{\mu_1} ev(E)n_+(E)dE \quad (1.12)$$

avec

$$n_+(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} = \frac{1}{\pi\hbar v(E)} \quad (1.13)$$

Soient T et R les coefficients de transmission et de réflexion des électrons au travers du conducteur. Les électrons partant de ce réservoir ont alors une probabilité $T = 1 - R$ d'être transmis vers le réservoir de droite en passant par le conducteur. La loi de conservation se traduit par $R+T = 1$. Le courant émis en-dessous du potentiel chimique μ_2 est compensé par le courant émis du réservoir de droite. Ainsi, dans la limite de $\mu_1 - \mu_2$ petit et si l'on considère que T est indépendant de l'énergie E dans l'intervalle $\mu_1 - \mu_2$, le courant transmis est égal à $I = TI'$:

$$I = -\frac{2e}{h}T(\mu_1 - \mu_2) \quad (1.14)$$

Si l'on appelle V la tension appliquée, on a $(\mu_1 - \mu_2) = -eV$ et la conductance $G = I/V$ du système, rapport du courant et de la tension, s'écrit alors :

$$G = \frac{2e^2}{h}T \quad (1.15)$$

Néanmoins, une remarque doit être formulée au sujet de cette formule; en effet, celle-ci ne peut jamais prendre de valeur infinie, valant au maximum $2e^2/h$, même lorsque le système conduit parfaitement ($T = 1$). Mais, cette formule donne la conductance du système entier en incluant les fils idéaux. Cette conductance peut ainsi être considérée comme l'association en série d'une résistance de contact G_C^{-1} et de la résistance du conducteur G'^{-1} [25, 9]. Le formalisme peut encore se mettre sous la forme généralisée par Büttiker au cas de plusieurs modes de propagation [23, 26] :

$$G = \frac{e^2}{h}Tr(tt^\dagger) \quad (1.16)$$

avec t désignant la matrice de transmission du système, t_{ij} étant l'amplitude de transmission du mode j vers le mode i .

1.3.2 Généralisation à plusieurs contacts

On va maintenant s'intéresser à une situation plus réaliste de fils avec plusieurs contacts. On peut alors montrer que ces fils peuvent se décomposer en plusieurs branches ayant chacune son nombre quantique propre. Chacune de ces branches correspond à un système unidimensionnel idéal, comme il a été présenté dans la section 1.3.1.

Prenons l'exemple d'un conducteur avec K contacts, M_p modes de propagation au niveau du contact p [27]. Dans un souci de simplification et de clarification, nous opterons pour la notation suivante pour évaluer le coefficient de transmission (respectivement réflexion) de l'ensemble des modes du contact q vers l'ensemble des modes du contact p :

$$T_{pq} = \sum_i^{M_p} \sum_j^{M_q} T_{pq,ij} \quad (1.17)$$

$$R_{pp} = \sum_{i,j}^{M_p} R_{pp,ij} \quad (1.18)$$

où $T_{pq,ij}$ désigne le coefficient de transmission du mode j dans le contact q vers le mode i dans le contact p et $R_{pp,ij}$ le coefficient de réflexion du contact p à partir du mode j vers le mode i . Dorénavant, le courant au niveau du contact p [28]:

$$I_p = \frac{e}{h} [(M_p - R_{pp})\mu_p - \sum_{q \neq p} T_{pq}\mu_q], \quad \text{avec } p, q = 1, \dots, K \quad (1.19)$$

Dans cette relation, la conservation du courant implique que $M_p = R_{pp} + \sum_{q \neq p} T_{pq}$ et conduit à l'écriture de la relation :

$$I_p = \frac{e}{h} \sum_{q \neq p} T_{pq}(\mu_p - \mu_q) \quad (1.20)$$

Il s'agit là bien d'une généralisation à plusieurs contacts et plusieurs canaux formulée par Büttiker [27].

Dans le cas de deux contacts. Rappelons que $\mu_A < \mu_1$ et $\mu_B > \mu_2$ sont respectivement les potentiels chimiques dans les fils idéaux. La conductance propre du système s'écrit comme :

$$G' = \frac{eI}{(\mu_A - \mu_B)} \quad (1.21)$$

puisqu'il faut considérer la différence de potentiel $V' = (\mu_A - \mu_B)/e$ effective aux bornes du conducteur. Les niveaux sont déterminés de telle sorte que le

nombre d'états occupés par les électrons au-dessus de μ_A est égal au nombre d'états trous au-dessous de μ_A . Il suffit alors de considérer les états compris dans la tranche entre μ_1 et μ_2 puisque tous les états au dessus de μ_1 sont vides et tous ceux en dessous de μ_2 sont occupés. Le nombre total d'états est égal à $n(E)(\mu_1 - \mu_2) = 2n_+(E)(\mu_1 - \mu_2)$ et à gauche du conducteur, le nombre d'états occupés au-dessus de μ_A vaut $(1 + R)n_+(E)(\mu_1 - \mu_A)$. Quant à lui, le nombre de trous est donné par $(2 - (1 + R))n_+(E)(\mu_A - \mu_2)$, soit le complémentaire. Un raisonnement similaire à droite du conducteur permet de conclure en égalant de part et d'autre les trous ainsi que les électrons :

$$\mu_A - \mu_B = R(\mu_1 - \mu_2) \quad (1.22)$$

La conductance $G' = I/V'$ est exprimée de la manière suivante :

$$G' = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{1 - T} = \frac{1}{R'} \quad (1.23)$$

et on peut remarquer que la résistance est donnée par :

$$R = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{T} = \frac{h}{2e^2} + \frac{h}{2e^2} \frac{1 - T}{T} = \frac{h}{2e^2} + R' \quad (1.24)$$

Cette relation peut être interprétée comme la composition de la résistance R' du système avec la résistance de contact $R_C = h/2e^2$ en série.

1.3.3 Fluctuations universelles de la conductance

En l'absence de désordre, la trace $Tr(tt^\dagger)$ correspond au nombre de canaux transverses indépendants qui contribuent au transport. La conductance est donnée par e^2/h par canal de conduction en tenant compte du degré de liberté du spin qui engendre le double de canaux.

Lorsqu'il s'agit de systèmes désordonnés ou simplement dans le régime diffusif, le nombre de canaux M_{eff} participant à la conduction diminue et qu'il s'exprime simplement de la sorte :

$$\langle G \rangle = M_{eff} \frac{e^2}{h} \quad (1.25)$$

où $\langle G \rangle$ désigne la moyenne prise par rapport au désordre.

On peut connaître plus précisément le nombre de canaux de conduction M_{eff} . En effet, on peut également écrire la formule :

$$\langle G \rangle = \frac{e^2}{h} N_T, \quad (1.26)$$

N_T étant défini comme le nombre de Thouless ou le rapport de $E_C = \hbar D/L^2$, énergie de Thouless, et de Δ , écart moyen entre niveaux $N_T = E_C/\Delta$. Cette énergie est donnée par \hbar sur le temps que met un électron à diffuser $\tau_D = L^2/D$. Cette dernière formule est nommée **formule de Thouless** et traduit la relation directe entre les propriétés de transport et les propriétés spectrales [29]. En effet, le nombre de canaux effectifs conducteurs est aussi le nombre de niveaux d'énergie présent dans une tranche d'énergie d'épaisseur E_C .

La conductance peut donc être une manière de mesurer la sensibilité des niveaux d'énergie aux changements des conditions de bord. Dans une théorie à un corps, la conductance est directement reliée à la courbure des niveaux d'énergie, celle-ci étant fonction de la phase des conditions de bord périodiques généralisées [30]. Kohn a montré comment la conductance pouvait être directement reliée à l'énergie de l'état fondamental à température nulle [6]. Ce point sera démontré dans 2.1.2. Cette propriété a été utilisée afin de calculer la conductance résiduelle d'un système corrélé [31]. Dans un régime isolant ou localisé, les niveaux d'énergie ne seront quasiment pas sensibles aux changements de conditions de bord, contrairement au régime métallique.

On constate que dans des échantillons désordonnés, dans le régime mésoscopique, la conductance montre des fluctuations prononcées en fonction du champ magnétique par exemple. Considérons cette fois la variance de cette conductance ou ses **fluctuations**. A très basse température, les processus inélastiques sont gelés et l'on constate que les fluctuations de la conductance sont reproductibles et ne sont donc pas dues à des fluctuations thermiques. Considérons un échantillon que l'on a cuit et refroidi plusieurs fois de suite, cela revient à transformer la configuration d'impuretés, on a observé que, bien que la conductance changeait de forme, la variance restait sensiblement constante :

$$\delta G = (\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{e^2}{h} C \quad (1.27)$$

où C est constante d'ordre un. Ces fluctuations de la conductance sont dites *universelles* puisqu'elles ne dépendent ni de $\langle G \rangle$, ni de la taille

du système tant qu'il reste mésoscopique. Afin d'expliquer ce phénomène, on peut se référer à la théorie des matrices aléatoires. Cela permet, outre une compréhension explicite de l'origine de ces fluctuations universelles, également d'en obtenir le bon ordre de grandeur. La conductance moyenne est proportionnelle au nombre $N_T \gg 1$ de niveaux d'énergie présents dans une tranche d'énergie E_C . Si ces niveaux étaient indépendants, les fluctuations seraient de l'ordre de :

$$\delta G = \frac{e^2}{h} \sqrt{N_T}. \quad (1.28)$$

Pourtant, ces niveaux ne sont pas indépendants les uns des autres, mais bien au contraire fortement corrélés. Les écarts de niveaux de systèmes métalliques en l'absence de champ magnétique obéissent à la statistique de Wigner : on parle alors de distribution GOE ou *Gaussian Orthogonal Ensemble* [32], tandis que, s'il s'agit de niveaux non corrélés, on se retrouve confronté à la statistique de Poisson. La probabilité que deux niveaux se croisent est un maximum en ce qui concerne la distribution de Poisson et nulle dans le cas GOE. Cela traduit ainsi la rigidité spectrale du système et ne concerne que le régime du spectre discret. Dans un système isolé, si l'élargissement des niveaux d'énergie est moindre que l'écart moyen entre niveaux Δ , on se situe dans le cadre d'un système à spectre discret. Cette limite n'est pas envisageable pour les échantillons connectés, mais l'on peut parler de la statistique de la matrice de diffusion. Cette théorie, développée par Dyson et Wigner, peut également s'appliquer à une large gamme de problèmes où l'on cherche à décrire un ensemble de valeurs de manière statistique ([32]). Pour un système isolé, il est également pertinent de considérer les fonctions de corrélation entre états propres et celles-ci sont dépendantes de la classe de symétrie du système. Les déterminer dans des portions d'énergie de l'ordre de l'écart moyen entre niveaux Δ n'est pas accessible par des théories analytiques simples telles semi-classiques ou diagrammatiques, et nécessite l'emploi de moyen numérique ou de techniques supersymétriques. S'il s'agit de systèmes balistiques, ces fluctuations ne dépendent que de la géométrie de l'échantillon [33].

1.4 Phénomènes d'interférences

1.4.1 La phase de Berry

Soit un système quantique dont l'hamiltonien H décrit les effets d'un environnement statique. On suppose que ce système se trouve dans un état propre stationnaire. D'après le théorème de l'adiabaticité [34], si H est altéré très lentement, le système évolue en restant dans un état propre de l'hamiltonien H . Si l'hamiltonien retourne à sa forme initiale, le système fera de même mais une phase supplémentaire sera apparue dans la fonction d'onde [35]. Celle-ci est observable en principe par interférence du système cyclique considéré avec un autre dont l'hamiltonien n'aura pas évolué lors de ce laps de temps. Le but de ce sous-chapitre est de montrer que ce facteur de phase ainsi généré provient de la forme du parcours emprunté par l'hamiltonien et se rajoute à la composante dynamique habituelle $\exp(-iEt/\hbar)$. Considérons un hamiltonien quelconque possédant une dépendance paramétrique avec un ensemble $R = (X, Y, \dots)$ de paramètres. Ainsi, le périple de l'hamiltonien entre les temps $t = 0$ et $t = t_f$ peut être symbolisé par un circuit \mathcal{C} le long d'un chemin fermé $R(t)$ dans l'espace des paramètres. L'approximation dite adiabatique ne s'applique que si la variation de H est très lente, ce qui veut dire que, pour un chemin donné, t_f doit être très grand devant t . L'état $|\Psi(t)\rangle$ du système évolue selon l'équation de Schrödinger :

$$H(R(t))|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (1.29)$$

Quel que soit t , la base naturelle se compose des états propres $|n(R)\rangle$ de $H(R)$ avec $R = R(t)$ et est supposée discrète. On a l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$H(R)|n(R)\rangle = E_n(R)|n(R)\rangle. \quad (1.30)$$

Ces équations aux valeurs propres n'impliquent aucune relation entre les phases des différents états propres $|n(R)\rangle$ à différents R . Le choix de la phase est fait aléatoirement si l'état $|n(R)\rangle$ est unique dans l'espace de paramètres parcouru par le circuit \mathcal{C} . Lorsqu'un système préparé dans un de ses états $|n(R(0))\rangle$ évoluera adiabatiquement avec H , il se trouvera dans l'état $|n(R(t))\rangle$ à t . L'expression pour la fonction d'onde finale $|\Psi\rangle$ est alors donnée

par :

$$|\Psi(t)\rangle = \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(R(t')) \right] \exp (i\gamma_n(t)) |n(R(t))\rangle. \quad (1.31)$$

Le premier terme est le facteur de phase dynamique habituel. Le second terme est obtenu en dérivant l'équation de Schrödinger et on peut montrer [35] que, pour un chemin fermé, ce terme vaut :

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = i \int \int_S dS \cdot V_{n(R)} \quad (1.32)$$

avec

$$V_n(R) = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(R) | \nabla_R H(R) | m(R) \rangle \langle m(R) | \nabla_R H(R) | n(R) \rangle}{(E_{m(R)} - E_{n(R)})^2} \quad (1.33)$$

où dS désigne un élément de surface dans l'espace des paramètres R .

Cette phase supplémentaire est donc due à l'adiabaticité et à la cohérence de phase dans le circuit. De nombreuses applications de ce concept découvert par Berry en 1983 vont être exposées dans la suite de ce chapitre, notamment un très célèbre effet, appelé l'effet Aharonov-Bohm . Pourtant, dans ce cas, l'hamiltonien ne dépend pas du temps. C'est dans le cadre de l'approximation semi-classique que l'on attache aux trajectoires une phase analogue à celle de Berry.

1.4.2 Phase de Berry et effet Aharonov-Bohm

Considérons un anneau comme schématisé dans la figure 1.5.

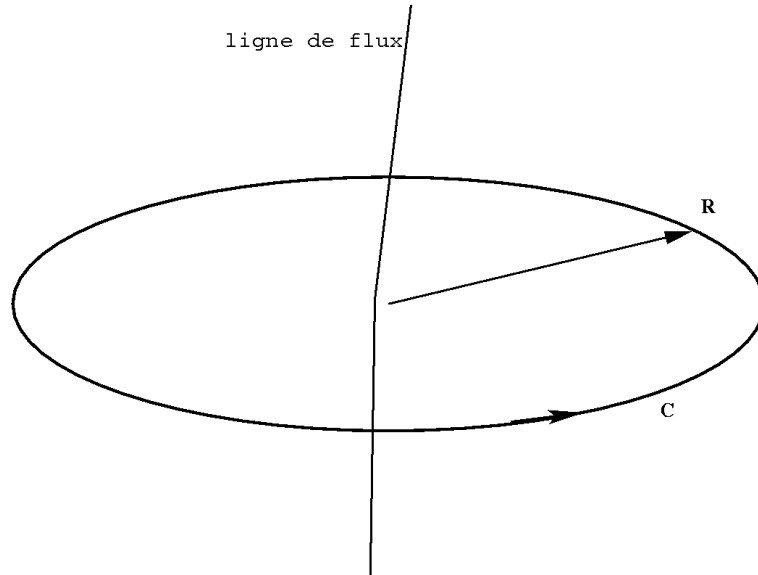


FIG. 1.5: Schéma d'un anneau unidimensionnel. On intègre le terme supplémentaire dû à la phase de Berry le long de l'anneau.

L'effet appelé Aharonov-Bohm est l'analogie électronique de l'expérience des fentes d'Young en optique. L'expérience originale proposée par Aharonov et Bohm fait interférer deux faisceaux d'électrons issus de la même source dans le vide. Ainsi, les deux trajectoires forment une boucle fermée traversée par un champ magnétique. En utilisant la formule de la phase de Berry, il est possible de montrer que cet effet peut être interprété comme un changement de phase géométrique. La phase supplémentaire en fonction du potentiel vecteur \mathbf{A} lié au champ magnétique peut s'écrire [35] :

$$\gamma_{n(c)} = \oint_c \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(R) dR \quad (1.34)$$

ce qui donne :

$$\gamma_{n(c)} = \frac{e}{\hbar} \phi. \quad (1.35)$$

Ainsi, dans l'expression de la fonction d'onde se rajoute une exponentielle contenant le flux traversant l'anneau ou autrement dit, la phase Φ accumulée

le long d'une trajectoire entre deux points A et B , en présence d'un potentiel vecteur \mathbf{A} , sera égale à :

$$\Delta\Phi = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_A^B \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad (1.36)$$

où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux. Dans le cas d'une intégration sur un anneau, cette phase sera bien sûr égale à :

$$\Delta\Phi = \frac{2\pi}{\phi_0} \phi. \quad (1.37)$$

On constate donc qu'une phase apparaît dès que l'on rajoute un flux dans l'anneau.

Dans le cadre de la physique mésoscopique, on suppose que les électrons se propagent de façon cohérente puisque $l_\phi > L$, et leurs propriétés sont déterminées par les interférences entre leurs fonctions d'onde électroniques. Ces interférences peuvent être modifiées en changeant la phase relative associée aux différentes trajectoires électroniques. Pour ce faire, on utilise un champ magnétique \mathbf{B} qui va agir sur n'importe quel type de systèmes constitués de particules chargées. La phase accumulée le long d'une trajectoire allant d'un point A à un point B sera alors augmentée de la phase donnée par l'équation (1.36). Cet effet se manifeste en particulier sur la conductance des échantillons mésoscopiques mais seulement pour des géométries particulières; en effet, sommer des déphasages sur une géométrie quelconque va rendre ce terme sans échelle caractéristique vis-à-vis du flux. L'anneau, bien au contraire, présente la géométrie idéale pour étudier ces phénomènes d'interférence puisque l'échelle de champ va être donnée par un quantum de flux dans la surface de l'anneau. Cette phase a été étudiée dans de nombreux cas et fait l'objet d'un livre [36]. Un cours qui m'a appris beaucoup traite également de ce sujet [37].

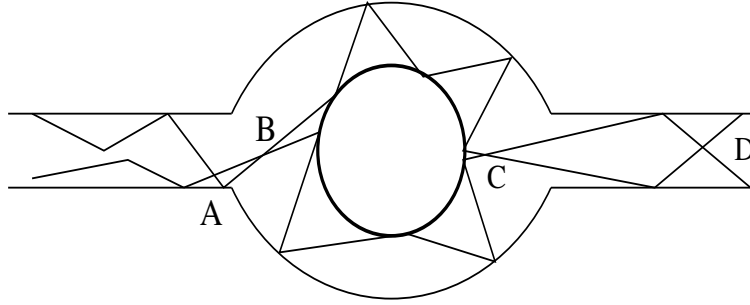


FIG. 1.6: *Interférences entre deux trajectoires électroniques dans l'anneau (points A, B, C et D).*

L'effet Aharonov-Bohm peut également être abordé en évaluant la probabilité qu'un électron initialement situé en A d'aller en B . Afin de comprendre ce phénomène, quelques rappels de mécanique quantique sont nécessaires. En mécanique classique, la probabilité d'aller d'un point A à un point B est donnée par la somme des probabilités sur toutes les trajectoires possibles; en mécanique quantique, on doit intégrer sur toutes les trajectoires entre A et B . Dans le cadre de l'approximation semiclassique, on exprime le propagateur comme une somme sur les chemins classiques. La probabilité d'aller de A à B pendant le temps t s'écrit :

$$P(A, B, t) \approx \left| \sum_i \mathcal{A}_i \right|^2 = \underbrace{\sum_i |\mathcal{A}_i|^2}_{\text{classique}} + \underbrace{\sum_{i \neq j} \mathcal{A}_i \mathcal{A}_j^*}_{\text{interférences}} \quad (1.38)$$

où \mathcal{A}_i représente l'amplitude de la propagation quantique le long du chemin classique i . Cette amplitude est un nombre complexe qui tient compte des fluctuations autour du chemin classique. Le premier terme de l'équation correspond à l'ensemble des chemins classiques possibles que peut prendre la particule tandis que le second terme représente toutes les interférences entre ces chemins.

Cette probabilité $P(A, B)$ se calcule en prenant le module au carré de la somme des amplitudes de probabilité $\mathcal{A}_p(A, B)$ pour qu'un électron se rende

de A à B suivant une trajectoire indexée p :

$$P(A, B) \approx \left| \sum_p \mathcal{A}_p(A, B) \right|^2 = \sum_p \sum_q \mathcal{A}_p(A, B) \mathcal{A}_q^*(A, B) \quad (1.39)$$

en développant,

$$P(A, B) \approx \sum_p \sum_q \mathcal{A}_p^0(A, B) \mathcal{A}_q^{0,*}(A, B) \exp(i(\Phi_p - \Phi_q)), \quad (1.40)$$

en posant \mathcal{A}_p^0 l'amplitude de probabilité en l'absence de champ magnétique. Φ_p est le déphasage dû au potentiel vecteur correspondant à la trajectoire p . Nous notons p_+ (resp. p_-) la trajectoire qui passe par le bras supérieur (resp. le bras inférieur) et ainsi, l'équation (1.40) peut être réécrit sous la forme :

$$P(A, B) = P_0(A, B) + \quad (1.41)$$

$$\sum_p \sum_q \mathcal{A}_{p_+}^0(A, B) \mathcal{A}_{q_-}^{0,*}(A, B) \exp(i(\Phi_{p_+} - \Phi_{q_-})) + c.c. \quad (1.42)$$

Le premier terme de l'équation correspond aux interférences entre les trajectoires passant dans un même bras. Le déphasage relatif entre le bras supérieur et inférieur est alors fonction du flux à travers l'anneau. Φ_d est un décalage de phase qui dépend de la configuration du désordre. Si l'on néglige l'effet du champ magnétique dans les bras de l'anneau, on a $(\Phi_{p_+} - \Phi_{q_-}) = 2\pi(\phi/\phi_0)$, indépendant de p_+ et q_- ce qui implique que :

$$P(A, B) = P_0(A, B) + P_1 \cos\left(2\pi \frac{\phi}{\phi_0} + \Phi_d\right) \quad (1.43)$$

L'effet Aharonov-Bohm se traduit par une partie oscillante de la probabilité qu'a l'électron d'aller d'un point A à un point B avec une période en flux correspondant à un quantum de flux à travers la surface de l'anneau. Cet effet résulte bien évidemment de la cohérence de phase des électrons à l'intérieur de l'anneau.

1.4.3 Localisation faible

Pour un conducteur diffusif, la conductance à champ magnétique nul est inférieure à la valeur classique. Cet effet devient plus important à température basse et est dû aux interférences classiques. On l'appelle "localisation faible".

On considère le développement de l'équation (1.38). Pour un régime diffusif, la somme est constituée de nombreux termes parmi lesquels la plupart disparaît lorsque l'on effectue la moyenne. Toutefois, dans le cas des conducteurs étudiés, un certain type de trajectoires empêche le dernier terme de disparaître car les interférences ne peuvent plus être négligées.

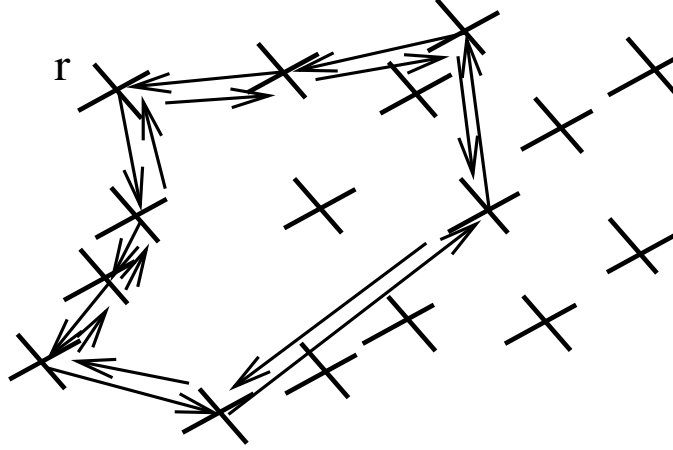


FIG. 1.7: Représentation de chemins allers-retours de r pouvant mener à des corrections dans la conductance en raison d'interférences quantiques. D'après [38].

Si l'on considère le développement de la section précédente de la probabilité d'aller de A à B , on écrit que la probabilité de retour à l'origine d'un électron est donnée par :

$$P(r, r) \approx \left| \sum_p \mathcal{A}_p(r, r) \right|^2 = \sum_p \sum_q \mathcal{A}_p(r, r) \mathcal{A}_q^*(r, r) \quad (1.44)$$

$$= \sum_p \sum_q \mathcal{A}_p^0(r, r) \mathcal{A}_q^{0,*}(r, r) \exp(i(\Phi_p - \Phi_q)) \quad (1.45)$$

$\mathcal{A}_p^0(r, r)$ est la contribution du chemin classique p à champ magnétique nul $\mathbf{B} = 0$.

Les trajectoires considérées étant fermées, le déphasage Φ_p correspondant à la trajectoire p et causé par la présence d'un champ magnétique vaut $2\pi\phi_p/\phi_0$, ϕ_p étant le flux du champ magnétique à travers la surface délimitée par la trajectoire, comme il a été démontré dans la section 1.4.1. L'amplitude de probabilité associée à chacune des trajectoires possédant une phase propre et un déphasage lié au flux qui dépend de la surface de la trajectoire,

la plupart des termes de cette somme se moyennent à zéro à l'exception des termes se rapportant à des trajectoires telles que $q = p$ et $q = -p$; $-p$ se trouve être la trajectoire obtenue par renversement du temps de la trajectoire p . Sachant que l'on a $\phi_{-p} = -\phi_p$ et $\mathcal{A}_{-p}^0(r, r) = \mathcal{A}_p^{0,*}(r, r)$, la probabilité est alors égale à :

$$P(r, r) \approx \sum_p |\mathcal{A}_p(r, r)|^2 + \sum_p |\mathcal{A}_p(r, r)|^2 \cos(4\pi\phi_p/\phi_0) \quad (1.46)$$

Cet effet a été calculé soigneusement pour les fluctuations de la conductance d'un anneau de rayon R et de taille L et donne :

$$\Delta G(\omega) = \frac{-e^2 l_\Phi(\omega)}{\pi \hbar L} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\frac{R}{l_\Phi(\omega)}}{\frac{R}{l_\Phi(\omega)}^2 + (L + \frac{2\Phi}{\Phi_0})^2} \quad (1.47)$$

avec $l_\Phi^2(\omega) = l_\Phi^2(0)/(1 + i\omega\tau_\Phi)$; en remplaçant dans l'équation ci-dessus, il découle :

$$\Delta G(\omega) = \frac{-e^2 l_\Phi}{\pi \hbar L} \frac{\sinh \frac{L}{l_\Phi}}{\cosh \frac{L}{l_\Phi} - \cos \frac{4\pi\phi}{\phi_0}}. \quad (1.48)$$

Il s'agit là de la forme prévue par Altshuler, Aronov et Spivak (référence 25 de [32]) et cette conductance a été mesurée par Sharvin et Sharvin [39]. Il faut constater qu'une composante oscillante est bien obtenue mais avec une période qui représente la moitié de celle des oscillations dues à Aharonov-Bohm. Cependant, la forme d'un anneau n'est pas la seule prédisposée à donner lieu à de la localisation faible. Malgré l'addition de contributions ayant des échelles de flux très différentes, un effet de cohérence quantique se mesure toujours, donc un effet de localisation faible existe-t-il tout-de-même sur un échantillon quelconque. Pourtant, le deuxième terme de l'équation 1.46 décroît en présence d'un champ magnétique puisque les flux ϕ_p inclus dans les différentes trajectoires ne sont pas les mêmes. Son origine est de surcroît la même que celle décrite pour l'anneau, soit l'interférence des trajectoires formant une boucle lorsque l'on renverse le sens du temps. Repartons de la formule ci-dessus et considérons que les ϕ_p dépendent de la trajectoire et ne sont plus fixés par la géométrie de l'échantillon. Sous champ nul, le déphasage introduit par le potentiel vecteur n'existe pas et implique que :

$$P(r, r, \phi = 0) = 2 \sum_p |\mathcal{A}_p(r, r)|^2. \quad (1.49)$$

On constate que la probabilité de retour à l'origine est effectivement doublée en comparaison avec sa valeur classique. Les électrons ont une tendance à une plus forte localisation. Par contre, sous un champ, $P(r, r)$ retrouve sa valeur classique en raison de la destruction de l'interférence. Une magnétoconductance positive naît alors grâce à cette localisation faible. De plus, seules les trajectoires dont la longueur est inférieure à la longueur de cohérence l_Φ contribuent, cet effet augmente donc avec l_Φ et décroît avec la température.

1.5 Conclusion

Afin de conclure ce chapitre préliminaire, il convient de souligner que les systèmes mésoscopiques possèdent des propriétés spécifiques qui s'affirment de manière encore plus accentuée lorsqu'ils ont des formes géométriques bien déterminées. Ces systèmes sont aussi très sensibles à l'effet d'un champ magnétique puisque le potentiel vecteur associé à ce champ introduit dans la fonction d'onde une phase supplémentaire responsable des effets présentés dans ce chapitre. Les anneaux par exemple, ainsi qu'on vient de le montrer, sont des systèmes aux propriétés particulières qu'il est intéressant d'étudier et dans ce travail, on va s'y intéresser plus particulièrement. Le phénomène Aharonov-Bohm implique de considérables conséquences : cette phase supplémentaire introduite dans la fonction d'onde des électrons dans un anneau lorsque l'on applique un champ magnétique va permettre une étude du phénomène des courants permanents qui apparaissent en raison de ce flux. Il convient de souligner que la plupart des propriétés exposées ci-dessus sont la conséquence de la cohérence de phase dans des systèmes contenant de nombreux atomes. L'effet d'un champ magnétique appliqué à des systèmes de dimension deux produit les effets remarquables de Shubnikov-de Haas et de Hall quantique. Dans ce cas, l'échelle à considérer est le rayon cyclotron qui doit être inférieur à la longueur de cohérence de phase ce qui explique que ces effets apparaissent à champ fort et température basse. On pourra se reporter à l'article de Glazman [40] pour une revue plus complète des phénomènes les plus célèbres de la physique mésoscopique qui fournit un grand nombre de références.

Chapitre 2

Les courants permanents

Dans le chapitre précédent, on a décrit comment les systèmes possédant une géométrie d'anneau montrent un comportement remarquable. Cette spécificité va être soulignée dans la suite et étudiée tout au long de ce manuscript. Les dispositifs mésoscopiques en forme d'anneau connectés à des fils présentent en effet la géométrie idéale pour observer ces phénomènes d'interférences entre les fonctions d'onde des électrons puisque les électrons, entrant dans cet anneau, peuvent parcourir deux trajectoires bien distinctes. Ce chapitre va permettre de présenter un phénomène tout-à-fait remarquable dû à la phase de la fonction d'onde des électrons : il apparaît alors, lorsque l'on applique un champ magnétique aux anneaux mésoscopiques, des courants circulant dans ces anneaux. Ceux-ci avaient été prédits dans les systèmes mésoscopiques par Büttiker et collaborateurs [1]. Ces courants sont non dissipatifs mais disparaissent dès que le champ magnétique est supprimé, c'est pourquoi ils sont nommés courants permanents.

Ainsi qu'il sera développé dans ce chapitre, on va voir l'intérêt théorique et expérimental lié à ces courants. Une présentation de la fabrication de ces anneaux sera également abordée succinctement. La dernière partie de ce chapitre est consacrée au problème de la modélisation des courants permanents.

2.1 Courant permanent : une définition théorique

Un théorème de Byers-Yang et Bloch établit que toutes les propriétés d'un système doublement connexe et traversé par un flux ϕ sont périodiques

de période $\phi_0 = h/e$, le quantum de flux [41].

Ce théorème a des conséquences notamment sur les propriétés de transport ou encore sur les niveaux d'énergie de l'anneau. Toutes les quantités thermodynamiques seront périodiques en flux, de période ϕ_0 , le quantum de flux.

Un grand nombre de travaux théoriques se sont intéressés aux propriétés des anneaux quantiques unidimensionnels [42] ou de largeur finie [43, 44]. Büttiker, Landauer et Imry ont suggéré l'existence à l'équilibre thermodynamique, de courants permanents circulant sans dissipation dans des anneaux de métal isolés [1], conséquence directe de la périodicité de l'énergie libre \mathcal{F} .

Ceux-ci résultent d'interférences constructives des fonctions d'onde et ne peuvent pas être comparés à des courants supraconducteurs mais plutôt à des courants diamagnétiques induits dans les atomes ou molécules sous l'effet d'un champ magnétique. En réalité, ce qui apparaît dans ces anneaux se rapproche beaucoup d'un moment magnétique permanent μ où $\mu = SI$ où S est la surface de l'anneau et I le courant traversant cet anneau. Lorsque l'anneau est soumis à un champ magnétique \mathbf{B} , les électrons qu'il contient sont soumis à des forces qui modifient leurs orbites ce qui induit le moment magnétique μ .

Considérons un anneau unidimensionnel de longueur L soumis à un flux magnétique ϕ . Il est symbolisé comme dans la figure 1.5 de la section 1.4.1. Supposons que nous soyons à température nulle et que le système est parfaitement cohérent. Dans un premier temps, les interactions électroniques sont négligeables et l'hamiltonien H pour un électron du système est :

$$H = \frac{(\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

avec \mathbf{P} le vecteur impulsion et $V(\mathbf{r})$ un potentiel décrivant le potentiel créé par le réseau et rendant éventuellement compte du désordre de l'anneau (défauts et impuretés). On a par ailleurs $\mathbf{A} = (\phi/L)\mathbf{e}_\theta$ où \mathbf{e}_θ est le vecteur unitaire orthoradial.

En posant $x = L\theta/2\pi$, l'hamiltonien se réécrit :

$$H = \frac{1}{2m}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + e\frac{\phi}{L})^2 + V(x). \quad (2.2)$$

La coordonnée x décrit la position de l'électron le long de l'anneau. Comme L est le périmètre de l'anneau, le potentiel est périodique et on a donc :

$$V(x + L) = V(x). \quad (2.3)$$

Par un changement de jauge $\Psi_{\Phi}(x) = \Psi \exp(2i\pi(\phi x/\phi_0 L))$ [41], on se ramène à un problème où il n'y a plus de potentiel vecteur dans l'équation de Schrödinger mais où les conditions aux limites sont changées. L'équation de Schrödinger s'écrit maintenant :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi_{\Phi}(x) = E(\Phi) \Psi_{\Phi}(x) \quad (2.4)$$

Cet hamiltonien correspond à l'hamiltonien d'un cristal spatialement périodique de période L sans champ magnétique. Le champ magnétique n'apparaît que par l'intermédiaire du flux dans les conditions aux limites de la façon suivante :

$$\Psi_{\Phi}(x + L) = \Psi_{\Phi}(x) \exp\left(\frac{i2\pi\phi}{\phi_0}\right) \quad (2.5)$$

L'effet du flux magnétique est d'imposer un facteur de phase sur la fonction d'onde. Ce problème est donc formellement similaire au problème d'un cristal unidimensionnel en ondes de Bloch avec un vecteur d'onde effectif donné par :

$$kL = 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \quad (2.6)$$

La figure (2.1) montre l'allure des énergies propres pour le cas sans désordre $V = 0$ (lignes en trait plein). Pour le cas d'un faible désordre, les dégénérescences sont levées et les niveaux d'énergie ne se croisent pas.

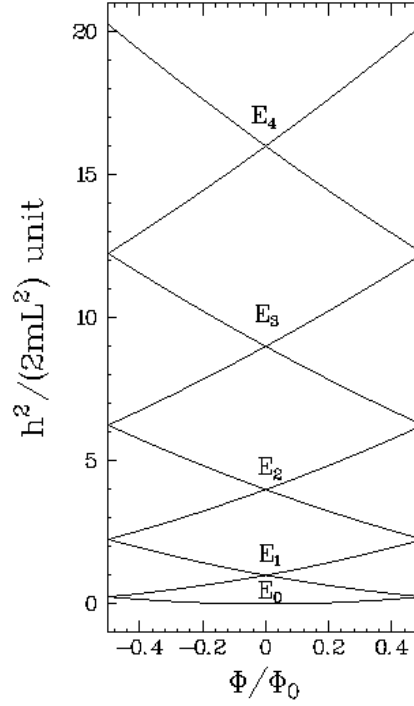


FIG. 2.1: Niveaux d'énergie de l'anneau unidimensionnel avec et sans désordre [32]. Les traits pleins représentent les niveaux d'énergie sans désordre.

Voici quelques propriétés du comportement en flux d'un échantillon mésoscopique :

- le courant transporté par un électron dans un niveau n est donné par :

$$i_n = -e \frac{v_n}{L} = -\frac{e}{\hbar L} \frac{\partial E_n}{\partial k} = -\frac{\partial E_n}{\partial \phi}$$
- les énergies propres de l'anneau sont d'une part périodiques en flux avec une période ϕ_0 et également paires en flux. Ceci implique que toutes les fonctions thermodynamiques seront paires et périodiques en flux. En particulier, le courant total circulant dans l'anneau sera impair puisque donné par : $I(N) = -\sum_{n=1}^N \frac{\partial E_n}{\partial \phi} = -\frac{\partial E}{\partial \phi}$ où N est le nombre d'électrons et E son énergie totale.

On pose $\Phi = 2\pi\phi/\phi_0$. En l'absence de désordre ($V = 0$), les valeurs

propres de l'hamiltonien $H(\Phi)$ et les courants associés sont donnés par :

$$\begin{cases} E_n &= \frac{\hbar^2}{2mL} \left[\frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 \right] \\ I_n &= -\frac{2\pi e\hbar}{mL^2} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right) \end{cases} \quad (2.7)$$

où $n = 0, -1, +1, -2, +2 \dots$. Considérons la figure 2.1, il faut additionner deux niveaux successifs d'énergie correspondant à des valeurs de n de signe opposé en fonction du nombre de particules considéré. Chaque niveau change le signe du courant.

On s'aperçoit que les courants portés par deux niveaux d'énergie successifs sont de signe opposé. Le signe du courant est donc fonction du nombre d'électrons N dans l'anneau : le courant est paramagnétique pour un nombre d'électrons pair alors qu'il est diamagnétique pour un nombre impair d'électrons. Si l'on s'intéresse au courant moyen, il faut effectuer une moyenne de ce courant en calculant $(I(N, \Phi) + I(N + 1, \Phi))/2$ ce qui conduit à :

$$\langle I(N, \Phi) \rangle = \frac{ev_F}{L} \left(\frac{1}{2} - 2 \frac{\phi}{\phi_0} \right). \quad (2.8)$$

On obtient un courant dont la période en flux est réduite de moitié par rapport au courant non moyenné. On a utilisé le fait que $Neh/(2mL^2) = ev_F/L$ qui donne l'amplitude du courant. Ce courant moyen est **paramagnétique**. Si on écrit de manière standard, le vecteur d'onde de Fermi dans un système unidimensionnel, comme $k_F = \frac{2\pi N}{2L}$, ce qui implique que $v_F = \frac{\hbar N}{2mL}$, on peut réécrire l'amplitude du courant moyen :

$$I_0 = \frac{ev_F}{L}. \quad (2.9)$$

Considérons à présent un anneau qui comporte M_{eff} canaux de conduction mais avec toujours un désordre suffisamment faible afin de rester dans un régime balistique. Pour le courant typique I_{typ} , on doit additionner les contributions non corrélées de signe variable de chacun des M_{eff} canaux conduisant à $I_{\text{typ}} = \sqrt{M_{\text{eff}}} ev_F/L$. Tout d'abord, cette moyenne sur l'ensemble des anneaux appelé aussi moyenne sur le désordre, remplace la périodicité en ϕ_0 par une périodicité en $\phi_0/2$. En ce qui concerne le courant moyen, on additionne M_{eff} composantes identiques qui sont le courant moyen porté par chacun des canaux. L'amplitude du courant moyen vaut :

$$I_0 = M_{\text{eff}} N \frac{eh}{2mL^2}. \quad (2.10)$$

Enfin, si on calcule à l'aide de l'équation (2.7) l'écart entre les deux niveaux à l'énergie de Fermi, on a $\Delta_{1D} = \hbar^2 N / (2mL^2) = \hbar v_F / L$. On peut alors exprimer l'amplitude du courant moyen à l'aide de cette énergie par :

$$I_0 = \frac{\Delta_{1D}}{\phi_0}. \quad (2.11)$$

Physiquement, Δ_{1D} représente l'énergie sur laquelle les courants permanents changent de signe. Or, par rapport au cas unidimensionnel, l'écart moyen entre niveau qui détermine l'amplitude du courant moyen est divisé par $4M_{\text{eff}}$ en raison de l'existence des différents modes transverses, entraînant le fait que le courant d'un anneau tridimensionnel est du même ordre que dans le cas strictement unidimensionnel.

En revanche, si l'on se place dans le régime diffusif, soit en présence de désordre, les différents canaux de conduction vont être couplés. L'allure du spectre d'énergie devient alors bien plus complexe que dans le cas balistique rendant l'évaluation des courants plus difficiles.

2.1.1 Expression du courant permanent

L'état fondamental sera l'objet principal de notre étude tout au long de ce travail. En effet, comme mentionné précédemment, la physique mésoscopique se trouve être une physique des basses températures, justifiant le calcul des quantités physiques à l'aide de l'état fondamental. Les états excités ne feront pas l'objet d'une étude systématique dans ce qui suit.

Je me placerai dans l'approximation $T = 0$ lors de tout le reste de ce travail et aborderai tant le problème d'électrons libres qu'en interaction ou soumis au désordre.

Rappelons-nous que le courant est relié aux variations de l'énergie totale $E(\Phi)$ par rapport au flux à travers l'anneau. Par définition, le courant à travers l'anneau s'écrit :

$$I(\Phi) = \langle \Psi_0 | j_x | \Psi_0 \rangle \quad (2.12)$$

$$j_x = -\frac{\partial H}{\partial \phi} \quad (2.13)$$

Ψ_0 désigne l'état fondamental et j_x l'opérateur du courant. De plus, nous avons :

$$\frac{\partial E(\Phi)}{\partial \Phi} = \frac{\partial}{\partial \Phi} \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle \quad (2.14)$$

puisque :

$$\frac{\partial}{\partial \Phi} \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \frac{\partial H}{\partial \Phi} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.15)$$

car, en effet,

$$\langle \Psi_0 | (\frac{\partial}{\partial \Phi} | \Psi_0 \rangle) \rangle = \langle (\frac{\partial}{\partial \Phi} \langle \Psi_0 |) | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (2.16)$$

l'état fondamental étant normalisé. Ainsi, on peut exprimer directement le courant en terme de dérivée de l'énergie totale par rapport au flux de la façon suivante :

$$I(\Phi) = \langle \Psi_0 | - \frac{\partial H}{\partial \Phi} | \Psi_0 \rangle \cdot \frac{2\pi}{\phi_0}$$

$$I(\Phi) = - \frac{\partial E(\Phi)}{\partial \Phi} \cdot \frac{2\pi}{\phi_0}. \quad (2.17)$$

Ainsi le courant est-il directement relié à la dérivée de l'énergie par rapport au flux.

2.1.2 Le poids de Drude

Pour des systèmes avec une géométrie d'anneau dans la limite des températures nulles, Kohn a montré que la conductance, une propriété de transport, et l'énergie, une propriété thermodynamique, pouvaient être reliées [6], comme on l'avait déjà présenté dans la section 1.3.3. Cette section va permettre de rappeler quelques relations valables dans le cas d'un isolant. Une quantité importante concernant ces systèmes est la conductivité optique puisque sa partie réelle nous renseigne directement sur le pouvoir d'absorption du métal.

Considérons un système électronique soumis à un champ électrique dépendant du temps. La conductivité optique dépend de la fréquence et s'écrit :

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega) \quad (2.18)$$

et l'on peut montrer que :

$$\sigma_1(\omega) = \pi D \delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega) \quad (2.19)$$

Le poids D devant le pic de Dirac mesure la contribution à fréquence nulle de la conductivité; c'est ce terme que l'on appelle le pic de Drude. σ_{reg} est

appelée partie régulière de la conductivité optique. Ce paramètre D se révèle important et est une mesure directe de la sensibilité des niveaux d'énergie aux changements dans les conditions aux limites. L'étude des courants permanents ou celle du pic de Drude nous fournit les mêmes renseignements sur la nature du système (métal ou isolant). Quant à la partie régulière, elle est donnée par la formule de Kubo [10] :

$$\sigma_{reg}(\omega) = \frac{\pi}{L} \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | j_x(\Phi_m) | \Psi_m \rangle|^2}{(E_m - E_0)} \delta(\omega - (E_m - E_0)) \quad (2.20)$$

où $|\Psi_m\rangle$ sont les états excités et E_m les énergies associées. Les différentes quantités sont évaluées à $\Phi = \Phi_m$, valeur du flux pour laquelle l'énergie est minimale.

La conductivité à fréquence nulle est un paramètre important dans la mesure où il peut servir de paramètre d'ordre pour décrire l'effet du désordre. En effet, en ce qui concerne un métal parfait, à désordre nul, le poids du pic de Drude D a une limite finie non nulle à la limite thermodynamique contrairement au cas isolant où il disparaît dans la limite thermodynamique.

D'après le théorème de Kohn et la relation de causalité de Kramers-Kronig pour la conductivité [45], le pic de Drude est donnée dans le cas unidimensionnel par l'expression suivante :

$$D = \frac{M}{2} \frac{\partial^2 E(\Phi)}{\partial^2 \Phi} \Big|_{\Phi=\Phi_m} \quad (2.21)$$

ou encore, avec le courant I :

$$D = \frac{M}{2} \frac{\partial I(\Phi)}{\partial \Phi} \quad (2.22)$$

Ces expressions se calculent lorsque l'énergie est minimale, donc en fonction de la parité du nombre d'électrons. Cette expression est valide même en présence d'interactions électroniques. Un calcul détaillé de cette expression est donné dans une des annexes de [46].

Dans le cas où l'on considère un système sans interaction ni désordre ($U = W = 0$), l'amplitude du pic de Drude est donnée par :

$$D = \frac{\pi \langle n \rangle e^2}{m} \quad (2.23)$$

avec $\langle n \rangle$ est la densité des porteurs de charges mobiles et m la masse des particules.

Il est intéressant de constater que le pic de Drude est directement connecté tant à des propriétés de transport (la conductivité) qu'à des propriétés d'équilibre (énergie minimale). Cette quantité peut ainsi permettre de connaître le comportement du courant permanent et également, de certaines quantités plus complexes de transport. C'est cette quantité D qui a été choisie pour étudier l'amplitude des courants permanents ainsi que leur signe dans la suite de ce travail. Cela va permettre de constater si une augmentation de la quantité D a lieu ou non et d'ainsi conclure que les courants permanents augmentent. Il faut préciser que la formule donnant D comme la dérivée seconde de l'énergie par rapport au flux reste valable même en présence d'interactions électroniques.

2.1.3 Ecriture du poids de Drude

Dans cette partie, on va réécrire l'expression du pic de Drude afin de le rendre très aisément calculable dans la suite de ce travail. Cette quantité va permettre d'étudier les courants permanents puisqu'elle est reliée au courant par l'équation (2.22). On sait que énergie et courant sont périodiques de période ϕ_0 . De plus, dans le régime localisé, on peut donc écrire l'énergie et le courant sous la forme suivante [45] :

$$E(\Phi) = \frac{E(0)+E(\pi)}{2} + \frac{E(0)-E(\pi)}{2} \cos \Phi \quad (2.24)$$

$$I(\Phi) = (E(0) - E(\pi)) \sin \Phi \cdot \frac{\pi}{\phi_0}. \quad (2.25)$$

La quantité suivante :

$$\Delta E = (E(0) - E(\pi)) \quad (2.26)$$

est nommée la sensibilité de phase. Cette sensibilité de phase peut s'interpréter comme la différence entre les énergies des états fondamentaux pour des conditions périodiques (à flux nul) et antipériodiques (à flux égal à π) puisque l'introduction d'un flux dans un anneau revient à changer les conditions de bord. Le signe de cette quantité dépendra de la parité du nombre de particules N dans le cas de fermions sans spin [45]. Le pic de Drude peut donc également s'exprimer simplement en fonction de cette sensibilité de phase de la façon suivante :

$$D = \frac{M}{2} \Delta E. \quad (2.27)$$

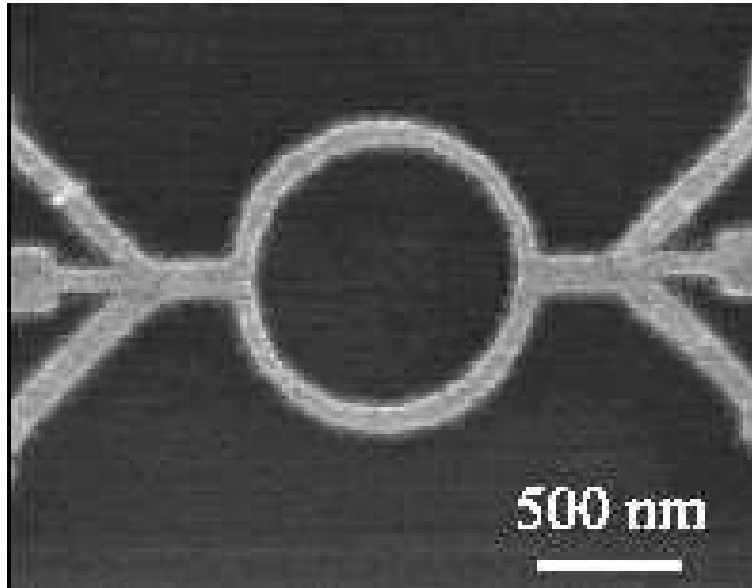


FIG. 2.2: Anneau d'or de diamètre $1\mu m$, d'épaisseur $18nm$ et de largeur $90nm$ [38].

Cette formulation va permettre de calculer le pic de Drude en déterminant à chaque fois l'énergie de l'état fondamental pour deux valeurs différentes du flux, c'est-à-dire $\Phi = 0$ et $\Phi = \pi$. En prenant la différence, on obtiendra une quantité qui se rapproche de la définition du poids de Drude et par là même, de celle du courant permanent.

2.2 De l'aspect expérimental des courants permanents

Dans la figure 2.2, on présente une image d'interféromètre à anneaux [38].

On va aborder brièvement la fabrication de ces anneaux, puis, les mesures relatives à ceux-ci.

Pour mettre en évidence les courants permanents expérimentalement, il y a deux façons de procéder : l'une consiste à faire les mesures sur un seul

anneau, ce qui nécessite un détecteur extrêmement sensible; l'autre à faire les mesures sur un grand nombre d'anneaux indépendants les uns des autres, ce qui a l'avantage de requérir moins de sensibilité mais soulève le problème de la moyenne. En effet, quel est le lien entre ce courant moyen et le courant circulant dans un seul anneau? Je présente maintenant quelques résultats sur les mesures de courants permanents qui se trouvent plus détaillés dans la revue de Eckern et Schwab par exemple [47].

2.2.1 Fabrication des anneaux

L'anneau présenté en figure 2.2 est en métal, ce qui permet d'explorer le régime diffusif. La thèse [38] décrit le procédé de fabrication de ces nanostructures en or. La technique consiste à déposer de l'or par évaporation sur un substrat très propre après y avoir creusé par lithographie la forme d'un anneau. Cette fabrication repose sur des méthodes électrochimiques. On dépose une fine couche d'or sur une membrane poreuse. On protège ensuite toute la membrane par une couche de Ni . La membrane est fixée sur un support rigide, la couche d'or au-dessus. Par lithographie, on crée un trou contact. On fixe un contact électrique puis on redépose une couche d'or sur toute la surface. Un solvant est utilisé sur la surface. De plus amples détails sur cette fabrication se trouvent dans [38].

Pour obtenir des anneaux balistiques, on peut utiliser des semiconducteurs dans lesquels le libre parcours moyen peut être nettement plus élevé.

Pour la fabrication de petites structures semiconductrices, le principe général consiste à former une *hétérostructure* en superposant deux couches de semi-conducteurs différents par épitaxie à jets moléculaires, par exemple une couche de $GaAs$ et une de $Al_xGa_{1-x}As$. A l'interface entre ces deux couches, un gaz d'électrons à deux dimensions se forme car, lorsque celles-ci se retrouvent en contact, l'énergie de Fermi du côté de $Al_xGa_{1-x}As$ est bien plus élevée que celle de $GaAs$ et un potentiel électrostatique se crée à l'équilibre. Une couche conductrice très fine est alors créée à l'interface que l'on qualifie de gaz d'électrons bidimensionnel.

C'est à partir de celui-ci que l'on peut fabriquer des nanostructures bidimensionnelles en confinant les électrons selon une géométrie voulue. De plus amples détails pour un type d'interféromètres à anneaux donné peuvent être trouvés dans [12].

La technique dite de lithographie, très utilisée dans le domaine de la phy-

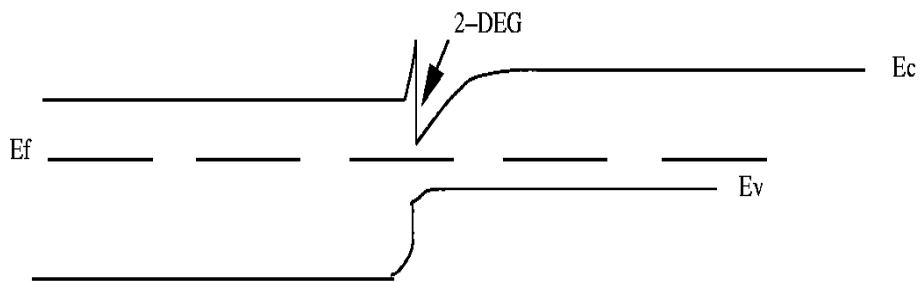
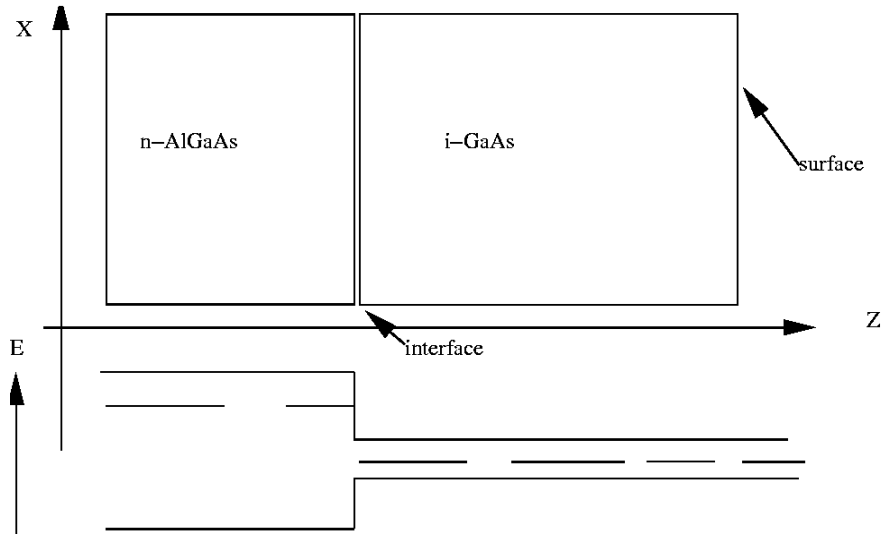


FIG. 2.3: D'après [9]. Allure de la bande de conduction et de valence à l'interface entre AlGaAs et GaAs avant puis après que le transfert de charge ait eu lieu.

sique mésoscopique permet d'atteindre des dimensions inférieures au micron. Une couche de résine organique est tout d'abord déposée sur le substrat que l'on peut attaquer par un flux d'électrons créé par un microscope électronique à balayage. Les régions creusées par ce flux peuvent être enlevées par un solvant approprié et, après révélation, on obtient ainsi la structure souhaitée, en l'occurrence, un anneau dans notre cas.

2.2.2 Mesure des courants sur un grand nombre d'anneaux

Cette expérience a été réalisée en 1990 par Lévy *et al* [3]. Ils ont mesuré l'aimantation totale de $N_{An} = 10^7$ anneaux de cuivre isolés et un courant de l'ordre de e/τ_D , τ_D étant le temps de diffusion, ce qui représente un ordre de grandeur plus grand que les prédictions théoriques. Ces expériences ont été réalisées dans des conditions telles que $L < l_\Phi$ et c'est l'aimantation totale moyenne $\langle m_B \rangle$ que l'on a mesurée. On a :

$$\langle m_B \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mu_k \quad (2.28)$$

où $\mu_k = SI_k$, I_k est le courant du k-ième anneau et S sa surface. $\langle m_B \rangle$ correspond à un courant moyen :

$$\langle I \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N I_k. \quad (2.29)$$

Une des caractéristiques de ce courant moyen réside dans sa périodicité en $\phi_0/2$ comme on l'attend pour une quantité moyennée. Dans le cas d'un échantillon connecté, le système étant relié à un réservoir de particules, sa description se fait naturellement dans l'ensemble statistique grand-canonique pour lequel le potentiel chimique est fixé. Par contre, quand on considère un système isolé, le nombre de particules y est, par définition, fixe et cela correspond à l'ensemble canonique. Cette distinction n'est pas cruciale pour un échantillon macroscopique puisque dans la limite thermodynamique, les résultats dans l'ensemble grand canonique et canonique donnent les mêmes résultats. Toutefois, avec des échantillons non-connectés, possédant un nombre relativement peu important d'électrons, cette égalité n'a plus lieu d'être. On

doit donc réaliser la distinction entre ensembles statistiques, canonique ou grand-canonique. Le cas canonique correspond à un système avec un nombre fixé de particules et donc un potentiel chimique qui va s'ajuster en fonction des paramètres, en particulier le flux magnétique, pour maintenir le nombre de particules constant. Montambaux, Bouchiat et collaborateurs ont montré que dans le cas d'électrons libres, et en considérant que le nombre d'électrons est fixe dans chaque anneau, la moyenne des courants sont bien périodiques de période $\phi_0/2$ [48, 49]. Les harmoniques impaires sont supprimées par les effets de moyenne sur le nombre de particules ou sur le désordre et l'amplitude du courant moyen est :

$$\langle I_{th} \rangle = \sqrt{\frac{l_e}{M_{eff}L}} I_0. \quad (2.30)$$

Ils ont estimé ce courant à $\langle I_{th} \rangle \ll I_0$. Ce courant est environ 50 fois plus faible que la valeur expérimentale.

2.2.3 Mesure des courants dans un seul anneau

Deux expériences concernant la mesure des courants dans un seul anneau isolé ont été réalisées.

La première, réalisée par Chandrasekhar *et al* à IBM [2]. La mesure de I a été faite sur un anneau d'or dans le régime diffusif. La périodicité de I était de ϕ_0 ce qui correspond à ce qui était escompté pour un seul anneau. La période est en effet doublée par rapport à une moyenne sur tous les anneaux. Cependant, l'amplitude des courants est de l'ordre de I_0 alors que l'on s'attendrait, dans le régime diffusif et, en faisant abstraction des interactions électroniques, à mesurer $I \approx I_D = \frac{e}{\tau_D}$. Les calculs théoriques prédisent une valeur $I_D \approx 10^{-2}I_0$, soit cent fois inférieures à la valeur mesurée.

La seconde expérience a été effectuée par Mailly *et al* sur des anneaux semi-conducteurs de GaAs/GaAlAs [51]. Comme lors de l'expérience précédente, la période était de ϕ_0 et l'amplitude mesurée était de l'ordre de $I_{typ} \approx I_0$. Cette fois, le système était quasiment balistique.

Depuis lors, d'autres mesures de courants permanents ont été effectuées [54, 53] et également dans les nanotubes de carbone [52].

Ce problème d'ordre de grandeur entre théorie et expérience est l'essentiel objet de ce travail et sera développé par la suite. On vient de constater que les

amplitudes des courants mesurés expérimentalement sont dans des anneaux diffusifs très supérieurs aux valeurs théoriques.

2.3 Modélisation du système

Depuis que Büttiker et collaborateurs ont prédit l'existence de ses courants permanents dans les anneaux mésoscopiques [1], plusieurs expériences ont permis de confirmer l'existence de ce phénomène [51, 52, 53, 54] autre que les deux expériences présentées précédemment [3, 2].

Les théories analytiques sans interaction ont permis de rendre compte qualitativement du comportement des courants permanents [50, 49, 48, 60, 57, 58, 59], mais pas de l'amplitude de ces courants. Les calculs analytiques sur ces modèles ne tenant pas compte des interactions donnent un ordre de grandeur pour le courant permanent qui est plus de deux fois inférieur aux résultats expérimentaux en régime diffusif [47].

Le problème central se trouve donc être la différence importante qui existe entre résultats théoriques et expérimentaux comme on l'a évoqué auparavant dans ce chapitre.

Ainsi, on pourrait penser que l'introduction des interactions électroniques pourrait résoudre ce problème d'ordre de grandeur.

Des travaux basés sur la théorie diagrammatique ont montré que l'introduction des interactions électroniques dans des systèmes quantiques désordonnés modifiaient leurs propriétés de transport [55]. Malgré une augmentation conséquente des courants permanents calculés en tenant compte des interactions d'une façon perturbative [56], ou en tenant compte d'arguments basés sur la statistique de niveaux [63], ceux-ci sont toujours largement inférieurs aux valeurs expérimentales. Ces études pourtant approfondies ne permettent toujours pas de rendre compte de l'amplitude observée des courants permanents en trois dimensions. En trois dimensions, des calculs numériques ont montré que les courants permanents sont augmentés en présence d'interactions électroniques [64].

Cependant, en une dimension, l'introduction des interactions électroniques dans un système avec faible désordre ne mène pas à une augmentation des courants permanents [93], comme il sera évoqué dans le chapitre 3.

Autre que l'interaction électron-électron, un autre facteur important dont on doit tenir compte dans les anneaux mésoscopiques est le **désordre**, qui exprime l'existence d'impuretés, de lacunes et de défauts. Une fois de plus,

ne considérer que le désordre nous ramène à la théorie d'Anderson qui sera explicitée plus avant lors du chapitre suivant 3 dans la section 3.2. En voici un bref aperçu.

En 1958, Anderson a souligné [94] le fait que la fonction d'onde dans un potentiel aléatoire peut être profondément altérée par ce même potentiel s'il est suffisamment fort. La diffusion par un potentiel aléatoire fait perdre à la fonction d'onde électronique le caractère d'ondes de Bloch sur une échelle de longueur qui est le libre parcours moyen l_e . Néanmoins, la fonction d'onde peut rester étendue à travers l'échantillon.

Anderson démontra que si le désordre est assez fort, la fonction d'onde devient localisée, et son enveloppe décroît exponentiellement de cette façon :

$$|\Psi(\mathbf{r})| \sim \exp \frac{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{\xi} \quad (2.31)$$

où \mathbf{r} est le vecteur position par rapport à \mathbf{r}_0 et ξ est la longueur de localisation.

L'introduction de désordre dans le système conduit à la présence d'états localisés, c'est-à-dire que la fonction d'onde des états est restreinte à une région donnée de l'espace. En fait, la fonction d'onde s'étend sur une distance qui est la longueur caractéristique ξ . Cette localisation n'a lieu que pour de forts désordres en trois dimensions, tandis que, en une et deux dimensions, le moindre désordre mène à une localisation de la fonction d'onde. Ces systèmes sont alors des *isolants*. On verra dans le chapitre 3 que le désordre est responsable d'une transition métal-isolant en trois dimensions. Le paramètre qui est le désordre mène donc à une localisation et ne permet pas d'expliquer à lui seul la valeur élevée des courants permanents.

La tâche afin d'appréhender la différence d'ordre de grandeur entre théorie et expérience consiste à considérer à la fois les interactions électrons-électrons et le désordre. Cependant, ce problème se révèle très difficile et demande de recourir à des simplifications. On se reportera à l'article d'Eckern et Schwab pour plus de détails [47].

Afin de simplifier encore le problème, on peut considérer un modèle sur réseau unidimensionnel.

Notamment, des travaux effectués sur des systèmes contenant peu de sites [61, 65, 46] grâce à la diagonalisation exacte ou en utilisant l'approximation de Hartree-Fock [66, 67], ou encore en incluant des interactions à longue portée [62] : ces études montrent que les interactions répulsives ont tendance à supprimer les courants permanents lorsque le désordre n'est pas trop fort. Récemment, il a été montré que des interactions répulsives en présence de

fort désordre peuvent conduire à une faible augmentation des courants permanents [5, 7]. L'introduction du spin dans la description de ce problème a été abordée par le biais de la bosonisation qui a montrée que des interactions même modérées peuvent augmenter le courant permanent [4]. D'autres travaux numériques montrent qu'une augmentation peut se produire en dehors du demi-remplissage, pour des systèmes très faiblement désordonnés [70, 71].

Le but de ce travail est d'utiliser un modèle incluant le spin, les interactions électroniques et le désordre. Ce modèle sera présentée dans le chapitre 3. L'influence de ces paramètres sera discutée dans les chapitres 5 et 6.

2.4 Conclusion

Ce chapitre a permis d'introduire les courants permanents et commenter les mesures expérimentales. On a vu que celles-ci avaient été faites sur différents matériaux (métal et semi-conducteur) et pour des configurations différentes (mesure sur un anneau individuel et un ensemble d'anneaux). On a également abordé la technique de fabrication de ces anneaux mésoscopiques. Malgré de nombreuses approches théoriques pour comprendre la valeur des courants permanents, aucune ne permet de décrire correctement les résultats expérimentaux.

La modélisation de ce problème étant très délicate, notre approche consiste à utiliser la quantité D , la raideur de charge, qui relie les courants permanents à la conductivité optique, c'est-à-dire les propriétés de transport et celles d'équilibre. Le calcul numérique de celle-ci est possible et va permettre de déterminer le comportement des courants permanents. En utilisant le modèle d'Hubbard-Anderson qui combine désordre et interaction, on calculera D et on pourra conclure sur les courants permanents.

Dans le chapitre suivant, le modèle de Hubbard-Anderson employé va être développé afin d'en étudier ses particularités et de voir dans quelle mesure il peut servir à la description des courants permanents.

Chapitre 3

Modèles de Hubbard et d'Anderson

Le chapitre précédent a permis de positionner le problème de la description des courants permanents et de motiver le choix d'un modèle qui permet d'étudier les effets de la présence simultanée de désordre et d'interactions sur ce phénomène. Il s'agit maintenant de présenter le modèle et ses propriétés connues.

Le modèle que nous avons choisi afin de tenir compte des effets d'interaction et de désordre est le modèle de Hubbard auquel on a rajouté un terme de désordre aléatoire sur site. Pour un système unidimensionnel, ce modèle, nommé modèle de Hubbard-Anderson, s'écrit en seconde quantification comme suit :

$$H = H_K + H_W + H_U \quad (3.1)$$

avec :

$$H_K = -t \sum_{i=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right), \quad (3.2)$$

$$H_W = W \sum_{i=1}^M \sum_{\sigma} v_i n_{i,\sigma} \quad (3.3)$$

et

$$H_U = U \sum_{i=1}^M n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (3.4)$$

M désigne le nombre de sites, i étant l'indice des sites. Le spin est représenté par la variable notée σ .

Le premier terme H_K est le terme d'énergie cinétique ou de saut; il décrit le saut entre plus proches voisins caractérisé par le paramètre t , que nous prendrons comme unité d'énergie dans les calculs numériques dans les chapitres 5 et 6 et qui représente l'amplitude de probabilité pour un électron de sauter d'un site vers son voisin, permettant ainsi le déplacement des électrons le long de l'anneau. Les opérateurs $c_{i\sigma}^+$ et $c_{i\sigma}$, respectivement, créent et annihilent un électron de spin σ dans l'état de Wannier centré autour du site i .

Le second terme H_W représente le désordre sur site. Le désordre (relié à la concentration d'impuretés) est modélisé par des fluctuations d'amplitude W de l'énergie Wv_i sur site, où les v_i sont des nombres aléatoires $v_i \in [-1/2, 1/2]$. L'opérateur de nombre de particules sur site i est défini par $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$.

Le troisième terme H_U est le terme d'interaction sur site. Si deux électrons (avec spin up et spin down) se trouvent sur le même site i , leur répulsion se manifeste par le biais de l'énergie coulombienne U . L'interaction choisie est donc une interaction sur site alors qu'il est admis que les interactions entre électrons dans un solide sont dues à la force de Coulomb électrostatique qui, dans le vide, est une force à longue portée. Afin de justifier l'approximation d'une interaction à courte portée, on peut considérer que la force de Coulomb est écrantée par les électrons autour et ceux placés dans les autres orbitales qui ont été négligées.

On considère ainsi un modèle sur réseau : le cas d'un anneau unidimensionnel désordonné contenant M sites avec N électrons en interaction. L'anneau est symbolisé comme dans la figure 3.1.

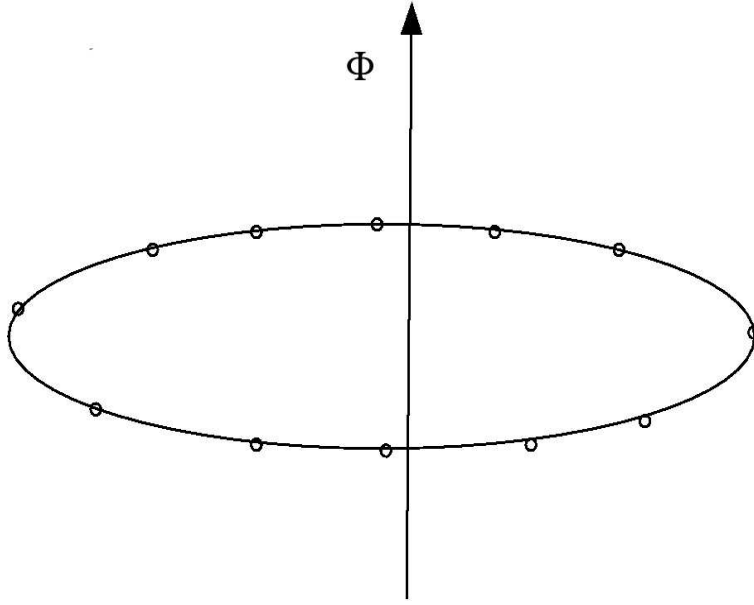


FIG. 3.1: Schéma d'un anneau unidimensionnel traversé par un flux ϕ perpendiculaire à la surface de l'anneau. Les cercles vides symbolisent les sites sur lesquels les électrons viendront se placer.

Utiliser une modélisation plus “complète” (modèle de Hubbard-Anderson) peut se révéler très riche puisque l'interaction ainsi que les défauts seront considérés et traités. Le principal intérêt est de considérer les phénomènes se produisant lorsque désordre et interaction sont présents simultanément. Traiter désordre et interaction sur un même pied d'égalité se révèle être un problème très compliqué, comme il a été évoqué dans le chapitre 2. En effet, le système n'est pas intégrable analytiquement et il n'est pas envisageable de se référer à des méthodes perturbatives ou de type champ moyen, puisque les fluctuations quantiques sont prépondérantes dans les systèmes unidimensionnels.

Le modèle choisi dans ce travail nous oblige à recourir à l'instrument numérique. La difficulté du traitement numérique réside dans le fait que la dimension de l'espace de Hilbert du système considéré croît exponentiellement avec la taille de ce système. De plus amples détails quant à ce problème seront développés dans le chapitre 4 consacré à la méthode *DMRG*.

Dans ce chapitre, nous allons étudier quelques limites de ce modèle, notamment, le modèle de Hubbard, lorsque $W = 0$, soit en l'absence de désordre, et le modèle d'Anderson, en l'absence d'interaction ($U = 0$). On présentera quelques propriétés de ces modèles. On verra que ces modèles permettent de décrire certains systèmes de la matière condensée, c'est pourquoi ils sont devenus très utilisés dans ce domaine, puisqu'ils engendrent donc une compréhension approfondie et font figure de précurseur et de base pour des modèles plus réalistes.

L'hamiltonien de Hubbard comporte des ingrédients qui peuvent mener à de nombreux phénomènes comme le ferromagnétisme, le ferrimagnétisme. Malgré tout, celui-ci est l'objet de simplifications importantes qui peuvent être justifiées sous certaines conditions [72], notamment les interactions de Coulomb à courte portée, évitant ainsi la complexité des interactions à longue portée qui engendrent un effet d'écrantage.

Le modèle de Hubbard est un modèle de liaisons fortes tenant compte des interactions. Cependant, certaines de ces interactions sont laissées pour compte dans le modèle : les termes directs V et les termes d'échange entre les électrons sur des sites différents. Il faut préciser que ces interactions V entre sites ne sont pas forcément plus faibles que les amplitudes de probabilité de saut t_{ij} entre les sites i et j et, de plus, ces interactions, lorsqu'elles sont peu écrantées, ne décroissent pas rapidement avec la distance; il n'est donc pas justifiable de les négliger. Néanmoins, celles-ci couplent les fluctuations de charge et non celles de spin [72]. On peut donc considérer que ce terme, au voisinage de transitions magnétiques, contribue de façon peu significative à l'énergie libre et ne se révèle pertinent que dans le cas d'instabilité de densité de charge.

3.1 Modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard s'écrit [73, 74] :

$$H = H_K + H_U \tag{3.5}$$

L'hamiltonien de Hubbard ne tient en compte que le terme d'interaction, (H_U), et celui de saut, (H_K). Celui-ci donne une description quantique qui inclut le mouvement des électrons sur réseau et leurs interactions.

Le modèle de Hubbard est un modèle à N corps que l'on ne peut pas réduire à un modèle à un seul corps. En conséquence, des résultats exacts

sont seulement connus pour le cas unidimensionnel [75, 76]. Les diverses méthodes pour résoudre le cas unidimensionnel sont variées et parmi elles, on compte entre autre, l'Ansatz de Bethe [77], la bosonisation [78], et les méthodes du groupe de renormalisation [79]. Malheureusement, celles-ci ne sont efficaces qu'à une dimension et ne peuvent se généraliser à deux ou trois dimensions. Toutefois, de considérables progrès ont été effectués dans ce domaine [80]. Depuis son introduction par Hubbard [81, 82], ce modèle est utilisé dans de nombreux travaux et de nouvelles méthodes à N corps sont développées et appliquées au modèle de Hubbard et donnent lieu à une multitude de résultats intéressants [72].

Pour une revue sur le modèle de Hubbard, on pourra se référer à la revue d'Andrei [83].

3.1.1 Quelques cas limites du modèle de Hubbard

Cette partie est consacrée à l'étude de certaines propriétés du modèle de Hubbard qui nous serviront dans la suite de ce travail, notamment des cas limites pour lesquelles existent des résultats exacts.

Dorénavant, on va aborder quelques cas limites qui vont permettre des conclusions exactes et quelques vérifications.

La limite des interactions nulles

Dans la limite $U = 0$, le modèle de Hubbard décrit des électrons sur un réseau. Ils forment *un gaz de Fermi*. Le problème est réduit à un modèle de liaisons fortes à un électron. Les électrons sont décrits par des ondes planes définies par leur vecteur d'onde \mathbf{k} . Une fois l'équation de Schrödinger pour un seul électron résolue, les états propres de l'hamiltonien à plusieurs corps sont donnés par les déterminants de Slater bâtis à partir des états à un corps. L'état fondamental correspond à l'état où les électrons sont placés dans les états à une particule qui ont les énergies les plus basses, avec spin up et down comme on le voit dans la figure 3.2.

Ce type de systèmes est illustré ainsi :

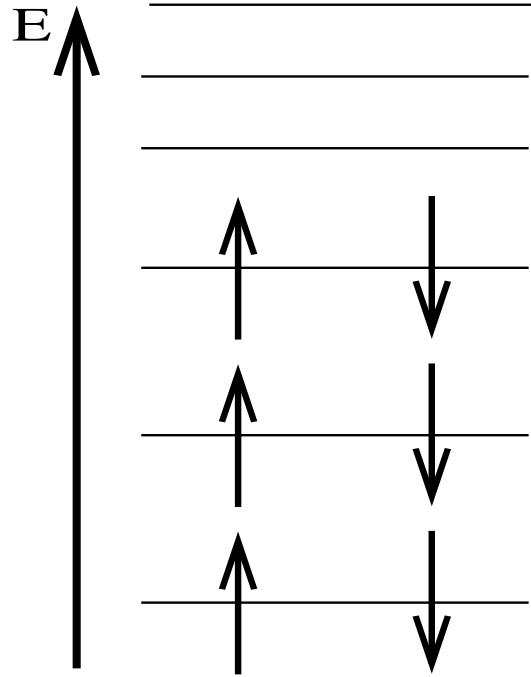


FIG. 3.2: Représentation schématique du remplissage des $N/2$ niveaux d'énergie les plus bas du système avec N électrons sans interaction. D'après [84].

La limite atomique

Dans le cas $t = 0$, les électrons ne peuvent pas sauter d'un site à l'autre. Ils restent liés à un ion précis dans un état atomique. Cette *limite atomique* a déjà été étudiée par Hubbard lui-même [81]. Comme tout mouvement des électrons est supprimé, le modèle se comporte comme un isolant. L'hamiltonien ne comprend que la partie des interactions H_U . Dans le cas correspondant à des interactions répulsives $U \geq 0$, l'état fondamental pour un nombre donné N d'électrons s'obtient en distribuant les électrons parmi les M sites tel que le nombre de sites doublement occupés est minimisé. Lorsque $N \leq M$, aucun site ne sera doublement occupé et l'état fondamental est d'énergie nulle. Lorsque $N \geq M$, le fondamental correspond à $N - M$ sites doublement occupés et $2M - N$ sites comportant un seul électron. Par exemple, on aura pour un système de quatre électrons (deux électrons avec spin up

et deux avec spin down) sur trois sites un état de base constitué comme il est montré dans la figure 3.3, et qui est toujours dégénéré avec d'autres configurations qui comportent un site doublement occupé.

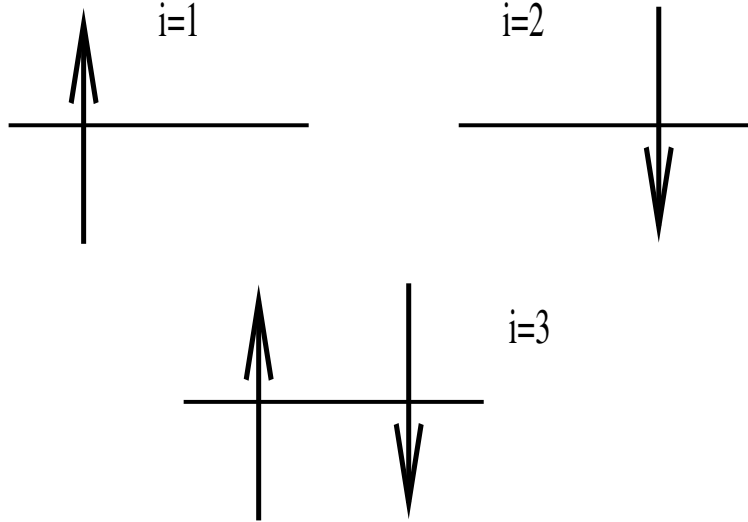


FIG. 3.3: Exemple d'arrangement de quatre électrons sur trois sites dans la limite atomique.

Dans tous les cas, le fondamental est dégénéré. A la dégénérescence des différentes configurations de charge s'ajoute celle des configurations de spin des sites simplement occupés.

La limite des très fortes interactions $U \gg t$

Contrairement à la limite atomique, dans la limite $t/U \rightarrow 0$ avec $t \neq 0$, un électron peut toujours se déplacer à condition que le saut ne modifie pas l'énergie d'interaction.

Prenons la partie de l'hamiltonien qui tient compte des interactions H_U . Les états propres de H_U sont des états de Fock $|\Psi\{n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}\}\rangle = \Pi_i \left(c_{i,\uparrow}^\dagger\right)^{n_{i,\uparrow}} \left(c_{i,\downarrow}^\dagger\right)^{n_{i,\downarrow}} |0\rangle$ avec $n_{i,\uparrow(\downarrow)} = 1$ si le site i est occupé par un électron de spin \uparrow (\downarrow) et $n_{i,\uparrow(\downarrow)} = 0$ sinon, dans la représentation de Wannier. Pour des remplissages inférieurs ou égaux au demi-remplissage ($N \leq M$), l'espace de Hilbert généré par ces états

propres peut être subdivisé en deux sous-espaces :

$$\mathcal{S} = \{ |\Psi\{n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}\}\rangle \mid n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} \leq 1 \forall i \} \quad (3.6)$$

$$\mathcal{D} = \{ |\Psi\{n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}\}\rangle \mid \exists i \ni n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} = 2 \} \quad (3.7)$$

\mathcal{D} contient les états dans lesquels au moins un site est doublement occupé et \mathcal{S} est l'espace de toutes les configurations avec zéro ou un électron sur tous les sites. L'énergie des états de \mathcal{S} est nulle tandis que celle des états dans \mathcal{D} est $n_d U$, avec le nombre de sites doublement occupés n_d .

Dans la limite $t/U \ll 1$, le terme de saut H_K peut être considéré comme une perturbation par rapport à H_U qui couple les états de base entre eux par des éléments de matrice qui sont de l'ordre $-t$. Ceci lève une partie des dégénérescences à l'intérieur de ces sous-espaces. En plus, H_K couple \mathcal{S} à \mathcal{D} .

Si l'on s'intéresse aux propriétés à énergie faible, dans la limite $t/U \ll 1$, on peut négliger les couplages faibles entre les états \mathcal{S} et \mathcal{D} (qui sont séparés en énergie par U) et se restreindre à la considération du sous-espace \mathcal{S} qui est le plus bas en énergie.

Hors demi-remplissage, les électrons peuvent sauter d'un site à l'autre sans coûter d'énergie d'interaction. Par contre, lorsque l'on a exactement une particule par site ($N = M$), la mobilité des électrons est supprimée par l'écart énergétique U entre les états \mathcal{S} et \mathcal{D} , et on obtient un comportement isolant dans la limite thermodynamique. Cette situation est connue sous le nom d'"isolant de Mott" [85].

Le premier effet du couplage entre les états \mathcal{S} et \mathcal{D} apparaît au deuxième ordre en t et résulte de processus dans lesquels un électron saute sur un site voisin (occupé par un électron de spin opposé). Ensuite, un des deux électrons retourne au site initial (voir la figure 3.4). Ceci mène à un terme de couplage effectif antiferromagnétique entre spins voisins égal à $J = 4t^2/U$ qui est l'énergie mise en jeu lors de l'échange entre les deux électrons.

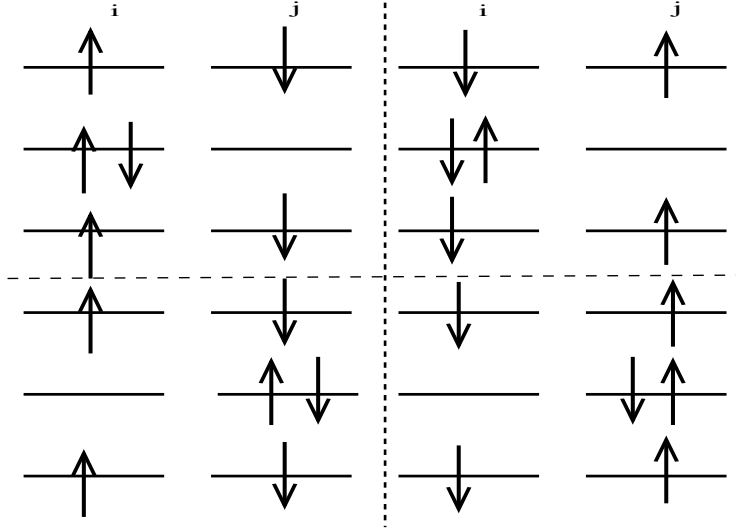


FIG. 3.4: Exemple de sauts entre deux sites pour des électrons de spin opposé menant à des corrections de deuxième ordre en t .

Dans le cas d'une particule par site ou isolant de Mott, on peut ainsi obtenir un hamiltonien effectif pour les degrés de liberté de spin, qui correspond au modèle de Heisenberg

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.8)$$

pour un réseau de spins. Ici, les \mathbf{S}_i sont les opérateurs de spin 1/2 sur site i . Pour $J > 0$, son fondamental présente des corrélations antiferromagnétiques.

Il est intéressant de constater qu'entre les deux limites $U = 0$ et $U \rightarrow \infty$, le système passe d'un gaz d'électrons libres à un isolant antiferromagnétique : une transition métal-isolant accompagnée d'une transition magnétique doit avoir lieu pour une certaine valeur critique U_c . Cependant, Lieb et Wu ont démontré qu'aucune transition de phase ne se produisait en une dimension [75, 76], le système étant un isolant pour toutes les valeurs de $U > 0$. En revanche, elle existe pour des dimensions supérieures [86, 87]. Notre problème se situera en une seule dimension et tout le chapitre 7 sera consacré à cette limite d'interactions fortes en dimension un. Cependant, le modèle étudié sera celui de Hubbard-Anderson où le désordre est aussi pris en compte.

3.1.2 Les symétries de l'hamiltonien de Hubbard

Pour comprendre les propriétés d'un système, il est toujours utile de considérer ses symétries. Un examen systématique des propriétés d'invariance que peut posséder la loi d'évolution d'un système physique par rapport à certaines transformations permet de déduire des conséquences importantes pour son comportement.

Quelques généralités sur les invariances

De nombreuses références traitent de ce problème (par exemple [34]). Considérons un groupe de transformations \mathcal{G} constitué de l'ensemble G des opérateurs linéaires T_i avec une opération de composition qui vérifie les propriétés du groupe. Le fait qu'une observable est invariante par rapport aux transformations du groupe s'exprime par la condition $T_i Q T_i^\dagger = Q \forall T_i \in G$, où Q est l'opérateur correspondant à l'observable. Cette condition peut s'écrire comme :

$$[Q, T_i] = 0 \quad (3.9)$$

Admettons que l'hamiltonien H soit invariant par rapport aux transformations du groupe \mathcal{G} . On a alors $[H, T_i] = 0$ pour tout opérateur T_i de G . Ces opérateurs forment avec H un ensemble d'opérateurs qui peuvent être simultanément diagonalisés. Les symétries continues de l'hamiltonien entraînent l'existence de lois de conservations. Pour toute observable qui ne dépend pas explicitement du temps et qui commute avec H , la loi suivante peut être énoncée : *Soit H un hamiltonien invariant par les transformations d'un groupe. Alors toute observable fonction des opérateurs de ce groupe est une constante du mouvement.* Voici deux lois de conservation courantes :

1-l'invariance par translation et conservation de l'impulsion totale : dans le cas où l'hamiltonien est invariant par translation, il faut et il suffit qu'il soit invariant par les translations infinitésimales : $[H, P] = 0$ et P est l'opérateur de l'impulsion totale du système, et le générateur des translations.

2-l'invariance par rotation et conservation du moment cinétique : $[H, J] = 0$, avec l'opérateur du moment cinétique J qui génère les rotations.

L'invariance qui va nous être utile dans la suite sera la 2- qui correspond à l'invariance par rotation et caractérisera notre problème. Les systèmes que

l'on considérera sont invariants par rotation dans l'espace des spins, selon la direction z . On aura alors $[H, \hat{S}_z] = 0$.

Comme nous le discutons dans le chapitre suivant 4, cette symétrie nous permettra de limiter l'espace de Hilbert dans lequel on va chercher les valeurs propres. En effet, des observables qui commutent possèdent une base commune et les états propres s'obtiendront en diagonalisant les matrices de l'hamiltonien correspondant à une valeur propre de \hat{S}_z .

Les symétries du modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard que nous considérons ici conserve le spin total, sa projection sur l'axe (Oz) ainsi que le nombre de particules :

$$[H, (\mathbf{S})^2] = [H, \hat{S}_z] = [H, \hat{N}] = 0 \quad (3.10)$$

où H est l'hamiltonien de Hubbard et :

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i \quad (3.11)$$

$$\hat{N} = \sum_i n_i. \quad (3.12)$$

Le spin total est égal à la somme des spins sur les sites du réseau et le nombre total d'électrons est donné par la somme des nombres d'occupation sur les sites de ce même réseau.

De surcroît, ces opérateurs commutent également c'est-à-dire :

$$[\mathbf{S}^2, \hat{S}_z] = [\hat{S}_z, \hat{N}] = [\hat{N}, \mathbf{S}^2] = 0, \quad (3.13)$$

et les valeurs propres de \mathbf{S}^2 , \hat{S}_z et \hat{N} sont donnés par $S(S+1)$, S_z et N respectivement, ce qui permet de définir les bons nombres quantiques du système considéré à partir des opérateurs \mathbf{S}^2 , \hat{S}_z et \hat{N} . Le traitement numérique de ce modèle recherche les états propres de H parce-que l'on peut traiter les sous-espaces de l'espace de Hilbert qui correspondent aux différentes valeurs des nombres quantiques. Pour ce faire, la base choisie doit être telle que les états de base sont des états propres des opérateurs de symétrie, et que la représentation des opérateurs de symétrie est diagonale. Dans notre cas, une base d'états propres de la projection du spin total dans la direction z , soit S_z , sont facilement calculables; seul S , le nombre quantique lié au spin total, est bien plus difficile à utiliser. Nous choisissons l'axe z comme axe de quantification de façon arbitraire et effectuons la diagonalisation dans des secteurs à S_z et N fixes, sans restriction pour S .

L'énergie totale E peut dépendre du spin total S , mais pas de sa projection S_z qui peut adopter les valeurs $-S, -S + 1, \dots, S$. Si l'on note $E(S_z)$ l'énergie de l'état fondamental dans le secteur spécifié par la projection du spin S_z , et si l'on a $E(S_z) < E(S_z + 1)$ et $E(S_z) = E(S_z - 1) = \dots = E(S_z^{min})$, on peut conclure que l'état fondamental de l'espace de Hilbert complet, non restreint à un S_z spécifique, est un état de spin $S = S_z$.

Quelques modèles d'électrons sur réseau présentent une symétrie particule-trou [88]. Cette symétrie relie la création d'un électron à sa destruction de la façon suivante :

$$c_{i,\sigma} \rightarrow (-1)^i c_{i,\sigma}^\dagger \quad (3.14)$$

Suite à cette transformation, les termes de saut se transforment selon :

$$c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + h.c. \rightarrow -c_{i,\sigma} c_{i+1,\sigma}^\dagger + h.c. = c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + h.c. \quad (3.15)$$

et l'on constate que ceux-ci restent inchangés sous cette transformation.

Les opérateurs nombre deviennent alors :

$$n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \rightarrow c_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger \quad (3.16)$$

$$= 1 - c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \quad (3.17)$$

$$= 1 - n_{i,\sigma} \quad (3.18)$$

En sommant sur les spins up et down, on obtient :

$$n_i \rightarrow 2 - n_i \quad (3.19)$$

et le nombre de total de particules se transforme en :

$$\hat{N} \rightarrow 2M - \hat{N} \quad (3.20)$$

En appliquant les mêmes transformations aux opérateurs de spin, on constate également une rotation de ceux-ci [88].

Si la symétrie particule-trou s'applique pas seulement à la partie cinétique mais également à la partie interaction, il y aura une bijection entre les états propres avec les nombres quantiques (E, S, S_z, N) et $(E, S, -S_z, 2M - N)$.

En conséquence, afin de déterminer les propriétés d'un système hors demi-remplissage, seule l'étude en-dessous du demi-remplissage est nécessaire et permet de connaître la physique du système au-dessus du demi-remplissage.

3.1.3 Le modèle de Hubbard en une dimension

Le modèle de Hubbard en une dimension a été résolu par Lieb et Wu en 1968 [75]. Les calculs détaillés de cette solution sont donnés dans un article paru en 2002 [76]. La résolution de ce modèle repose sur l'Ansatz de Bethe [77] qui a été développé initialement pour résoudre la chaîne de Heisenberg avec des interactions aux plus proches voisins. De nombreux travaux (voir par exemple [89, 91, 92]) traitent de cet Ansatz de Bethe et l'on pourra s'y référer pour de plus amples explications.

En 1931, la méthode a été développée par Bethe afin de traiter analytiquement la chaîne de spins 1/2 de Heisenberg. Elle permet d'obtenir les énergies, l'état fondamental ainsi que les états excités de façon exacte [77, 89].

L'Ansatz consiste à écrire toute fonction propre comme une superposition d'ondes planes. Les termes d'interaction mènent à un couplage de ces ondes, ce qui mène à un ensemble d'équations qui permettent de déterminer les coefficients.

L'Ansatz de Bethe a été adapté avec succès à d'autres systèmes (Kondo, modèles sur réseau) [90]. Bien que les valeurs et vecteurs propres d'un système petit puissent être obtenus grâce à la diagonalisation directe, l'Ansatz de Bethe offre deux importants avantages : tous les états propres sont caractérisés par un jeu de nombres quantiques qui peut être utilisé pour les distinguer selon des propriétés physiques spécifiques. Dans beaucoup de cas, les valeurs propres ainsi que les propriétés physiques qui en sont dérivées peuvent être évaluées dans la limite thermodynamique ce qui n'est pas possible par diagonalisation directe.

On peut traiter de la même façon le modèle de Heisenberg antiferromagnétique : tous les vecteurs propres restent similaires à ceux trouvés dans le cas ferromagnétique mais les signes sont changés. Ceci modifie fondamentalement les propriétés physiques du système.

Une généralisation de l'Ansatz de Bethe s'applique au modèle de Hubbard unidimensionnel. La solution de ce modèle a déjà été mentionnée précédemment [75, 76].

L'état fondamental y est calculé et il est démontré qu'**il n'existe pas de transition de Mott en une dimension**. Cela veut dire que **le système à demi-remplissage est un isolant dès que $U > 0$** . On peut donc s'attendre à ce que les courants soient faibles dans les anneaux. On verra par la suite que l'interaction fait décroître le courant permanent dans les anneaux sans désordre.

Il faut préciser qu'en une dimension, des fermions ou électrons soumis à une interaction ne se comportent plus comme un liquide de Fermi mais comme un liquide de Luttinger. Ceux-ci présentent des propriétés complètement différentes des liquides de Fermi, notamment la séparation spin-charge [92].

On peut utiliser le liquide de Luttinger comme moyen de modéliser les courants permanents en une dimension [93]. Ceci sera un excellent point de comparaison lorsque le programme employé devra être testé.

Il faut retenir ici que l'interaction seule ne peut donc pas être responsable d'une augmentation des courants permanents, dans le cadre du modèle de Hubbard. Au contraire, l'ajout d'une interaction répulsive mène à une diminution des courants permanents.

3.2 Modèle d'Anderson

Le modèle d'Anderson a été introduit afin de décrire le cas de systèmes qui contiennent des impuretés et est donné en seconde quantification [94] :

$$H = H_K + H_W \tag{3.21}$$

Cet hamiltonien prend en compte le désordre sur site et le déplacement des électrons de site en site.

En effet, lorsque la concentration de défauts devient importante, il devient impossible d'utiliser les méthodes valables dans le cas de systèmes translationnellement invariants et l'on doit alors introduire de quoi modéliser le désordre.

Il s'agit là également d'un modèle sur réseau mais sans terme d'interaction. C'est donc un modèle à un corps. Le modèle d'Anderson se propose de décrire la propagation des électrons dans un métal contenant des impuretés. Lorsque l'on se place à température suffisamment basse, on peut négliger les interactions électrons-phonons qui sont à l'origine de collisions inélastiques; négligeant les interactions électron-électron, on se retrouve alors en présence uniquement de collisions élastiques électrons-impuretés. On se place donc dans le domaine où les interférences jouent un rôle important, soit dans le domaine de la physique mésoscopique. Dans le cadre du modèle d'Anderson, la configuration des impuretés reste statique. L'hamiltonien d'Anderson comporte un potentiel statique aléatoire qui modélise cette situation, et permet d'étudier l'effet du désordre sur les propriétés électroniques d'un système quantique.

Caractériser les propriétés d'un matériau sans interaction et sans désordre est une tâche relativement aisée. Lorsque l'on étudie un cristal parfait, le potentiel dans lequel évoluent les électrons sera périodique et on peut alors utiliser le théorème de Bloch qui permet d'écrire les états propres comme des produits de fonctions périodiques et d'ondes planes. Les fonctions d'onde (de Bloch) sont délocalisées. Cependant, aucun matériau n'est idéal puisque des distorsions apparaissent à cause de la présence d'impuretés, de dislocations et d'autres défauts. Lorsque la concentration de ce type de défauts reste faible, on peut encore utiliser les méthodes réservées aux systèmes translationnellement invariants comme base afin de comprendre ces systèmes faiblement désordonnés. Néanmoins, dès l'introduction de concentration de défauts plus fortes, il faut développer de nouvelles méthodes.

Ce modèle datant de 1958 [94] permet de constater que, dans un potentiel aléatoire, les états propres peuvent être localisés dans l'espace réel. Cette localisation est en fait un phénomène d'interférence ondulatoire tout-à-fait général et peut être appliquée dans le cas de propagation des ondes classiques comme le son ou la lumière dans les milieux non homogènes [95]. Cette partie va nous permettre d'introduire le phénomène de désordre et d'étudier le comportement des systèmes contenant des impuretés. La partie suivante sera dédiée à l'étude de la localisation de la fonction d'onde et à ses conséquences.

On se rappelle que le désordre est décrit par un potentiel aléatoire qui dépend de la configuration des impuretés. On se place, tout comme dans le modèle de Hubbard, dans l'approximation des liaisons fortes et les fonctions d'onde à une particule seront données par une superposition des états localisés sur site (dits de Wannier).

Les variables aléatoires indépendantes v_i définies précédemment déterminent les énergies Wv_i associées aux sites i (ou encore énergie de site ou potentiels de site).

Concrètement, les v_i sont obtenues aléatoirement entre $-1/2$ et $1/2$, puis, afin d'obtenir la valeur du potentiel sur site, les v_i sont multipliés par la force du désordre W . L'ensemble des v_i constitue un paysage aléatoire. Nous utilisons la distribution de probabilité [96, 97] :

$$P(v_i) = \theta\left(\frac{1}{2} - |v_i|\right). \quad (3.22)$$

Numériquement, on prend un générateur de nombres aléatoires qui va fournir le nombre de valeurs aléatoires requises (M valeurs pour une configuration

du désordre dans une chaîne de M sites). Celles-ci seront alors affectées dans l'ordre du tirage aux sites successifs. La résolution se fait alors en diagonalisant numériquement la matrice associée à l'hamiltonien. Ainsi, chaque configuration du désordre donnera lieu à des comportements différents et il faudra donc effectuer une moyenne sur un grand nombre de configurations (échantillons).

Dans la base des états sur site, la partie diagonale de l'hamiltonien correspond à l'énergie potentielle (désordre sur site) tandis que la partie non-diagonale correspond à l'énergie cinétique. On a choisi le cas le plus simple où le désordre est purement diagonal et les potentiels associés statistiquement indépendants.

Sous certaines conditions, un faible désordre ne localise pas les états qui restent étendus, cependant, une augmentation de la force du désordre mène à une localisation des états et le système se comportera comme un isolant dans la limite $W/t \gg 1$. Cette transition d'un état métallique vers un état isolant produite par le désordre à trois dimensions est appelée **transition d'Anderson**.

En une et deux dimensions, tous les états sont localisés et le système est isolant quel que soit $W > 0$ [97].

Les enveloppes des fonctions d'onde vont évoluer en décroissant de manière exponentielle avec la distance du centre du domaine de localisation. On verra plus tard dans ce travail comment calculer la longueur de localisation à partir de données numériques.

3.3 La localisation d'Anderson

Le but de la théorie concernant la localisation consiste à parvenir à caractériser la fonction d'onde du système considéré dans l'espace. Cette caractérisation pourrait bien sûr se faire par de nombreux paramètres comme le diamètre moyen ou les corrélations spatiales. Une possibilité est de calculer par exemple le rapport de participation inverse $P^{-1} = \sum_{i=1}^M |\Psi_i|^4$. Il mesure la partie de l'espace dans laquelle l'amplitude des fonctions d'onde est significative. Alternativement, le comportement asymptotique d'un état localisé $\Psi(r) = f(r) \exp(-r/\xi)$ autour de $r = 0$ peut être décrit par une longueur ξ de décroissance exponentielle de son enveloppe. $f(r)$ est une fonction oscillante dont l'enveloppe ne dépend pas de r . La limite $\xi \rightarrow \infty$ correspond à un état étendu. Pour plus de détails, on pourra se reporter à [98].

3.3.1 La théorie d'échelle

La théorie dite d'échelle [99] considère le comportement de la conductance g en fonction de la taille du système L en dimension d . Cette théorie est fondée sur l'hypothèse que seule une variable suffit à la description du comportement de la conductivité.

Elle s'inspire de la théorie de Thouless (cours d'Imry [11]) qui établit une relation entre la conductance g_L , le temps τ_L de transit d'un électron à travers un système de taille L et la densité de niveaux électroniques ρ_L du même système. C'est celle-ci qui introduit la première une longueur caractéristique qui est la longueur de localisation des électrons.

Le calcul des propriétés critiques nécessite de considérer la limite thermodynamique. Pour ce faire, on a recours à l'argument de Thouless [29] qui pose que la conductance G_{2L} d'un système de volume $(2L)^d$ est relié à celle G_L du système de volume L^d (cours d'Imry dans [11]). On introduit la variable sans dimension $g = (h/e^2)G$. L'idée relative à la théorie d'échelle consiste à étudier la fonction de $\beta = \partial(\ln g)/\partial(\ln L)$, dérivée logarithmique de la conductance dans un hypercube de volume L^d et on suppose que β ne dépend que de g et d'aucun autre paramètre (énergie, désordre). Afin de décrire qualitativement son comportement, on utilise des formes asymptotiques de $\beta(g)$ pour des petites et de grandes valeurs de g et on interpole entre ces deux régimes sous l'hypothèse que $\beta(g)$ est continue et monotone. On peut considérer divers systèmes désordonnés de différente dimensionnalité.

La loi d'Ohm nous donne $g(L) = \sigma L^{d-2}$ avec la conductivité σ . Les corrections au comportement de cette quantité $\beta(g)$ furent déduites grâce à une expansion à partir de la limite de faible désordre en utilisant les techniques diagrammatiques de perturbation [100], confirmant les hypothèses d'échelle et la monotonie de $\beta(g)$. Lorsque $g(L)$ est petit et qu'on est dans le régime localisé, il est donné par l'expression suivante : $g(L) = A_d \exp(-L/\xi)$. On déduit alors que :

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} = \begin{cases} d - 2 & g \gg 1 \\ \ln g - \ln(A_d) & g \ll 1 \end{cases} \quad (3.23)$$

Pour $\beta(g) > 0$, la conductance augmente avec la taille de l'échantillon dénotant un comportement métallique, avec une conductance finie dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$. Dans le cas de $\beta(g) < 0$, $g(L)$ décroît si l'on augmente la taille de l'échantillon L , ce qui implique un comportement isolant pour $L \rightarrow \infty$. Au point fixe défini par $\beta(g_c) = 0$ correspond la transition

métal-insolant due au désordre. On obtient des fonctions représentées dans la figure 3.5.

L'une des constatations essentielles de cette théorie d'échelle à un paramètre est qu'une transition métal-insolant ne peut exister qu'en trois dimensions puisque c'est la seule dimension où la fonction $\beta(g)$ prend des valeurs positives et négatives. En revanche, en une et deux dimensions, $g(L)$ décroît avec L . Ainsi, le régime isolant est toujours atteint dans la limite thermodynamique pour des électrons sans interaction [99]. En effet, pour $d = 1$, le régime est clairement toujours isolant et on peut toujours définir une longueur de localisation ξ . Pour $d = 2$, le régime est isolant mais $\beta(g)$ s'annule dans la limite de grand g . Pour $d = 3$, $\beta(g)$ peut s'annuler en $g = g_c$ et celui-ci est un point fixe dans le sens des transitions de phase, et correspond à la transition métal-insolant d'Anderson.

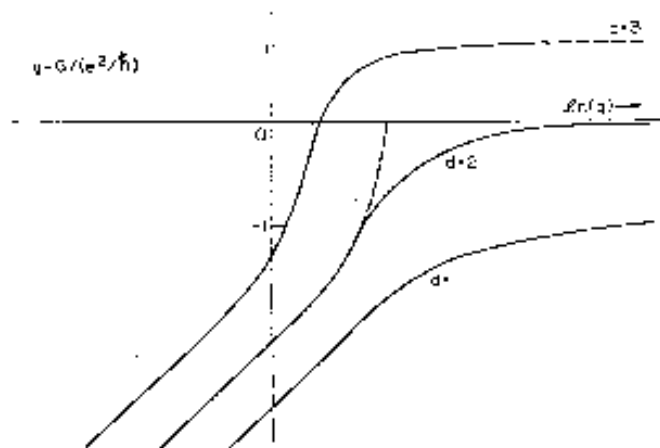


FIG. 3.5: Représentation schématique de la fonction β par la théorie d'échelle en une, deux et trois dimensions [96].

3.3.2 La localisation en une dimension

En une dimension, tous les états propres de l'hamiltonien d'Anderson avec désordre aléatoire sont exponentiellement localisés. On conclut donc qu'à une dimension, un système désordonné est isolant. La conséquence sur les propriétés de transport est évidemment importante: la conductivité g

diminue exponentiellement avec la longueur d'un système unidimensionnel. L'échelle de cette décroissance, la longueur de localisation ξ , diminue quand le désordre W augmente. Pour W faible, on a $\xi \approx 1/W^2$. Le désordre fige donc le système en localisant les particules et le rend isolant. On ne considère donc plus les propriétés macroscopiques mais celles d'échantillons finis.

A une dimension, la longueur de localisation est de l'ordre du libre parcours moyen entre les collisions entre électrons et impuretés.

3.3.3 La transition d'Anderson-Mott en une dimension

Afin de s'approcher de la situation réaliste du courant permanent mesuré lors des expériences, il faut introduire le terme d'interaction. L'effet des interactions consiste à introduire une compétition entre désordre et interaction qui ne vont pas localiser de la même manière. Ceci est pressenti pour introduire un phénomène de délocalisation. Les électrons pourront ainsi se déplacer de site en site avec moins de difficulté. On pourra se reporter à la revue de Belitz et Kirkpatrick pour l'étude de cette transition d'Anderson-Mott [87].

Lorsque l'on s'intéresse à la limite thermodynamique de systèmes désordonnés contenant des électrons en interaction, on considère la longueur de localisation ξ comme outil permettant d'appréhender les effets de délocalisation des interactions. A interaction nulle ($U = 0$), on retrouve la longueur de localisation à une particule, caractéristique de la décroissance spatiale des fonctions d'onde du système.

Il faut signaler également que ces interactions pourraient être à l'origine du phénomène de délocalisation en deux dimensions [103]. Cependant, si le rôle du désordre semble bien compris, les expériences indiquent l'existence d'une transition de phase à deux dimensions [103, 104], dans des échantillons faiblement désordonnés [104]. Beaucoup de travaux ont été développés dans l'intention de montrer que les effets combinés du désordre et de l'interaction mènent à une délocalisation à deux dimensions. Des faits précurseurs d'une phase métallique à deux dimensions ont été trouvés numériquement en étudiant les courants permanents [68, 69, 105].

C'est l'approche qui sera employée dans ce travail afin de montrer qu'un phénomène délocalisant se produit dans les anneaux unidimensionnels étudiés dans le chapitre 6. On va voir que la longueur de localisation augmente pour des valeurs précises du désordre en fonction de l'interaction.

3.4 Conclusion

Ce chapitre nous a permis d'introduire les modèles d'Anderson et de Hubbard et donner quelques-unes de leur propriétés fondamentales. Ceux-ci sont tous deux des modèles de liaisons fortes (sur réseau). L'hamiltonien de Hubbard rend compte d'une interaction entre électrons de spin différents sur le même site (terme d'interaction U) alors que celui d'Anderson rend compte de impuretés présentes dans tout métal par le biais du terme de désordre (terme W) sur site. En les combinant en un hamiltonien complet (modèle de Hubbard-Anderson), on obtient un modèle tenant compte à la fois des interactions et des défauts comme on l'avait déjà mentionné dans le chapitre 2 dans la section 2.3 et développé dans celui-ci afin d'obtenir une description plus complète des courants permanents. Ce modèle devrait permettre une compréhension des phénomènes ayant lieu dans les anneaux mésoscopiques. Dans notre modèle, cet anneau est unidimensionnel et représenté par un réseau de M sites refermé sur lui-même et traversé par un flux Φ , comme celui de la figure 3.1.

Le modèle de Hubbard-Anderson est donc tout-à-fait adapté à la description de cet anneau contenant des électrons s'y déplaçant. On va ainsi pouvoir tenir compte de l'influence et des interactions et du désordre tout en incluant le spin. Néanmoins, le modèle nommé "Hubbard-Anderson" ne se résout pas analytiquement et on doit donc employer la méthode numérique. Celle-ci sera présentée dans le chapitre 4. Cela va permettre de regarder des cas où les forces du désordre et de l'interaction sont comparables et peut-être ainsi d'appréhender l'augmentation importante des courants permanents. En effet, ce chapitre nous a permis de constater que seules les interactions ou le désordre seul ne peuvent en aucun cas mener à une augmentation des courants permanents. C'est donc une combinaison de ces deux paramètres qui va tendre à produire une hausse de ces courants permanents. Une partie de ce travail sera consacrée à l'étude de la longueur de localisation et permettra de constater un phénomène de délocalisation. Outre ce travail numérique, une partie analytique sera développée en utilisant les propriétés connues de ces modèles dans la limite des fortes interactions (chapitre 7).

Chapitre 4

La méthode numérique DMRG

Le chapitre précédent a introduit le modèle de Hubbard-Anderson que l'on a choisi pour calculer les courants permanents. Cependant, ce modèle ne se résout pas analytiquement, sauf dans des limites bien particulières. Il est donc nécessaire d'avoir recours à la méthode numérique. Ce chapitre est consacré à la présentation de la méthode à laquelle on a recours. Il s'agit de la méthode de renormalisation de la matrice densité, Density Matrix Renormalization Group (DMRG).

La méthode DMRG choisie dans ce travail permet d'atteindre des tailles de systèmes bien plus conséquentes que lorsque l'on utilise la diagonalisation exacte. Ceci est nécessaire comme la taille de l'espace de Hilbert à multi-particules croît exponentiellement avec le nombre de sites et le nombre de particules.

On détaillera l'historique de cette méthode dans la partie consacrée à celle-ci. On va tout d'abord expliquer les raisons du choix de la méthode numérique dans notre cas.

La recherche des valeurs et vecteurs propres d'un système considéré est un des principes de base de la physique quantique. En effet, pour de très basses températures, l'état fondamental et les quelques premiers états excités suffisent à donner l'essentiel de la physique des systèmes étudiés. Bien que la connaissance des symétries du système permette de réduire considérablement la taille de l'espace de Hilbert requis, la croissance exponentielle de l'espace de Hilbert avec la taille du système ne peut être enrayée et même de petits systèmes vont nécessiter de longs temps de calculs lors d'une diagonalisation exacte.

Ces longs temps de calcul sont rhédictoires pour une étude systématique d'une catégorie de systèmes donnés. L'existence d'impuretés (défauts, dopage) entraîne l'introduction du *désordre* sur site ainsi qu'on l'a vu précédemment.

L'intérêt de traiter des systèmes de taille plus grande est d'arriver à pouvoir confirmer certains résultats analytiques, d'étudier différents régimes et d'appréhender de nouveaux comportements. L'outil numérique permet donc de vérifier certaines prédictions analytiques et réciproquement, les calculs numériques doivent reproduire les limites connues de l'analytique.

4.1 La méthode DMRG

De nombreuses revues existent traitant de cette méthode [108, 88, 114]. On rappelle ici le fonctionnement de la méthode et ses principes de base.

4.1.1 Introduction à la méthode

L'idée fondamentale de la renormalisation consiste à laisser pour compte les degrés de liberté qui ne seront pas importants en effectuant des transformations de renormalisation successives.

Historiquement, l'idée originale de Wilson [79] est de démarrer avec un petit système que l'on peut résoudre exactement. On augmente par la suite la taille du système sans croître celle de l'espace de Hilbert jusqu'à obtention de la taille désirée.

Dans l'approche traditionnelle du groupe de renormalisation, on considère un ensemble de sites M décrit par un hamiltonien H_B ; celui-ci constitue un bloc et on peut résoudre ce système (*bloc*) exactement. Deux blocs (que l'on peut résoudre chacun exactement) sont alors reliés afin de former un bloc deux fois plus large. L'hamiltonien de ce nouveau bloc est ensuite diagonalisé directement et ses vecteurs propres sont pris comme états de base. On garde alors les états de plus basse énergie. Les états sélectionnés forment un nouveau bloc que l'on va pouvoir relier à nouveau à un bloc identique. Cette méthode s'est montrée fructueuse pour le problème de Kondo [79] mais s'est avérée non appropriée en ce qui concerne les systèmes de fermions corrélés, les systèmes sur réseau en interaction [115]. L'erreur provenait du choix des états propres gardés par bloc; en effet, les blocs n'étaient pas connectés avec le reste du système correctement. Ce problème a été soulevé par White et

Noack [106] et plusieurs tentatives ont été faites afin de combiner des états propres résultant de différentes conditions de bord. C'est là que réside une des forces de l'algorithme DMRG. En effet, l'introduction d'un *superbloc*, terme que l'on définira plus tard, permet de régler le défaut des conditions de bord qui posait problème dans le cas de la méthode de Wilson.

De plus, DMRG est une puissante méthode car elle sélectionne la base adéquate permettant de représenter l'état fondamental dans la base qui décrira cet état avec le minimum de vecteurs propres et limiter ainsi la taille de l'espace de Hilbert. Ainsi, cet espace aura toujours une taille raisonnable et le temps de diagonalisation de l'hamiltonien correspondant sera toujours le même [88]. Augmenter la taille du système sans que celle de l'espace de Hilbert n'augmente se résume en deux principales étapes : augmenter la taille du système faisant croître l'espace de Hilbert en même temps, puis, tronquer l'espace de Hilbert afin de le ramener à la taille voulue.

Le problème est bien sûr de conserver les bons états, c'est-à-dire ceux qui auront les poids les plus importants dans l'état fondamental du système final. Il faut donc réussir à tronquer l'espace de Hilbert mais toutefois **conserver les informations les plus importantes**. L'originalité de DMRG réside dans l'utilisation de la matrice densité pour le choix de la base dans laquelle l'état fondamental va être construit qui change à chaque itération. Bien sûr, celui-ci n'aura pas une expression facile et chaque opérateur que l'on veut mesurer doit être construit et transformé à chaque changement de base. Malheureusement, cette procédure exige du temps et de la mémoire.

L'une des raisons du succès de la méthode DMRG réside dans le fait que, comme les valeurs propres de la matrice densité décroissent rapidement, l'erreur associée diminue très rapidement lorsque l'on augmente le nombre d'états gardés [109].

Cette méthode a de nombreuses applications dans le domaine des fermions fortement corrélés et on pourra se référer aux revues [108, 114] pour de plus nombreuses références. Je ne citerai que celles relatives au problème traité dans ce travail. DMRG a permis de calculer les courants permanents dans le cas de fermions sans spin par exemple [5, 7].

On va donner les principes de base de la méthode DMRG en suivant le déroulement présenté par White dans son article original [106]. Cette procédure de renormalisation va être caractérisée par la suite et l'on verra comment cette croissance du système est effectuée et quels critères vont permettre de réduire la taille de l'espace de Hilbert [107, 88, 109].

4.1.2 Principe de la méthode

La section précédente a permis de mettre en valeur les points forts de la méthode DMRG qui va être utilisée pour traiter des modèles de systèmes fortement corrélés. Cette méthode se révèle particulièrement efficace dans la description de modèles comme Hubbard ou Heisenberg ce qui est l'objectif de ce travail.

On pourra se référer à l'article de Noack et de White [114] qui explique pourquoi les conditions de bord de la méthode de Wilson ne sont pas adaptées. Les conditions de bord sont définies par les termes de passage (amplitude de transition de saut) entre les blocs. Elles relient le bord droit du bloc avec l'extrémité gauche de l'autre bloc. Ceux-ci ont développés deux méthodes qui vont aboutir à des résultats meilleurs. La première ne sera pas développée ici (on pourra consulter [106, 114]). La seconde consiste à former des **superblocs**, constitué d'un bloc dit *élargis* et de son symétrique, et à changer de base lorsque l'on construit un système dont la taille augmente, et de considérer que celui-ci pourra faire partie d'un système encore plus grand. L'idée est encore une fois de pallier au problème des conditions de bord : lorsque l'on forme ce superbloc, le système considéré est soumis aux fluctuations qu'il subirait s'il faisait partie d'un plus grand système. Cette méthode, nommée **méthode des superblocs**, s'adapte très bien à la description des systèmes en interaction.

L'algorithme DMRG (**Density Matrix Renormalization Group**) repose sur une combinaison de la méthode des superblocs et d'un moyen de projeter correctement les états du superbloc sur ceux du bloc. Il s'agit donc d'abord de parvenir à augmenter la taille du système en réunissant plusieurs petits systèmes entre eux afin d'en former un plus large. Puis, il faut parvenir à un moyen de rejeter les informations les moins importantes à la description du système.

La projection a recours à l'utilisation de la matrice densité. Il s'agit de ne garder que les états qui serviront à la physique des basses énergies, c'est-à-dire les valeurs propres les plus élevés de la matrice densité. L'algorithme DMRG repose sur un concept fondamental de la mécanique statistique d'un système au contact d'un bain plus large. L'état fondamental du système complet, l'univers, c'est-à-dire le système et le bain, est bien déterminé et c'est la matrice densité qui peut nous renseigner sur les états prépondérants de l'état fondamental. En ne conservant que les états propres de la matrice densité réduite dont les valeurs propres sont les plus élevées, on choisit les

états les plus importants à la description de la physique des basses énergies.

Considérons tout d'abord la formation des superblocs. On commence par considérer un système petit, dont l'hamiltonien peut se résoudre exactement et dont les états sont connus et classés. Chaque itération va faire augmenter la taille du système d'un site, la méthode n'est donc pas une méthode par blocs. Le nombre d'itération est noté m et la taille du bloc à l'itération m est notée l .

On crée ainsi le bloc *élargi* B^e . La base du bloc élargi s'écrit comme le produit direct des bases du bloc et du site et la dimension de l'espace de Hilbert du bloc élargi B^e est le produit des dimensions des espaces de Hilbert de $B(l, m)$ et du site.

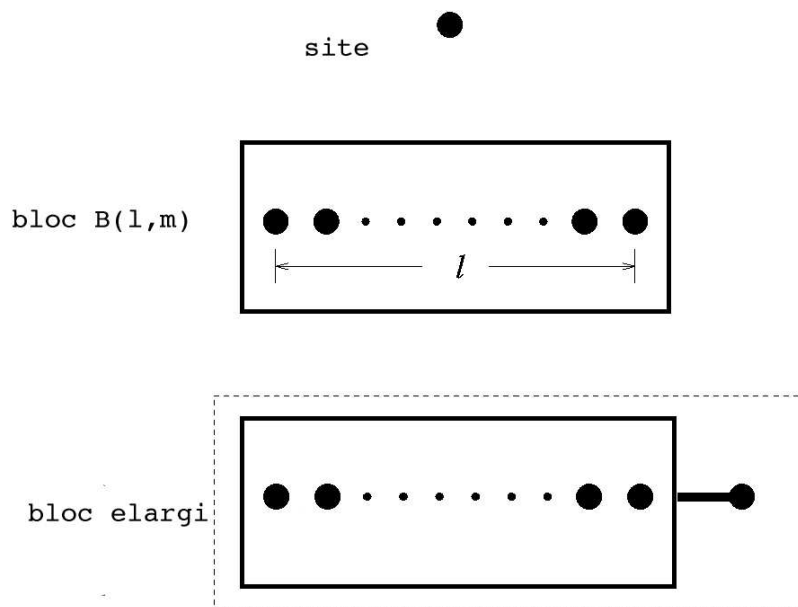


FIG. 4.1: Représentation des éléments de base de la méthode DMRG. La ligne en pointillé entourant le bloc et le site constitue le bloc élargi. Un autre bloc élargi va venir se connecter au site afin de former les superblocs [88].

L'étape suivante forme le superbloc à proprement dit : celui-ci est constitué de deux blocs élargis connectés entre eux.

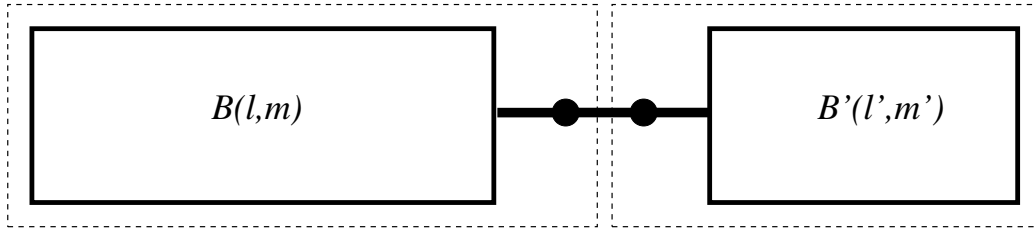


FIG. 4.2: Le superbloc est la connection de deux blocs élargis. Les sites représentés au milieu sont les sites rajoutés à chaque bloc respectif pour former chaque bloc élargi [88]. Une fois ces blocs élargis connectés entre eux, on obtient le superbloc.

La méthode DMRG se concentre sur un seul état propre du superbloc, appelé état cible que l'on utilise afin de calculer la matrice densité. On détermine l'état fondamental à l'aide d'une méthode de diagonalisation donnée, par la suite, on élimine les états de la base provenant du bloc élargi contribuant le moins à l'état fondamental du bloc élargi.

Ne sera conservé que le nombre désiré de vecteurs de base afin de former la base du nouveau bloc qui est constitué l'ancien bloc auquel on a rajouté un site.

Ce changement de base permet donc une renormalisation de l'espace de Hilbert, restreignant sa taille à $ncut$. Ainsi construits, les blocs préparés de la sorte vont pouvoir être ensuite connectés à d'autres lors de la prochaine étape dans la construction du superbloc suivant. Cependant, il convient de préciser que d'autres opérateurs se doivent d'être construits afin de représenter les sites bordant les blocs : ceux-ci sont indispensables à la construction du lien entre le bloc et le site unique lors de la formation du bloc élargi et les mêmes transformations qu'à l'hamiltonien du bloc élargi H_B^e doivent leur être appliquées.

4.1.3 Algorithme pour des systèmes infinis

DMRG a tout d'abord été utilisé pour des systèmes de taille infinie [107, 110]. La première utilité de DMRG était de pouvoir calculer les énergies des états fondamentaux de grands systèmes que la diagonalisation exacte ne peut atteindre. L'algorithme des systèmes infinis connecte le bloc élargi de

gauche à son symétrique à sa droite de telle sorte que le nombre de sites du superbloc est multiplié par deux à chaque itération. La formation des blocs et la troncation de l'espace de Hilbert s'effectue comme expliqué dans la section précédente.

Voici une description de l'algorithme dans le cas des systèmes infinis. Considérons un bloc de taille l . Son hamiltonien sera noté H_l .

- On commence par former un bloc de taille l dont on connaît tous les états. On forme le bloc élargi B_l^e constitué du bloc B_l auquel on a rajouté un site. On forme un superbloc composé de $2(l+1)$ sites, assez petit pour être diagonalisé exactement.
- On diagonalise l'hamiltonien du superbloc numériquement pour obtenir la valeur propre et le vecteur propre de l'état fondamental avec l'algorithme de Lanczos ou de Davidson [113, 116].
- On forme la matrice densité réduite pour le nouveau système (bloc) de taille $l+1$.
- On diagonalise cette matrice densité à l'aide d'un algorithme de diagonalisation des matrices denses. On obtient ainsi les $ncut$ valeurs propres les plus importantes que l'on va pouvoir conserver.
- On construit l'hamiltonien H_{l+1} du nouveau bloc constitué de l'ancien auquel on a rajouté un site. Pour tout opérateur P_{l+1} , on utilise la transformation $P_{l+1} = O_l^\dagger P_l O_l$ où O_L est un opérateur dont les colonnes sont composées des $ncut$ vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus élevées de la matrice densité.
- On forme un superbloc de taille $2(l+2)$ en utilisant le bloc B_{l+1} , deux nouveaux sites et la réflexion de B_{l+1} .
- On réitère toutes les étapes à partir de la diagonalisation de la matrice.

La taille complète de l'hamiltonien restant constante, le facteur déterminant pour la taille de l'hamiltonien est le nombre d'états gardés par blocs. $ncut$ est typiquement de l'ordre de quelques centaines et est limité en raison du temps de calcul CPU et de la mémoire de l'ordinateur. La taille du système est donc augmentée à chaque pas contrairement au nombre d'états conservés dans le bloc qui reste constant.

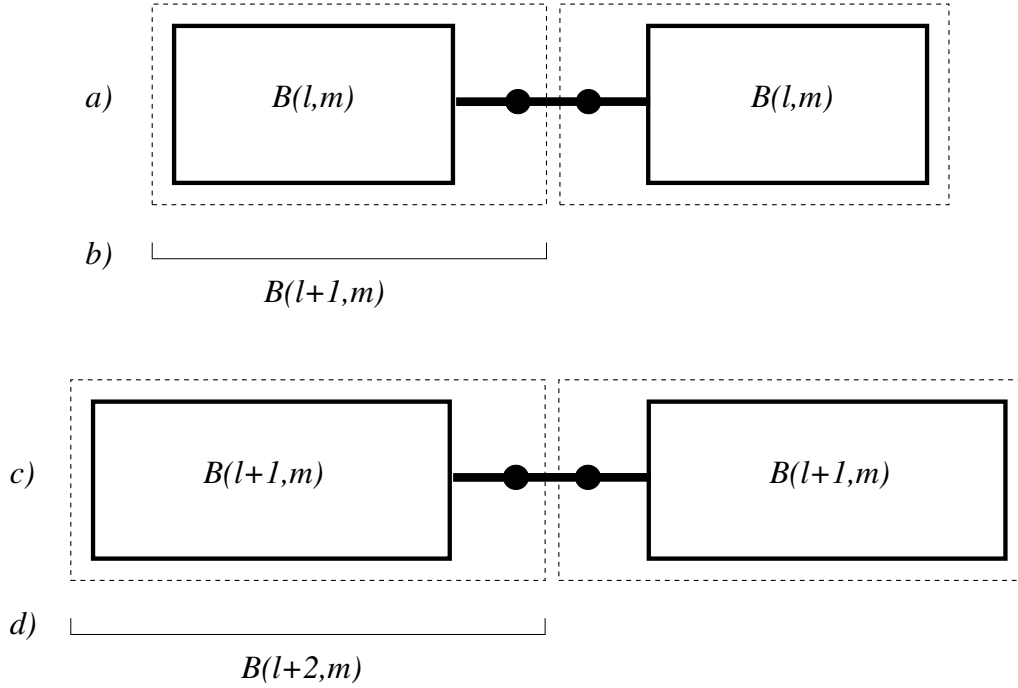


FIG. 4.3: Deux étapes dans l'algorithme DMRG des systèmes infinis [88]. L'étape a montre la formation du superbloc, constitué de deux blocs élargis de taille $l + 1$ (b). Les étapes c et d correspondent à la formation du superbloc constitué de deux blocs élargis de taille $l + 2$.

Cet algorithme permet d'appréhender des systèmes de taille infinie et donc, les propriétés thermodynamiques. Cependant, il est parfois utile de s'intéresser à des systèmes de taille finie. Il a donc fallu adapter cet algorithme à de tels systèmes. C'est celui-ci que nous allons exposer dans la partie suivante.

4.1.4 Algorithme pour des systèmes finis

On se limite à un système de taille $L = Ma$ (M nombre de sites et a pas du réseau) donnée. On prend $a = 1$, ainsi, $M \equiv L$. Au début, on utilise l'algorithme pour des systèmes infinis jusqu'à ce que la taille du système soit égale à L , soit lorsque le bloc élargi contient $L/2$ sites. Toutes les informations

sont stockées ainsi que tous les opérateurs utilisés afin de connecter les blocs entre eux.

Par la suite, le bloc de gauche continue à être agrandi tandis que le bloc de droite va contenir moins de sites afin que le nombre de sites total dans le superbloc soit **constamment égal à L** . Lorsque le bloc de droite va contenir un seul et unique site, la procédure est arrêtée. Une itération lors de laquelle le bloc de gauche est passé par toutes les tailles possibles jusqu'à $L - 1$ est appelée un balayage ("sweep") sur le système. Après le premier balayage, on recommence tout depuis le début en démarrant d'un petit bloc de gauche afin d'obtenir la meilleure base possible du bloc de gauche.

On récapitule ici toutes les étapes de l'algorithme des systèmes de taille finie.

- On applique l'algorithme des systèmes de taille infinie jusqu'à ce que le superbloc atteigne la taille L . Toutes les étapes de la troncation lors de la procédure sont conservées dans des blocs.
- On construit la matrice densité pour le bloc B_{l-1} , on la diagonalise et on construit les opérateurs associés $P_{l+1} = O_L^\dagger P_l O_L$ jusqu'à $l = L/2 - 1$.
- On élargit le bloc de gauche; celui-ci a alors la taille $l + 1$.
- On forme le superbloc de taille L avec le bloc B_l , deux sites et le bloc B_{L-l-2} .
- On lit comment est composé le bloc de taille $L - l - 2$ à partir des blocs conservés dans le disque.
- On rapetisse le bloc de droite à la taille $L - l - 3$.
- On assemble les blocs afin de constituer le superbloc.
- On diagonalise le superbloc et on calcule la matrice densité vis-à-vis du bloc gauche.
- Grâce à la matrice densité, on ne garde que les *ncut* états les plus importants de la matrice densité pour le prochain pas où le bloc de gauche élargi sera le prochain bloc.
- On reprend à partir de l'étape 2 en attendant que le bloc de droite ne contienne qu'un seul site. Il s'agit là du balayage de gauche à droite.

- Si le bloc de droite ne contient plus qu'un seul site, on recommence une nouvelle itération complète, mais de la droite vers la gauche. A chaque fois, on utilise les informations des blocs stockées en mémoire.
- On recommence les balayages dans un sens et dans l'autre jusqu'à l'obtention d'une convergence.

Le bloc de droite est le complémentaire de celui de gauche et la longueur du superbloc qu'ils forment à eux deux se doit d'être toujours égale à L . Ainsi, la taille du bloc de droite va diminuant alors que celle du bloc de gauche augmente et inversement. Ces balayages successifs de gauche à droite puis de droite à gauche se font donc dans un superbloc qui a toujours la même taille L .

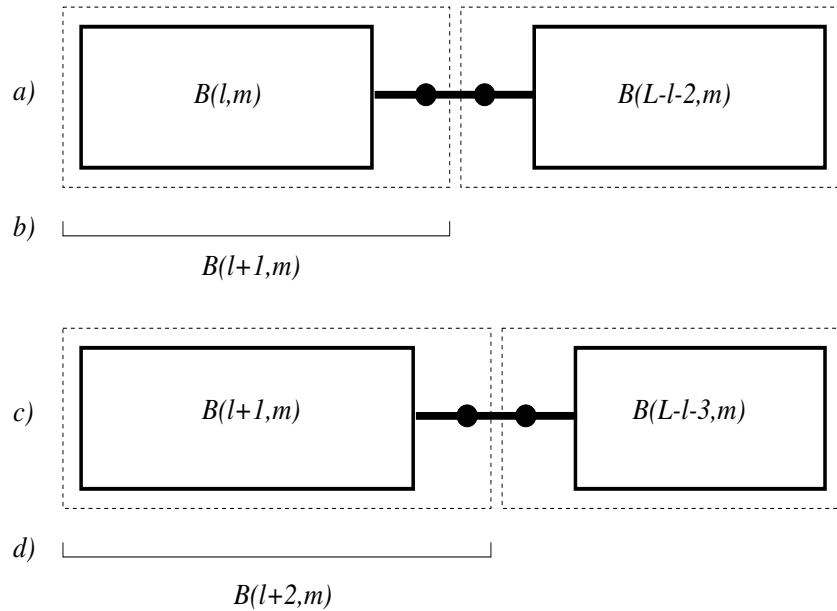


FIG. 4.4: Deux étapes dans la méthode DMRG des systèmes finis [88]. L'étape a consiste à former un superbloc à partir d'un bloc élargi de taille $l + 1$ à gauche et un de taille $L - l - 2$ comme l'indique l'étape b. Les étapes c et d correspondent aux étapes qui permettent d'agrandir le bloc de gauche. La taille du bloc de gauche est alors de $l + 2$ et celle de droite est de $L - l - 3$.

Précisons que l'algorithme des systèmes finis est plus précis que celui des systèmes infinis; c'est celui qui sera utilisé dans le cadre de ce travail. Maintenant, l'algorithme DMRG précédemment décrit va être adapté à notre problème, soit le modèle de Hubbard-Anderson. Le spin est incorporé dans le programme et donne lieu à des différences qui seront présentées dans la section 4.2 avec la méthode exposée dans cette section 4.1.

4.2 DMRG pour le modèle de Hubbard-Anderson

Le but est de traiter l'hamiltonien de Hubbard-Anderson dont on a parlé dans le chapitre 3. Cet hamiltonien est donné en seconde quantification par l'équation (3.1) du chapitre 3.

Le programme DMRG décrivant l'hamiltonien de Hubbard a été développé par P. Brune [112]. Il a fallu implémenter le désordre sur site dans son code afin de décrire le modèle de Hubbard-Anderson que nous avons choisi. Il repose sur le même algorithme que celui présenté précédemment mais l'entité unique initiale est un demi-site, et non plus un site. De surcroît, il faut tenir compte des possibilités d'avoir deux spins différents sur un site.

Le point de départ consiste à créer le demi-site à l'origine, vide ou contenant un seul électron (spin up ou spin down). Un demi-site est un état électronique avec un spin donné qui peut être occupé ou pas.

Pour un site complet, il y a quatre états possibles : le cas du site vide, ou contenant un "spin up", un "spin down" ou encore doublement occupé comme le montre la figure 4.5. Les états ainsi répertoriés sont classés en fonction de la valeur de la variable $S_{z,i,\uparrow}$ sur ce site i , de la valeur de la variable $S_{z,i,\downarrow}$ sur ce même site i , de la valeur de la variable $S_{z,\uparrow(\downarrow)} = \sum_i S_{z,i,\uparrow(\downarrow)}$, de la valeur de la projection selon z du spin total S_z et du nombre de particules total sur site N . On indexe par i tous les sites. On attribue des numéros aux demi-sites i_1 et i_2 .

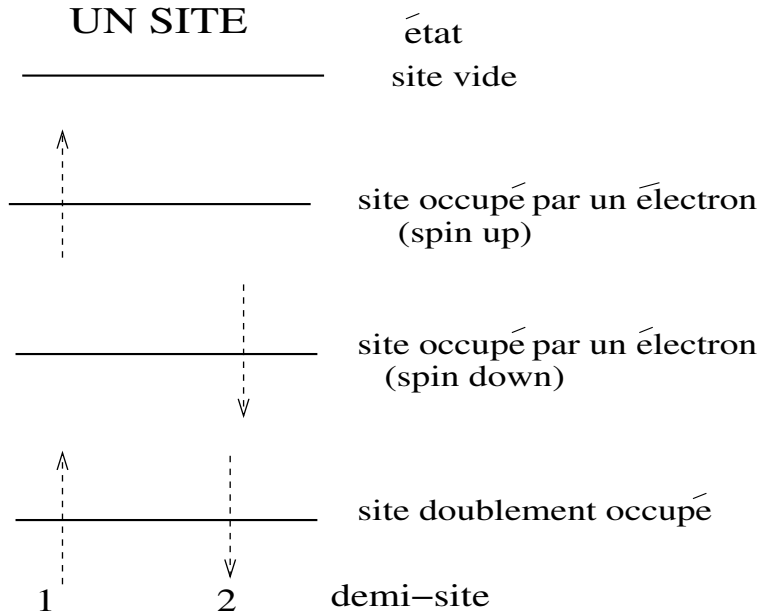


FIG. 4.5: Tous les états possibles d'un site.

On construit maintenant le site complet. Celui-ci pourra être vide, à demi rempli (un seul électron) ou doublement occupé. La convention adoptée est la suivante : $S_{z,i,\uparrow} = -1$ signifie que le demi-site i_1 associé au site i est vide et $S_{z,i,\uparrow} = +1$ signifie qu'il est occupé par un électron de spin \uparrow .

$S_{z,i,\uparrow}$	$S_{z,i,\downarrow}$	nombre de particules N	spin total $\frac{(S_{z,i,\uparrow} - S_{z,i,\downarrow})}{2} = S_z$
-1	-1	0	0
-1	+1	1	-1
+1	-1	1	+1
+1	+1	2	0

N est le nombre total d'électrons effectivement présents sur le site i et S_z le spin total du site. Soit H_i l'hamiltonien de ce site complet évoqué. On se place dans le cadre de l'hamiltonien de Hubbard-Anderson. Cela signifie que le désordre est modélisé par des variables aléatoires sur site comme il a été expliqué dans le chapitre 3.

On a :

$$H_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Wv_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Wv_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U + 2Wv_i \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

On numérote les états et on représente les nombres d'occupation n_1 et n_2 sous forme matricielle: ils donnent l'occupation de chaque demi-site. Ceci étant fait, il reste à initialiser les opérateurs qui permettront d'assembler les sites entre eux selon leur occupation.

Ces préliminaires vont permettre d'utiliser par la suite l'algorithme général présenté ci-dessus afin de construire le système désiré. Le système sera bien sûr construit en rajoutant des **demi-sites** et les opérateurs seront écrits en tenant compte du spin en utilisant toutes les règles de base de la mécanique quantique [34]. Cette étape permet d'initialiser tous les opérateurs et de passer à l'étape suivante dans la construction d'un système plus grand.

Après la création de ce premier site, il s'agit dorénavant de rajouter un troisième demi-site. On traite séparément les cas des demi-sites pairs et impairs, lorsque l'on rajoute un demi-site vide ou un électron avec spin up dans le cas d'un site impair, tandis qu'un demi-site pair permet de rajouter un site vide ou un électron avec spin down.

Rajouter un demi-site consiste à créer tous les opérateurs associés à ce demi-site, mais, il faut bien sûr raccorder ce demi-site au site complet précédemment. On liste les états relatifs au bloc composé d'un site auquel on rajoute un demi-site en fonction du nombre de particules, de leur arrangement et du spin total c'est-à-dire qu'on établit tous les états possibles qui existent pour ces trois demi-sites que l'on veut rattacher, le but étant de créer des sites complets en rajoutant des demi-sites impairs, puis pairs.

Les états possibles de trois demi-sites sont :

Si $N = 0$, un seul état est possible: l'état vide. On a $S_{z,\uparrow} = -2$ qui signifie que les deux emplacements de spin up sont vides, $S_{z,\downarrow} = -1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est vide et enfin, $S_z = 0$ car le spin total est nul.

Si $N = 1$, trois états sont possibles, illustrés dans la figure 4.6 :

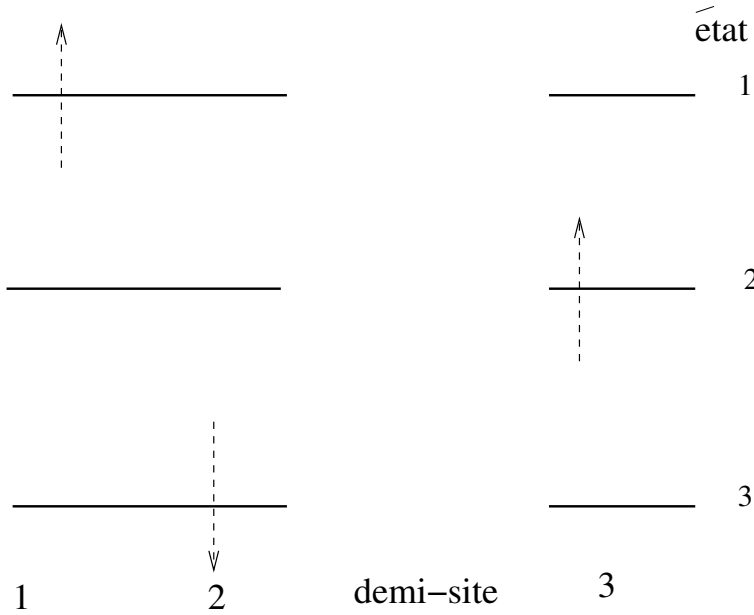


FIG. 4.6: Un site et un demi-site qui contient un électron. Différentes possibilités de placer un électron sur un site et demi. Les sites impairs sont réservés aux spins up et les pairs aux spins down.

1. l'état avec un spin up sur le premier demi-site impair. On a $S_{z,\uparrow} = 0$ qui signifie que le premier des deux emplacements de spin up est occupé et que le second est vide, $S_{z,\downarrow} = -1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est vide et enfin, $S_z = +1$ montre que le système contient un spin up.
2. l'état avec un spin up sur le troisième demi-site ou deuxième demi-site impair. On a $S_{z,\uparrow} = 0$ car l'un des deux emplacements de spin up est vide et l'autre occupé, $S_{z,\downarrow} = -1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est vide et enfin, $S_z = 1$.
3. l'état avec un spin down sur le deuxième demi-site ou premier demi-site pair. On a $S_{z,\uparrow} = -2$ qui signifie que les deux emplacements de spin up sont vides, $S_{z,\downarrow} = +1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est occupé et enfin, $S_z = -1$ car il existe un spin down sur ces trois demi-sites.

Si $N = 2$, il y a à nouveau trois états possibles, comme l'indique la figure 4.7 :

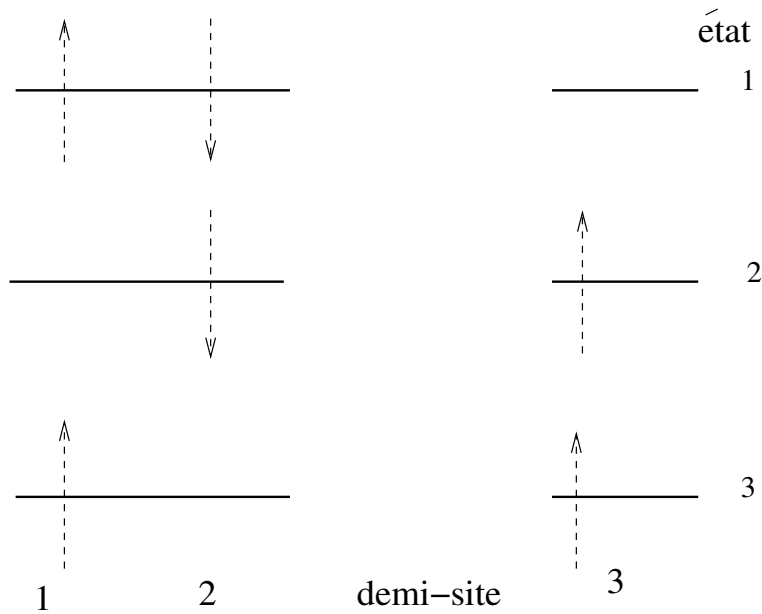


FIG. 4.7: Un site et un demi-site qui contient deux électrons. Différentes possibilités de placer deux électrons sur un site et demi. On considère à nouveau les sites pairs (spins down) et sites impairs (spins down).

1. l'état avec un spin up sur le premier demi-site impair et un spin down sur le second demi-site (premier site pair). On a $S_{z,\uparrow} = 0$ qui signifie que l'un des deux emplacements de spin up est vide, $S_{z,\downarrow} = +1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est occupé et enfin, $S_z = 0$ montre qu'il existe autant de spin up que de spin down.
2. l'état avec un spin up sur le troisième demi-site ou deuxième demi-site impair et un spin down sur le second demi-site (premier site pair). On a $S_{z,\uparrow} = 0$ car l'un des deux emplacements de spin up est vide et l'autre occupé, $S_{z,\downarrow} = +1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est occupé et enfin, $S_z = 0$ que le nombre de spins up est égal au nombre de spins down.

- l'état avec un spin up sur le premier demi-site impair et un spin up sur le troisième demi-site. On a $S_{z,\uparrow} = +2$ qui signifie que les deux emplacements de spin up sont occupés, $S_{z,\downarrow} = -1$ qui signifie que l'emplacement réservé au spin down est vide et enfin, $S_z = +2$ car il existe deux spins up sur ces trois demi-sites.

Si $N = 3$, une seule façon de créer l'état est possible: il faut remplir tous les états à une particule. Dans ce cas, $S_{z,\uparrow} = 2$ souligne l'occupation des deux demi-sites impairs par deux spins up, $S_{z,\downarrow} = 1$ que la position de spin down est occupée et $S_z = 1$.

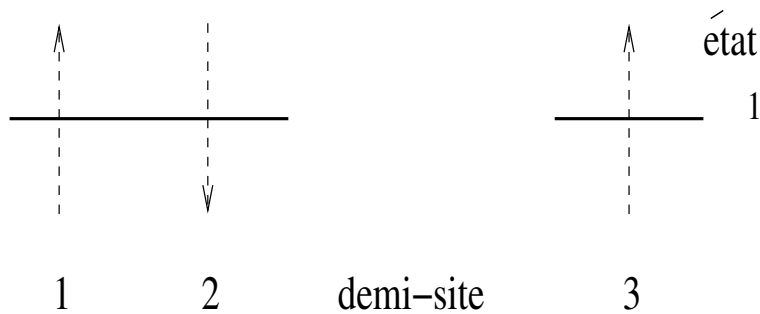


FIG. 4.8: *Un site et un demi-site qui contient trois électrons. Seule une possibilité de placer trois électrons sur un site et demi existe.*

On construit donc une matrice des états qui est diagonale par blocs et ces blocs ont chacun la dimension du nombre d'états possibles pour chaque nombre de particules. Dans chaque bloc, des sous-blocs relatifs aux états de même $(S_{z,\uparrow}, S_{z,\downarrow})$ se créent et sont indexés par états ayant le même nombre quantique. Toutes ces informations sont stockées en mémoire. Il faut alors reconstruire la liste d'opérateurs relative au rajout du nouveau site. Ces opérateurs doivent agir dans la base adéquate. La matrice est constituée de blocs qui sont eux-mêmes blocs-diagonaux.

L'étape suivante reforme la matrice en reclassant les états en fonction de S_z et de N . Les sous-espaces seront ainsi définis par un jeu de nombres quantiques. On garde donc les états appropriés de ce sous-espace défini par les nombres quantiques relatifs au système choisi dont le nombre de particules et le spin total selon S_z sont connus.

On veut maintenant créer les opérateurs spécifiques de ce nouveau système d'un site et demi, et notamment l'hamiltonien. On commence par les opérateurs de connection entre le site et le demi-site. De façon générale, ceux-ci connecteront un bloc B à un autre bloc B' ; ici, ils sont initialisés. Ils vont servir dans le calcul de l'hamiltonien quand les deux parties du système devront être connectées, il faut tenir compte du cas particulier où l'un des deux blocs est un demi-site.

Après avoir formé ces opérateurs locaux, on va maintenant considérer que les particules peuvent sauter d'un site à l'autre en connectant ainsi les blocs entre eux. On utilise donc l'opérateur de destruction C dans un bloc et l'opérateur de création $(C')^\dagger$ dans l'autre. On calcule en fait $\langle n_f | C' \rangle^\dagger C | n_i \rangle t_{if}$. t_{if} est l'élément de saut qui sera multiplié par la condition de bord quand on est en fin de chaîne, $|n_i\rangle$ l'état avant le saut et $|n_f\rangle$ l'état après le saut de la particule considéré.

Afin de tenir compte de l'interaction, on introduit une fonction qui va balayer tous les sites du système et vérifier si l'on a déjà un spin up sur le site impair i_1 et que l'indice pair i_2 , associé à ce même site, contient un spin down auquel cas on ajoute un terme d'interaction locale comme dans le cas de l'hamiltonien de départ qui était directement diagonal.

Le désordre est introduit par le biais d'un générateur de nombres aléatoires qui va donner M (nombre de sites) valeurs comprises entre $[-0.5, +0.5]$. Ces valeurs sont désignées par le nom de **Seed** et forme **un paysage aléatoire**. Ces variables aléatoires seront multipliées par la force du désordre W dès qu'un site est occupé ou doublement occupé, on ajoute un terme de désordre Wv_i ou $2Wv_i$.

Les étapes que sont la définition des termes de saut, d'interaction et de désordre, permettent de construire l'hamiltonien $H_{B+B'}$ du bloc $B + B'$.

Finalement, on crée le superbloc comme il est expliqué dans la section précédente 4.1 et l'algorithme est similaire à ce qui a été décrit précédemment.

En réitérant les processus expliqués dans la section 4.1, on construit l'hamiltonien général et en calculant la matrice densité, on peut ainsi choisir les états à conserver.

Cet algorithme permet donc de calculer l'énergie du fondamental d'anneaux ou de chaînes à une dimension avec des conditions de bord variables. Ce programme contenant désordre, interaction et terme de saut va permettre l'étude des systèmes d'anneaux de tailles différentes soumis à diverses valeurs de l'interaction et du désordre, même dans les cas où l'analytique ne peut plus s'utiliser. Dans la section suivante, on va vérifier la validité du programme en

montrant que les limites connues (analytiques ou numériques) sont obtenues avec le programme.

4.3 Vérification de quelques limites

Voici les quelques limites analytiques bien connues qui ont été retrouvées par le biais du programme. Ceci va permettre de conduire à valider le programme s'il rend bien compte des limites connues et de conclure à son bon fonctionnement. On pourra supposer que celui-ci donne des résultats valides pour d'autres valeurs de l'interaction U et du désordre W .

4.3.1 Les électrons libres

C'est le cas sans désordre ni interaction où $U = W = 0$. Le seul terme restant dans l'hamiltonien est le terme de saut $H = H_K$ et celui-ci se diagonalise facilement. Considérons un système de M sites peuplés de N électrons. L'équation de Schrödinger monoélectronique correspondant à l'hamiltonien de saut est la suivante :

$$-t(\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) = \epsilon_n \Psi_n \quad (4.2)$$

où Ψ_n est une fonction d'onde à un électron et ϵ_n la valeur propre de l'énergie à un électron. Imposer des conditions périodiques identifie le site 1 et le site $M + 1$.

L'équation de Schrödinger peut se résoudre facilement et les états propres et les valeurs propres s'écrivent $\frac{1}{\sqrt{M}} \exp(ikx)$ et $\epsilon(k) = -2t \cos(k)$ respectivement, avec $k = (2\pi n)/M$, n étant un nombre entier à $\phi = 0$. A $\phi = \pi$, la condition de bord entre le premier et le dernier site change et introduit un signe négatif dans la condition de bord, cela implique que les états propres s'écrivent toujours $\frac{1}{\sqrt{M}} \exp(ikx)$ et que les valeurs propres sont maintenant égales à $\epsilon(k) = -2t \cos k$, avec $k = (2n + 1)\pi/M$, n étant un nombre entier.

Cela nous permet de calculer l'énergie de l'état fondamental de ces états et de vérifier ainsi la validité du programme dans cette limite. En effet, il ne s'agit de rien d'autre que de remplir les niveaux d'énergie les plus bas. On constate que, pour un nombre d'électrons pairs, le spin total de ces états est nul.

4.3. VÉRIFICATION DE QUELQUES LIMITES

système	$\log(D_{spin})$	nombre d'états gardés	$\log(2 \times D_{sans\ spin})$	$\log D_{analytique}$
$M = N = 6$	0.507234	200	0.507234	0.507235
$M = N = 8$	0.502782	200	0.502782	0.502782
$M = N = 10$	0.500743	300	0.500743	0.500743
$M = N = 12$	0.499625	400	0.49964	0.49964
$M = N = 14$	0.498958	400	0.498978	0.498978
$M = N = 20$	0.497866	600	0.498044	0.498044

TAB. 4.1: *Données du programme à $U = W = 0$ au demi-remplissage.*

Les électrons ayant un spin, le demi-remplissage est défini comme un électron par site, soit on a le même nombre d'électrons que de sites.

Le résultat analytique à demi-remplissage est comparé avec le programme DMRG avec spin ainsi qu'avec le programme implémenté par Peter Schmitteckert décrivant les fermions sans spin [111] dans le tableau 4.1.

Dans la limite $M \rightarrow \infty$, ces résultats tendent vers l'expression analytique $D = t\pi|\sin k_F|$ [117], ce qui donne, à demi-remplissage, $\log D = \log(\pi) \approx 0.49714987$.

Dans le cas du programme pour les fermions sans spin, on a effectué les calculs numériques en conservant 200 états à chaque itération. Les itérations sont au nombre de huit pour le programme considérant des électrons utilisé dans ce travail. Le programme de Peter Schmitteckert incrémente lui-même le nombre d'itérations lorsque la convergence n'est pas atteinte, mais le nombre d'itérations habituellement choisi est également de huit.

Pour un nombre impair d'électrons à demi-remplissage, la raideur de charge D est nulle. On le vérifie pour $M = N = 7$ et $M = N = 11$.

On présente les différences entre les résultats analytiques et numériques (DMRG avec spin) à demi-remplissage par la figure 4.9 à $U = W = 0$. On représente $\delta = (|\log(D_{spin}) - \log(D_{analytique})|)/\log(D_{spin})$ en fonction de la taille du système.

On présente quelques résultats hors demi-remplissage dans le tableau 4.2.

On constate un bon accord entre les résultats fournis par le programme de Peter Schmitteckert et ceux du programme de P. Brune.

Ces résultats montrent que le programme fonctionne à interaction et désordre nuls ($U = W = 0$) pour des tailles de systèmes jusqu'à $M = N = 14$.

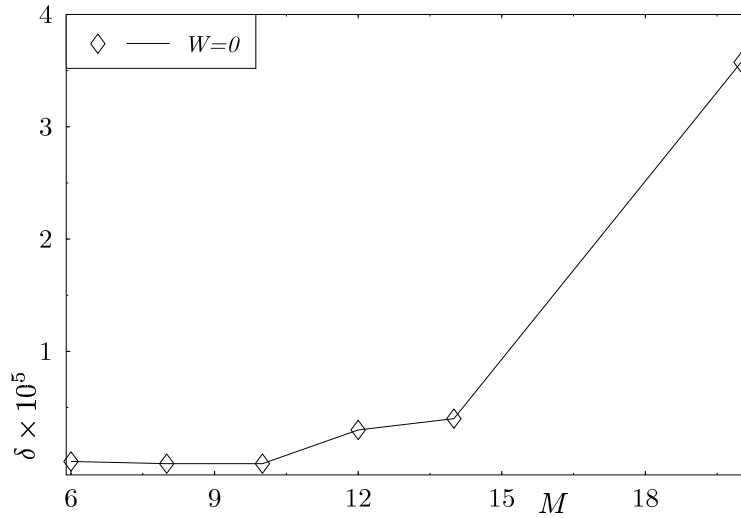


FIG. 4.9: Comportement de la quantité δ en fonction de la taille M du système. δ représente la différence entre le résultat donné par le programme DMRG utilisé et la calcul analytique.

système	$\log(D_{spin})$	nombre d'états gardés	$\log(D_{analytique})$
$M = 10$ et $N = 9$	-1.11059	400	-1.110586
$M = 10$ et $N = 8$	0.478949	400	0.478949
$M = 10$ et $N = 7$	-0.647878	400	-0.6478785
$M = 10$ et $N = 6$	0.408700	400	0.408700
$M = 10$ et $N = 4$	0.269961	400	0.269961

TAB. 4.2: Données du programme à $U = W = 0$ hors demi-remplissage.

$M = 10$ et $N = 8$	$\log(D_{spin})$	$\log(2 \times D_{sans\ spin}(\frac{N}{2} = 4))$
$W = 2$	0.323065	0.323064
$W = 5$	0.0767238	0.0767238
$W = 9$	-0.294961	-0.294961

TAB. 4.3: Données du programme à $U = 0$ hors demi-remplissage.

$M = N = 20$	$\log(D_{spin})$	$\log(2 \times D_{sans\ spin}(\frac{N}{2} = 10))$
$W = 2$	-0.239685	-0.23550516
$W = 5$	-1.1699	-1.164658331
$W = 7$	-2.9997074	-3.00052

TAB. 4.4: Données du programme à $U = 0$ au demi-remplissage.

4.3.2 Systèmes désordonnés à interaction nulle

Les systèmes d'électrons à interaction nulle mais comportant du désordre se comportent comme deux systèmes de fermions sans spin et vont permettre de vérifier les résultats pour $U = 0$ mais pour différentes valeurs du désordre W . On choisit un potentiel aléatoire donné et on l'utilise pour vérifier que dans le cas de fermions sans spin et dans le cas du modèle de Hubbard, on obtient $D_{spin} = 2 \times D_{sans\ spin}(\frac{N}{2})$. On vérifie sur des cas à demi-remplissage et hors demi-remplissage que cela fonctionne.

La première revérification que l'on présente a été effectuée pour un système de 8 électrons sur 10 sites dans le tableau 4.3. On a conservé 400 états si l'on considère le cas d'électrons et 200 pour des fermions sans spin. Dans les deux cas, on a effectué 8 itérations.

La seconde vérification présentée ici est pour un cas au demi-remplissage, le système choisi est le suivant $M = N = 20$. On a conservé 600 états dans le cas d'électrons et 200 dans le cas de fermions de systèmes. On présente les résultats dans le tableau 4.4.

A désordre fort, on constate un accord satisfaisant entre les résultats qui permettent de confirmer la validité des résultats du programme. On peut donc dire que le programme fonctionne à interaction nulle et lorsque l'on rajoute du désordre. On peut conclure que, **dans la limite** $U = 0$, le programme donne les valeurs analytiques escomptées.

4.3.3 Le cas sans désordre

On vérifie qu'à désordre nul, les interactions diminuent le courant permanent et dans notre cas, on va montrer que la valeur de la raideur de charge diminue par rapport à la valeur à interaction nulle quand on rajoute l'interaction et qu'il n'y a pas de désordre ($W = 0$).

On illustre ce résultat par des courbes pour différentes tailles M du système et différents remplissages N :

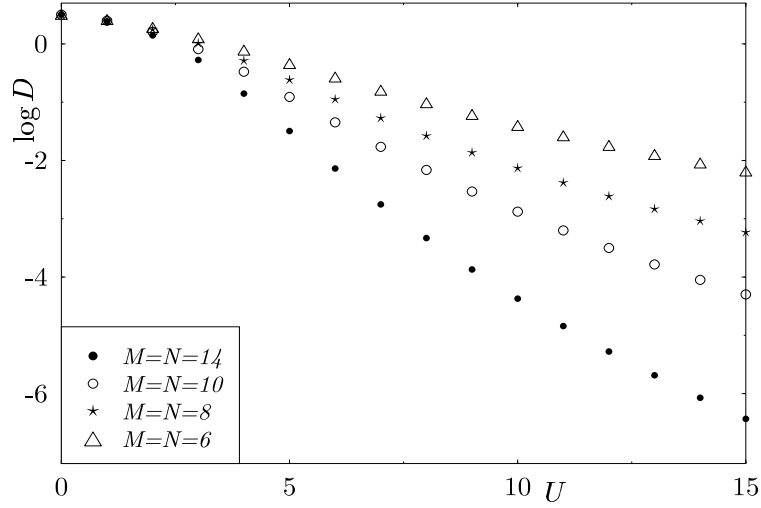


FIG. 4.10: Comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour différents systèmes à demi-remplissage et à désordre nul.

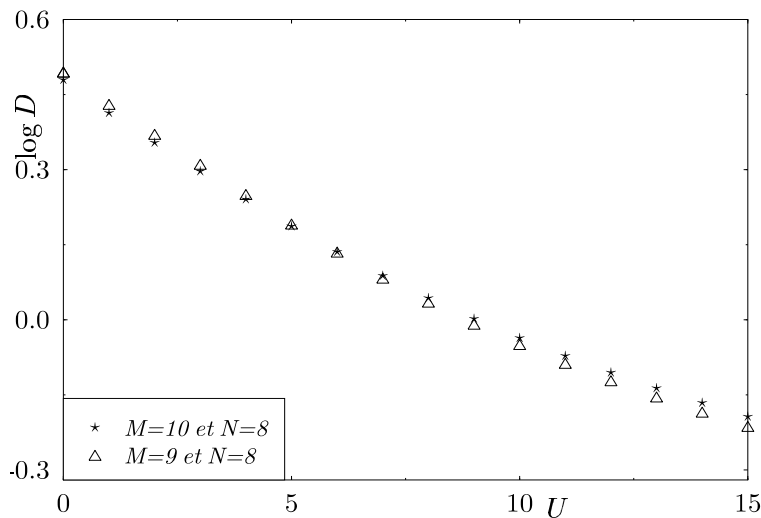


FIG. 4.11: Comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour différents systèmes hors demi-remplissage à désordre nul.

4.3.4 La symétrie particule-trou

Le modèle de Hubbard est caractérisé par la symétrie particule-trou que l'on a évoquée dans le chapitre relatif au modèle de Hubbard et d'Anderson dans la section 3.1.2.

On considère que deux systèmes obéissent à la symétrie particule-trou si son comportement est le même lorsque le nombre de particules que l'on rajoute ou enlève par rapport au demi-remplissage est le même; on peut donc dire qu'une équivalence existe entre les sites doublement occupés et les sites vides.

Encore une fois, ce résultat est illustré par des courbes pour des systèmes commensurables et incommensurables. On présente les résultats pour les cas particuliers de $M = 10$ et $N = 8$, et $M = 10$ et $N = 12$, soit le cas $|M - N| = 2$.

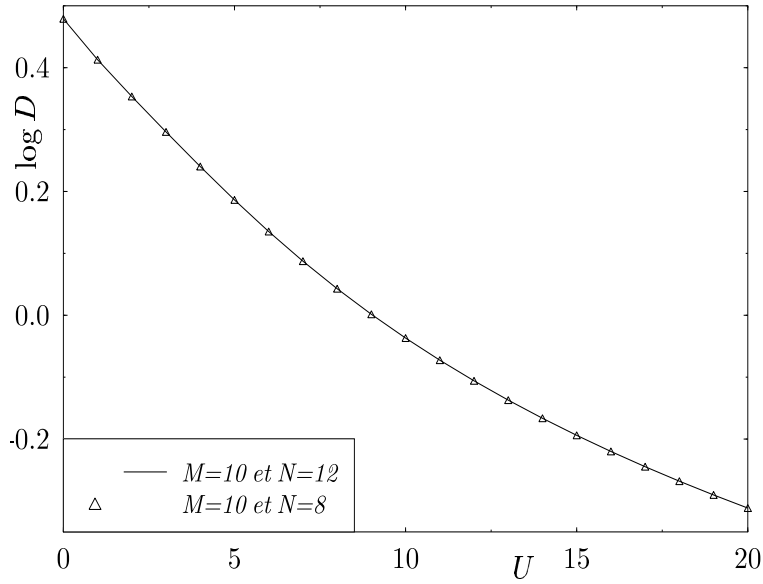


FIG. 4.12: Comparaison du comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour deux systèmes : $M = 10$ et $N = 8$ et $M = 10$ et $N = 12$. Ceux-ci présentent un comportement identique en raison de la symétrie particule-trou.

On vérifie bien que les courbes sont strictement identiques. Un autre système a été vérifié, $M = 9$ et $N = 8$, $N = 10$, et on observe le même comportement. Cela permet de conforter les résultats du programme. Il sera donc suffisant d'étudier les cas dont le remplissage est inférieur au demi-remplissage.

4.3.5 Comparaison de résultats entre diagonalisation exacte et calcul par DMRG

Les résultats obtenus par DMRG peuvent être comparés à ceux calculés par diagonalisation exacte sur de petits systèmes. Pour les valeurs de $\log D$ des échantillons $M = N = 10$ calculées par le biais de la diagonalisation exacte, et celles calculées avec l'algorithme DMRG, on constate que ces valeurs sont inférieures à 10^{-8} quels que soient le désordre et l'interaction, ce

qui donne confiance pour utiliser l'algorithme DMRG pour d'autres systèmes plus grands.

4.4 Conclusion

Ce chapitre est dévolu à la description du programme utilisé dans ce travail qui modélise numériquement l'hamiltonien de Hubbard-Anderson. Ce programme se base sur la méthode numérique DMRG. Cette méthode permet de traiter des systèmes sur réseau en interaction et d'obtenir des résultats précis sur l'énergie de l'état fondamental.

On se trouve dans l'obligation d'avoir recours à l'outil numérique en raison de la taille des hamiltoniens à diagonaliser tout d'abord, mais également, en raison des termes d'interaction et de désordre entrant en compétition pour l'état de base.

Une description de ce programme utilisé dans le cadre de ce travail a été donné dans la seconde partie de ce chapitre. Il va permettre l'étude de nombreux systèmes d'électrons en interaction sur réseau désordonnés (différents remplissages, divers désordres et interactions).

Cependant, tout d'abord, il a fallu valider le programme en effectuant de nombreuses vérifications. Celles-ci ont permis de montrer que le programme donne les résultats escomptés et cela permet de conclure au bon fonctionnement et à la validité du programme puisqu'il revérifie les limites analytiques et numériques connues. On extrapole que ce programme donnera des résultats valides dans des cas qui ne sont pas connus ou calculables analytiquement.

Le prochain chapitre va rendre compte des résultats obtenus avec ce programme et permettre une description des phénomènes d'interaction et de désordre.

Chapitre 5

Une étude numérique des courants permanents : influence du désordre et des interactions

Le chapitre 4 a permis d'introduire pourquoi l'outil numérique est utilisé dans ce travail et la validité du programme a pu être établie dans les limites connues, analytiques et numériques, et on espère que l'outil est valide dans les autres régimes de paramètres qui vont être étudiés.

Les systèmes que l'on va étudier sont des chaînes de M sites fermées sur elle-mêmes, c'est-à-dire des anneaux unidimensionnels désordonnés avec N électrons en interaction. On rappelle que le désordre est introduit par des énergies sur sites Wv_i où W est la force du désordre et les v_i sont des variables aléatoires qui appartiennent à l'intervalle $[-1/2, 1/2]$. L'interaction U est une interaction sur site dont on peut choisir la valeur.

Cet anneau peut être soumis à un champ magnétique et donc à l'influence d'un flux ϕ caractérisé par des conditions de bord entre le dernier et le premier site de l'anneau. Les conditions de bord ne s'expriment donc que dans le terme de saut entre premier et dernier site [41]. Dans le cas de conditions de bord périodiques, quand $\Phi = 0$, le terme de saut entre le premier et le dernier site est égal à $-t$ et négatif car on a posé $t = 1$; dans le cas antipériodique, quand $\Phi = \pi$, le terme de saut entre le premier et le dernier site est égal à $+t$ et positif.

Ainsi, on calcule deux énergies pour les états fondamentaux à multi-particules une à flux nul, l'énergie périodique, et l'autre telle que $\Phi = \frac{2\pi\phi}{\phi_0} = \pi$, ϕ_0 quantum de flux, dite énergie antipériodique.

On pourra alors calculer la sensibilité de phase $\Delta E = E(0) - E(\pi)$ ainsi que la raideur de charge D . Ces quantités peuvent être reliées au courant permanent comme il a déjà été énoncé dans le chapitre 2. On en déduira alors le comportement du courant permanent.

L'étude va se présenter en trois parties : les systèmes à demi-remplissage et ceux hors demi-remplissage, puis une comparaison de leurs comportements respectifs en fonction des interactions et du désordre. On va voir que ces deux types de systèmes présentent des comportements similaires à faible interaction et des comportements différents pour de fortes interactions. Dans ce travail, on a décidé d'étudier les courants permanents à température nulle. On a montré dans la section 2.1.1 comment s'écrit l'expression du courant en fonction de l'énergie du système. Cette expression s'avère bien plus simple à calculer que les propriétés de transport. On calculera la raideur de charge D . Afin de calculer une énergie pour $M = N = 14$, le programme a tourné une heure sur les Origin 3800 du CINES à Montpellier, soit deux heures pour obtenir une valeur de D à un désordre W fixé et une interaction U donnée à $M = N = 14$.

5.1 Hors demi-remplissage

Des calculs numériques ont été effectués sur plusieurs types de systèmes afin d'étudier l'influence de la combinaison des interactions et du désordre sur des anneaux unidimensionnels de tailles différentes et finies. Ces systèmes étudiés sont composés de M sites et contiennent N électrons. Ils sont à des remplissages différents d'un demi et ont donc la particularité de posséder un nombre d'électrons tel que $N \neq M$. Un exemple des résultats pour un échantillon individuel et la moyenne sur les configurations du désordre est présenté dans la figure 5.1.

On appelle échantillon un système de taille M (M sites) contenant N électrons soumis à un potentiel de désordre dont la forme (les v_i) est définie et dénommé par un nombre à quatre chiffres appelé "Seed", défini dans le chapitre 4. Ensuite, cet échantillon peut être considéré pour différentes valeurs de l'interaction U et de l'amplitude du désordre W .

On a étudié des systèmes possédant un nombre M pair et impair de sites.

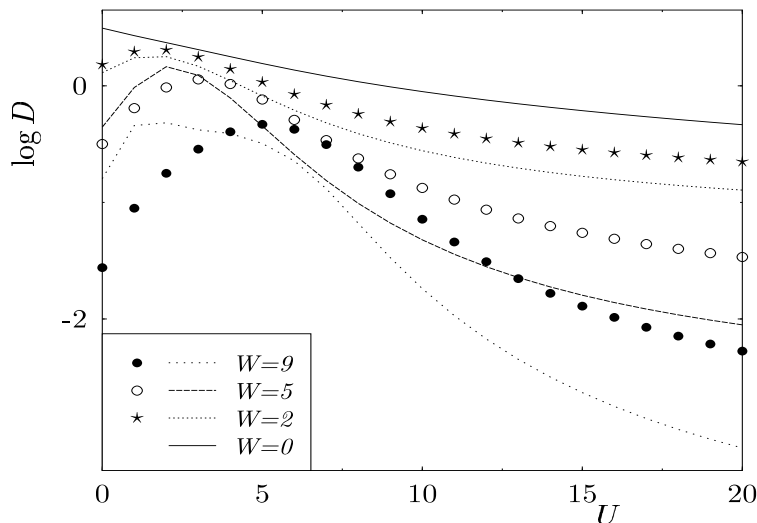


FIG. 5.1: *Comportement de la moyenne et d'un échantillon de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = 9$ et $N = 8$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes obtenues à partir d'une centaine d'échantillons. L'erreur statistique est plus petite que la taille des symboles.*

Pour chaque parité du nombre de sites M , on s'est plus particulièrement intéressé au cas de remplissage avec un nombre pair d'électrons N . Quelques calculs ont été effectués avec un nombre impair d'électrons et donnent des valeurs de la raideur de charge très basses. On va constater que le comportement dépend de la parité du nombre de particules. On présente maintenant les résultats obtenus. On a représenté la moyenne de la raideur de charge $\log D$ ainsi qu'un échantillon en fonction de l'interaction U pour un système de huit électrons sur neuf sites dans la figure 5.1. On présente maintenant la raideur de charge $\log D$ en fonction de l'interaction U pour un système de huit électrons sur dix sites. La comparaison d'un échantillon individuel à la moyenne sur l'ensemble est montrée dans la figure 5.2.

Tout d'abord, on constate qu'à $U = 0$, on retrouve la localisation d'Anderson qui entraîne que lorsque le désordre W augmente, la valeur de D diminue, que l'on considère les échantillons ou les moyennes et quelle que

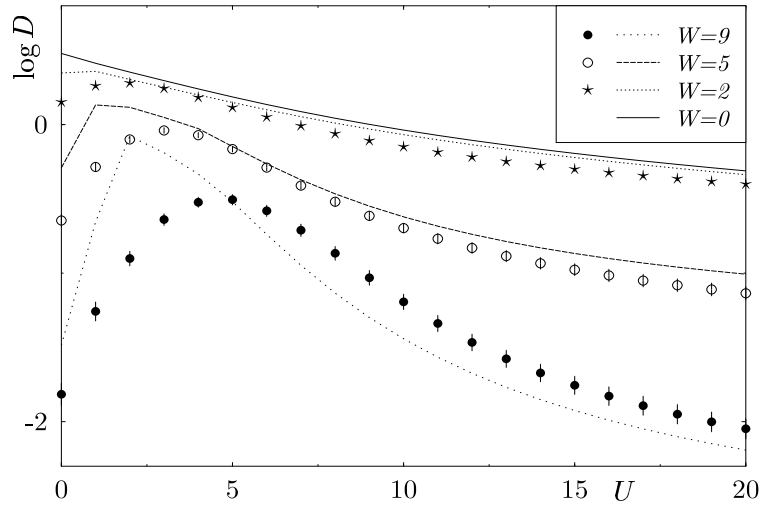


FIG. 5.2: Comportement de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = 10$ et $N = 8$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes obtenues sur une centaine d'échantillons. Les erreurs statistiques représentées par des barres d'erreur au sein des symboles.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = 9$ et $N = 8$	2	1.79	1.3	1.3
$M = 10$ et $N = 8$	1	1.92	1.55	1.03

TAB. 5.1: *Facteurs d'augmentation de deux échantillons $M = 9$, $N = 8$ et $M = 10$ et $N = 8$ pour $W = 2$.*

soit la taille ou le remplissage. La localisation d'Anderson entraîne donc une réduction du courant permanent.

On vérifie également qu'à désordre nul, lorsque l'on augmente l'interaction, $\log D$ diminue. La courbe représentant la raideur de charge à désordre nul en fonction de l'interaction décroît dès lors que l'on introduit de l'interaction.

Ce sont des comportements que l'on a évoqué dans le chapitre 4, dans la section 4.3.

5.1.1 Comportement des échantillons

On va tout d'abord considérer le comportement des échantillons présentés dans ces courbes.

La première constatation est que, quelle que soit la taille de l'échantillon et son remplissage, le comportement de la raideur de charge est similaire. Le nombre de sites M peut être pairs ou impairs et donc, le remplissage peut être commensurable comme incommensurable, ces échantillons ont tous un comportement semblable.

Le premier fait important est que ces courbes ont la particularité de présenter une augmentation de la raideur de charge par rapport à la valeur à interaction nulle pour des valeurs modérées de l'interaction lorsque le désordre est non nul, $W \neq 0$. Le maximum de la raideur de charge se situe dans l'intervalle $[t, W]$ si l'on considère des cas où $W > t$. On illustre ces faits en calculant les facteurs d'augmentations $X = D(U_{\max})/D(U=0)$.

Les résultats pour $W = 2, 5, 9$ sont présentés dans les tableaux 5.1, 5.2 et 5.3.

On note que cette augmentation est très importante et pourrait être reliée aux importantes valeurs expérimentales mesurées. Les facteurs d'augmentation dépendent du remplissage et de la taille de l'anneau, mais ce maximum

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = 9$ et $N = 8$	1	1.46	0.44	3.3
$M = 10$ et $N = 8$	1	0.84	0.42	2.0

TAB. 5.2: Facteurs d'augmentation de deux échantillons $M = 9$, $N = 8$ et $M = 10$ et $N = 8$ pour $W = 5$.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = 9$ et $N = 8$	1	0.48	0.16	3.0
$M = 10$ et $N = 8$	2	0.47	0.06	7.8

TAB. 5.3: Facteurs d'augmentation de deux échantillons $M = 9$, $N = 8$ et $M = 10$ et $N = 8$ pour $W = 9$.

se situe toujours dans l'intervalle $[t, W]$.

Dans la limite de fortes interactions, on constate que le courant diminue lorsque l'interaction augmente. On constate une loi en $1/U$ qui sera présentée dans les figures 5.7 et 5.8.

On remarque également que, lorsque le désordre W augmente, la valeur de la raideur de charge D diminue pour une valeur de l'interaction U donnée. Ceci est en accord avec le fait que le désordre est connu pour localiser les électrons sur les sites de plus bas potentiels. Les électrons ne se placeront pas sur les sites dont l'énergie potentielle est plus élevée.

5.1.2 Comportement des moyennes

Considérons maintenant le comportement des moyennes.

Celles-ci sont effectuées sur une centaine d'échantillons pour chaque valeur de l'interaction U et une valeur de désordre W donnée. Les distributions de D étant approximativement log-normales, les moyennes ont été effectuées sur le logarithme de D . Dans les figures 5.3 et 5.4, on a tracé certaines distributions de la probabilité de $\log D$ à M et N connus et à désordre et interaction fixés afin de montrer comment elles se comportent. La variance σ^2 des fluctuations du logarithme de D est reportée dans les figures 5.5 et 5.6 en fonction de l'interaction et on constate que celles-ci commencent par diminuer jusqu'à des valeurs intermédiaires de l'interaction U et réaugmentent pour

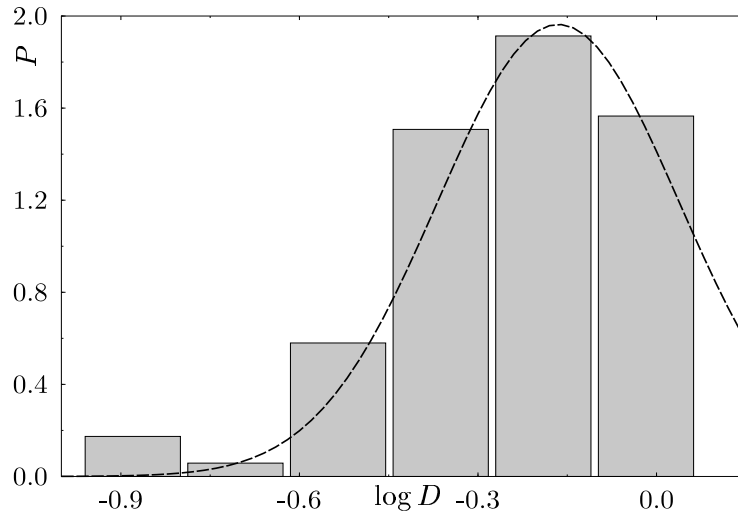


FIG. 5.3: Probabilité de distribution de $\log D$ pour $U = 5$ et $W = 5$ pour le système $M = 10$ et $N = 8$. La ligne en pointillé représente la gaussienne fittée à partir des données numériques.

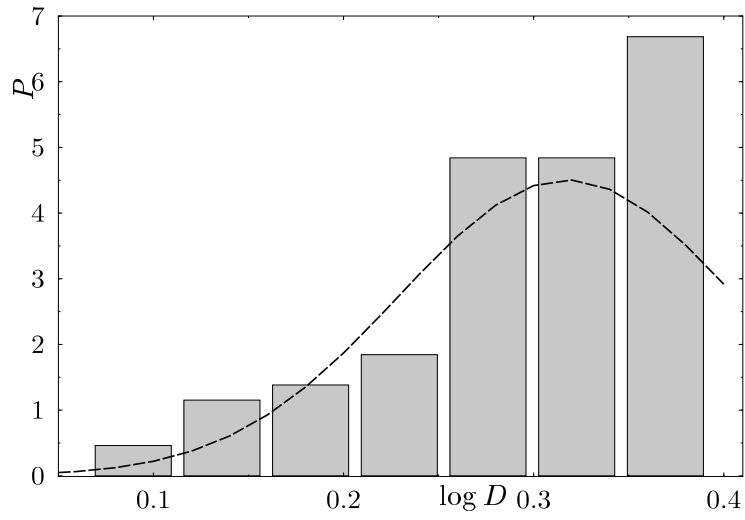


FIG. 5.4: Probabilité de distribution de $\log D$ pour $U = 1$ et $W = 2$ pour le système $M = 9$ et $N = 8$. La ligne en pointillé représente la gaussienne fittée à partir des données numériques.

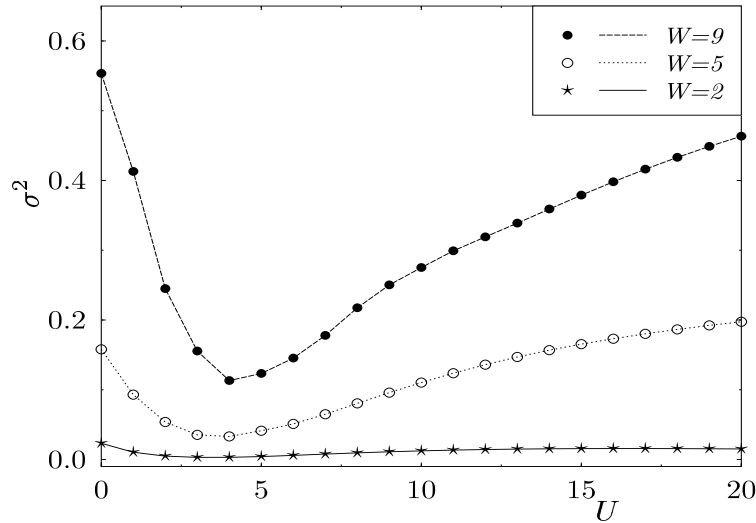


FIG. 5.5: Variance de $\log D$ avec l'interaction U pour $M = 10$ et $N = 8$ et pour différents désordres W . Dans la limite des interactions fortes, celle-ci réaugmente lorsque le désordre W augmente.

des interactions U plus fortes. De plus, elles augmentent avec le désordre W .

Le désordre fait croître les fluctuations lorsque $U \rightarrow \infty$, il faut donc effectuer une moyenne avec un plus grand nombre d'échantillons.

On a vérifié que les erreurs statistiques étaient raisonnables avant d'arrêter ces moyennes, c'est-à-dire que les barres d'erreur permettaient de conclure quant au comportement des courbes en fonction des différents désordres.

On constate que le comportement des moyennes est qualitativement le même que celui des échantillons dans les figures 5.1 et 5.2.

Pour des valeurs intermédiaires de l'interaction U , une augmentation très importante de la raideur de charge par rapport à sa valeur à $U = 0$ se produit en présence de désordre et les valeurs moyennes atteignent des valeurs importantes. Ces résultats seront mentionnés dans les tableaux ci-dessous. De surcroît, on constate que ce maximum survient lorsque l'interaction appartient à $[t, W]$ pour toutes les moyennes comme pour les échantillons.

On va maintenant calculer les facteurs d'augmentation de la raideur de charge D par rapport à sa valeur à interaction nulle et pour diverses tailles de systèmes et divers remplissages.

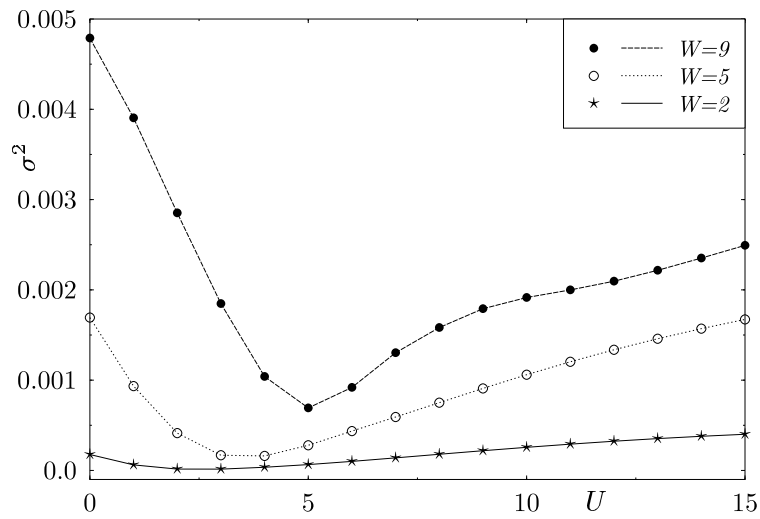


FIG. 5.6: Variance de $\log D$ avec l'interaction U pour $M = 9$ et $N = 8$ et pour différents désordres W . Dans la limite des interactions fortes, celle-ci réaugmente lorsque le désordre W augmente.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = 10$ et $N = 8$	2	1.9	1.4	1.3
$M = 10$ et $N = 6$	2	1.51	1.11	1.4
$M = 10$ et $N = 4$	2	0.9	0.65	1.4
$M = 9$ et $N = 8$	2	2.1	1.65	1.3
$M = 6$ et $N = 4$	1	2.7	3.15	1.17

TAB. 5.4: Facteur d'augmentation de moyennes à $W = 2$.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = 10$ et $N = 8$	3	0.9	0.23	3.9
$M = 10$ et $N = 6$	3	0.6	0.16	3.8
$M = 10$ et $N = 4$	2	0.25	0.1	2.5
$M = 9$ et $N = 8$	3	1.2	0.35	3.4
$M = 6$ et $N = 4$	3	1.9	1.1	1.7

TAB. 5.5: Facteur d'augmentation de moyennes à $W = 5$.

On montre les facteurs d'augmentation $X = D(U_{\max})/D(U=0)$ dus à l'interaction pour différents désordres.

On présente les résultats pour un désordre $W = 2(t)$ dans le tableau 5.4, pour $W = 5(t)$ dans le tableau 5.5 et enfin le cas $W = 9(t)$ dans le tableau 5.6.

Le premier fait important réside dans la très nette augmentation de la raideur de charge D , quel que soit le désordre et pour des valeurs modérées de l'interaction appartenant à l'intervalle $[t, W]$, *quel que soit le système considéré*. Cependant, les valeurs de D n'ont été calculées que pour des valeurs entières de l'interaction U .

On constate que D diminue lorsque la taille M du système augmente et que D diminue lorsque le remplissage N/M diminue (lorsque N diminue à M fixé). La raideur de charge D diminue lorsque le désordre W augmente à M et N fixés.

Les facteurs d'augmentation sont importants quelle que soit la parité du nombre de sites pour un nombre de particules pair. Le remplissage peut donc être commensurable ou incommensurable et ceux-ci ont une valeur élevée.

système	$U_{\max} (t)$	$D(U_{\max})$	$D(U = 0)$	$X = D(U_{\max})/D(U = 0)$
$M = 10$ et $N = 8$	5	0.31	0.015	20
$M = 10$ et $N = 6$	5	0.116	0.0091	12.7
$M = 10$ et $N = 4$	2	0.04	0.016	2.5
$M = 9$ et $N = 8$	5	0.467	0.028	17.0
$M = 6$ et $N = 4$	4	0.56	0.2	2.5

TAB. 5.6: Facteur d'augmentation de moyennes à $W = 9$.

Un fait important est de constater que plus le désordre augmente, plus le facteur d'augmentation est important. Ces facteurs sont les plus importants pour $W = 9$ quel que soit la taille M du système et quel que soit le remplissage N/M .

En revanche, le facteur d'augmentation varie en fonction du remplissage. Plus le remplissage est important, plus le facteur d'augmentation est élevé.

Considérons maintenant la limite des fortes interactions.

On constate que le courant diminue lorsque l'on augmente la force de l'interaction U .

Contrairement au cas des fermions sans spin, pour lesquels le courant permanent sature [46, 7], dans le cas de systèmes avec spin décrits par le modèle de Hubbard-Anderson, celui-ci continue à diminuer quand on augmente l'interaction.

De plus, pour un système de taille et de remplissage donnés, les valeurs de $\langle \log D \rangle$, quand on augmente le désordre W , vont en décroissant ce qui confirme l'effet de localisation. On présente dans les figures 5.7 et 5.8 des résultats pour de fortes interactions afin d'illustrer la loi en $1/U$. Pour un désordre fort $W = 9$, les interactions ne sont pas suffisantes pour atteindre le régime de validité $U \gg W$ de la loi en $1/U$ dans les figures 5.7 et 5.8.

On peut donc conclure que les moyennes et les échantillons font preuve du même comportement quelles que soient les limites.

5.2 Le cas du demi-remplissage

Le demi-remplissage présente des différences importantes par rapport au cas hors demi-remplissage. On va constater que, pour des interactions

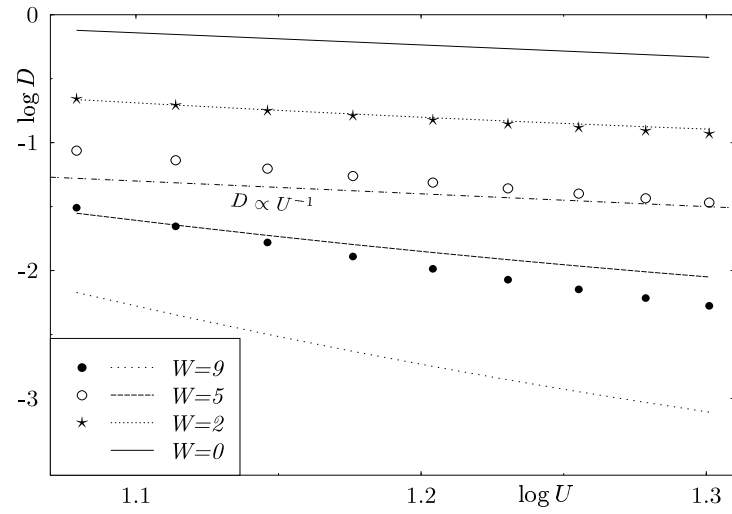


FIG. 5.7: Comportement de D pour de très fortes interactions pour $M = 9$ et $N = 8$. La loi de décroissance de la raideur de charge dans la limite des fortes interactions est en $1/U$.

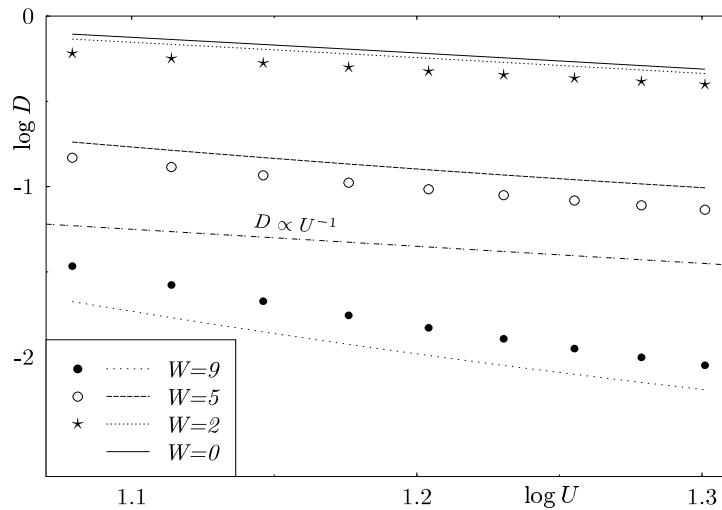


FIG. 5.8: *Comportement de la moyenne D en fonction de U pour $M = 10$ et $N = 8$. La loi est en $1/U$.*

modérées, le comportement est qualitativement le même que celui présenté dans la section 5.1, tandis que des phénomènes inattendus se produisent dans la limite des fortes interactions. Ce travail a fait l'objet d'une publication [118].

Des calculs numériques ont été effectués sur différentes tailles M d'échantillons tous à demi-remplissage. Rappelons que dans le cas du modèle de Hubbard, le demi-remplissage est défini par $M = N$, c'est-à-dire que le nombre de particules est égal au nombre de sites.

On va étudier l'influence du désordre pour ce type de remplissage et constater que le comportement global ne change pas, ni pour chaque échantillon, ni pour les moyennes, par contre, le désordre joue un rôle influent et inattendu dans la limite de fortes interactions. A nouveau, on constate que les échantillons ont le même comportement que la moyenne et que les courbes relatives aux échantillons sont très lisses.

Des résultats sont montrés dans les figures 5.9, 5.10 et 5.11.

On vérifie comme dans la section 5.1, qu'à interaction nulle, le désordre fait diminuer la raideur de charge D lorsque le désordre W augmente. C'est la localisation d'Anderson que l'on a évoqué dans 3.2 et lors des vérifications

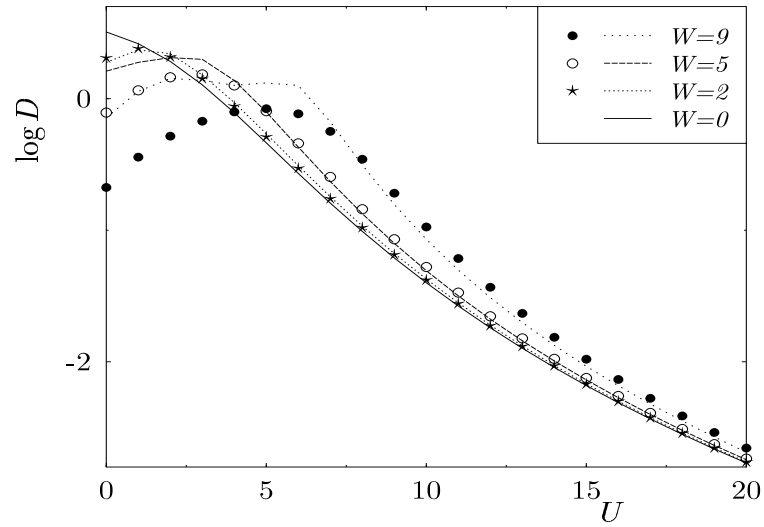


FIG. 5.9: Comportement de la moyenne et d'un échantillon de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = N = 6$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes.

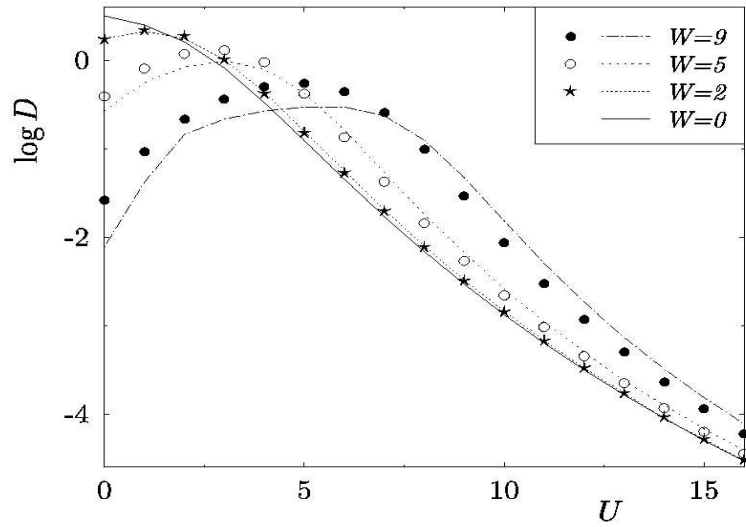


FIG. 5.10: Comportement de la moyenne et d'un échantillon de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = N = 10$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les lignes représentent un échantillon individuel et les symboles les moyennes.

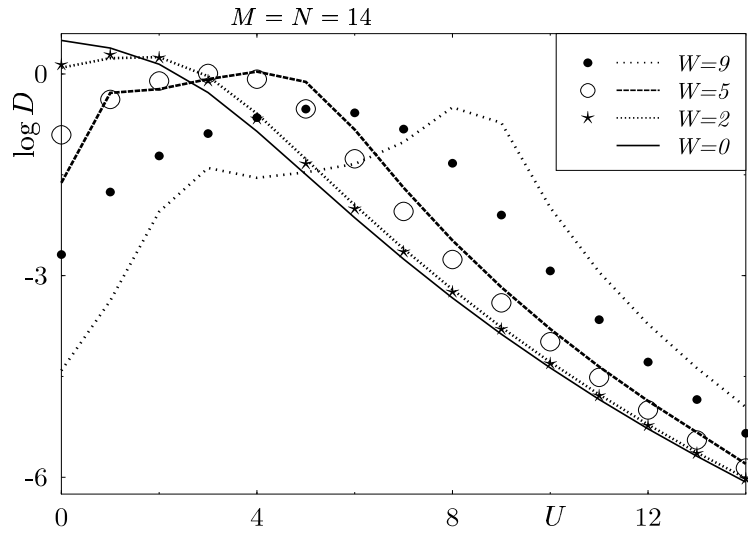


FIG. 5.11: *Comportement de la moyenne et d'un échantillon quelconque de $\log D$ en fonction de l'interaction U pour $M = N = 14$ pour diverses valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les moyennes sont représentées par des symboles et l'échantillon par les lignes.*

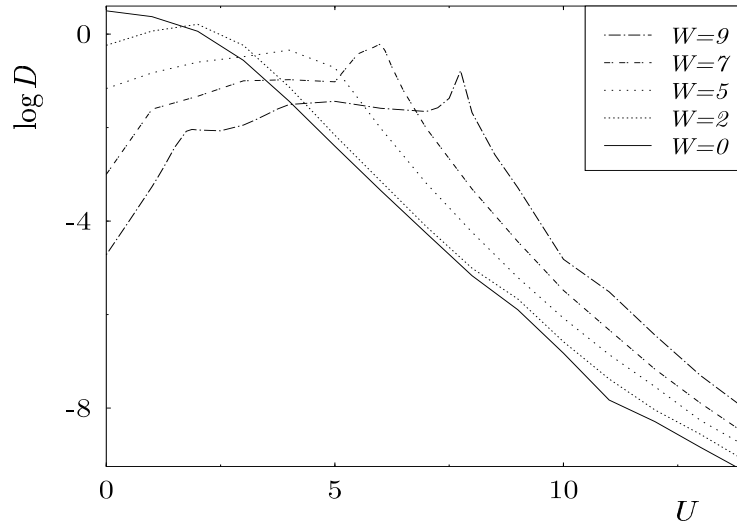


FIG. 5.12: *Comportement de $\log D$ pour un échantillon en fonction de l'interaction U pour $M = N = 20$ pour des valeurs du désordre $W = 0, 2, 5, 9$. Seul un échantillon a été représenté (lignes).*

dans 4.3.2. A désordre nul, lorsque l'on augmente l'interaction, la raideur de charge et donc, les courants permanents, diminuent. On a déjà vérifié de tels résultats dans 5.1. C'est le comportement de 4.3.3.

Ces deux comportements sont obtenus pour les échantillons et les moyennes.

5.2.1 Comportement des échantillons

On présente maintenant le comportement de la raideur de charge à demi-remplissage $M = N$ pour divers échantillons.

On montre le comportement d'un échantillon de $M = N = 20$ en fonction de l'interaction U pour divers désordres W dans la figure 5.12.

On étudie les cas où le nombre de sites est pair (donc, lorsque le nombre d'électrons est pair).

Pour des valeurs intermédiaires de l'interaction à désordre non nul, on retrouve à nouveau une forte augmentation de D par rapport à sa valeur à interaction nulle et donc, des courants permanents. C'est un comportement

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = N = 10$	1	2.17	1.7	1.3
$M = N = 20$	2	1.62	0.58	2.8

TAB. 5.7: Facteurs d'augmentation pour des échantillons à $W = 2$.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = N = 10$	3	1.3	0.4	3.3
$M = N = 20$	3	0.45	0.07	6.4

TAB. 5.8: Facteurs d'augmentation pour des échantillons à $W = 5$.

qualitativement similaire à celui trouvé dans 5.1. On illustre ces faits en calculant les facteurs d'augmentations $X = D(U_{\max})/D(U=0)$.

Les résultats pour $W = 2$ sont présentés dans le tableau 5.7, pour $W = 5$ dans le tableau 5.8 et pour $W = 9$ dans le tableau 5.2.1.

Le maximum de l'augmentation des courbes se fait toujours dans l'intervalle $[t, W]$, ainsi qu'on l'a constaté dans le cas du hors demi-remplissage (dans 5.1) car on a choisi $W > t$.

Un changement s'effectue dans la limite des interactions fortes, bien que D décroisse lorsque l'interaction augmente comme dans le cas du hors demi-remplissage, la loi de décroissance n'est plus la même que dans le cas du hors demi-remplissage et vaut dorénavant $1/U^{M-1}$. Cette loi de décroissance est illustrée dans les figures 5.13 et 5.16.

C'est la loi que nous allons montrer dans la section 7.2. On illustre cette loi dans les figures 5.16 et 5.13.

Les courbes des figures 5.10 et 5.12 pour des différents désordres se croisent: le désordre fait alors **augmenter** le courant permanent dans la limite des interactions fortes. Ce phénomène inattendu doit être confirmé

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	$X = D(U_{\max})/D(U=0)$
$M = N = 10$	5	0.55	0.026	21.1
$M = N = 20$	8	0.0364	0.00002	1800

TAB. 5.9: Facteurs d'augmentation pour des échantillons à $W = 9$.

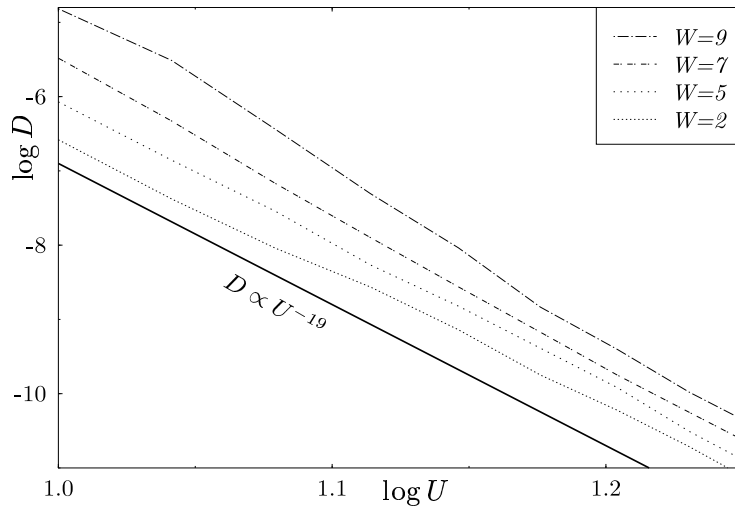


FIG. 5.13: Données de $\log D$ en fonction de $\log U$ pour un échantillon $M = N = 20$. On montre le comportement en $1/U^{M-1} = 1/U^{19}$ pour un échantillon donné.

pour les moyennes.

5.2.2 Comportement des moyennes

On s'intéresse maintenant au comportement des moyennes pour le demi-remplissage $M = N$. Celles-ci sont effectuées sur une centaine d'échantillons pour chaque valeur de l'interaction U et une valeur de désordre W donnée. On constate que le comportement des moyennes est qualitativement le même que celui des échantillons dans les figures 5.10 et 5.11.

Dans la figure 5.14, on a tracé certaines distributions de la probabilité de $\log D$ à M et N connus et à désordre et interaction fixés afin de montrer comment elles se comportent. Il faut rappeler que les distributions sont log-normales, comme dans le cas du hors demi-remplissage, et on présente quelques distributions calculées sur une centaine d'échantillons. On montre que ces distributions peuvent être fittées par des gaussiennes, c'est pourquoi toutes les moyennes ont-elles été effectuées sur le logarithme de D . On a tracé la variance σ^2 du logarithme de D dans les figures 5.15 en fonction de l'interaction. Celles-ci commencent par diminuer jusqu'à des valeurs in-

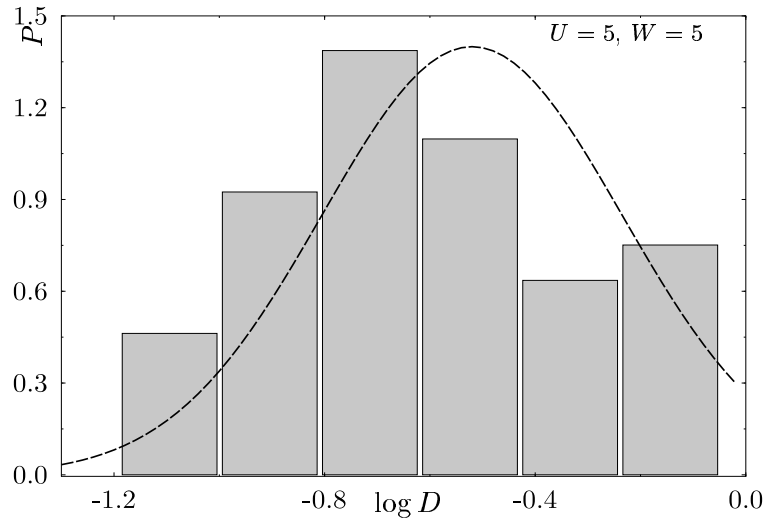


FIG. 5.14: Probabilité de distribution P de $\log D$ calculée sur 100 échantillons pour $M = N = 14$ à $U = 9$ et $W = 5$. Les barres représentent la distribution de $\log D$ obtenue numériquement, et la ligne en pointillé la gaussienne fittée à partir des données numériques.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	facteur d'augmentation
$M = N = 6$	1	2.5	2.0	1.3
$M = N = 10$	1	2.1	1.65	1.3
$M = N = 14$	1	1.9	1.36	1.4

TAB. 5.10: *Facteurs d'augmentations des moyennes pour $W = 2$.*

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	facteur d'augmentation
$M = N = 6$	3	1.5	0.8	1.9
$M = N = 10$	3	1.2	0.3	4.0
$M = N = 14$	3	1.02	0.125	8.1

TAB. 5.11: *Facteurs d'augmentations des moyennes pour $W = 5$.*

termédiaires de l'interaction U et réaugmentent pour des interactions U plus fortes. Cependant, dès que $U > W$, la variance des fluctuations rediminue.

La variance des fluctuations a permis de contrôler la taille des barres d'erreur statistique et de conclure sur le comportement des courbes 5.10 et 5.11, notamment dans la limite des fortes interactions.

On va maintenant décrire le comportement de ces courbes 5.9, 5.10 et 5.11.

Pour des valeurs intermédiaires de l'interaction U , une augmentation de la raideur de charge par rapport à sa valeur à $U = 0$ se produit en présence de désordre. Les valeurs maximales de la raideur de charge D et les facteurs d'augmentation seront exposés dans les tableaux ci-dessous. Ce maximum survient lorsque l'interaction appartient à $[t, W]$ lorsque $W > t$ pour toutes les moyennes, comme dans le cas des échantillons, ainsi qu'on l'a déjà constaté dans le cas du hors demi-remplissage.

On va maintenant calculer les facteurs d'augmentation de la raideur de charge D par rapport à sa valeur à interaction nulle et pour diverses tailles de systèmes et divers remplissages.

On montre, dans les tableaux 5.10, 5.11 et 5.12, les facteurs d'augmentation dus à l'interaction à différents désordres pour un désordre $W = 2(t)$ (faible, $\lambda \ll l_e$), un désordre modéré $W = 5(t)$ et un désordre fort $W = 9(t)$.

On peut faire les mêmes constatations que pour le cas du hors demi-remplissage dans la section 5.1.

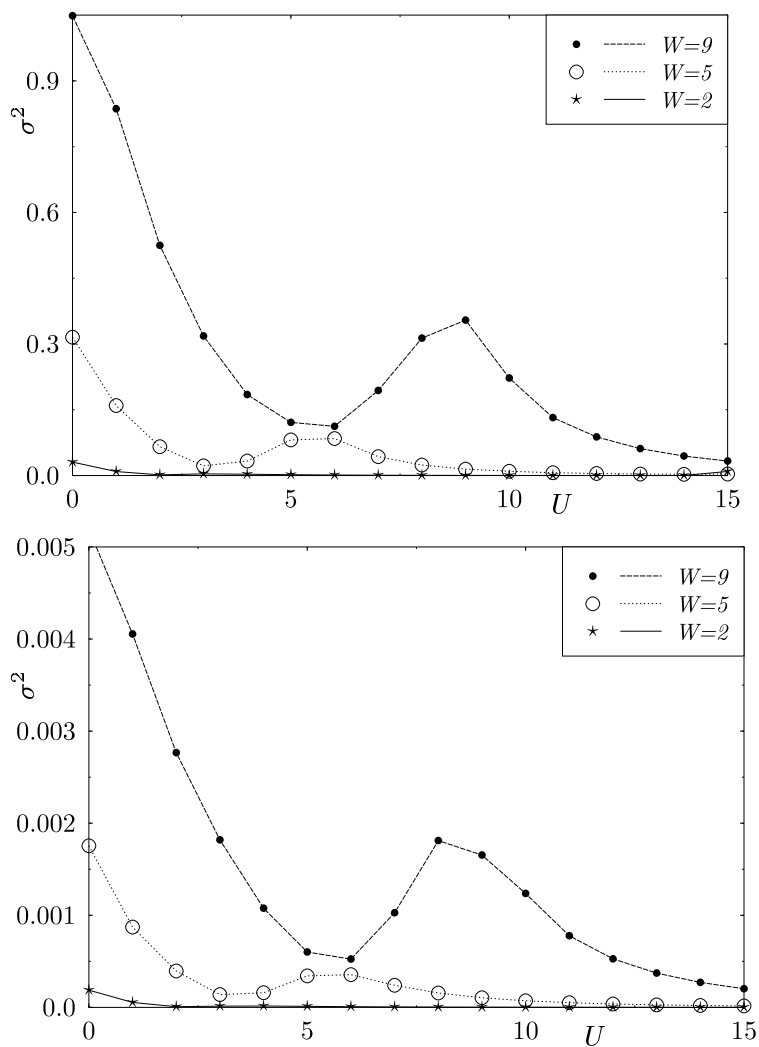


FIG. 5.15: Variance de $\log D$ avec l'interaction U pour $M = N = 14$ et $M = N = 10$. Dans la limite des interactions fortes, la variance diminue lorsque l'interaction augmente.

système	$U_{\max}(t)$	$D(U_{\max})$	$D(U=0)$	facteur d'augmentation
$M = N = 6$	5	0.85	0.2	4.2
$M = N = 10$	5	0.46	0.02	23
$M = N = 14$	5	0.3	0.002	150

TAB. 5.12: Facteurs d'augmentations des moyennes pour $W = 9$.

La raideur de charge D , et donc les courants permanents, diminuent lorsque la taille M du système augmente et lorsque le désordre W augmente [122]. D augmente pour des valeurs modérées de l'interaction U . Cette augmentation est plus forte que dans le cas du hors demi-remplissage, confirmant que le remplissage joue un rôle dans l'augmentation des courants permanents. Plus le remplissage est proche du demi-remplissage, plus le facteur d'augmentation est important.

Les facteurs d'augmentation sont les plus forts dans le cas de fort désordre $W = 9(t)$, quelle que soit la taille du système. Plus le désordre est fort, plus le facteur d'augmentation est important.

Dans la limite des fortes interactions, la raideur de charge D diminue et $\log D$ varie en $1/U^{M-1}$, comme on le montre dans les figures 5.16 et 5.17.

Un fait très surprenant se produit après cette très forte augmentation : les courbes relatives aux différents désordres se croisent et l'on obtient un phénomène très surprenant : dans la limite des très fortes interactions, le désordre permet d'augmenter le courant permanent. Ce phénomène avait déjà été souligné pour des échantillons et une théorie analytique sera développée dans la section 7.2.

5.3 Comparaison

Les deux sections précédentes ont permis de présenter le comportement de la raideur de charge D et du courant permanent en fonction de l'interaction U pour différentes valeurs du désordre W et diverses valeurs de la taille M et du nombre d'électrons N de l'anneau.

A interaction nulle, le courant permanent diminue lorsque l'on augmente le désordre dans le cas du hors demi-remplissage comme dans le cas du demi-remplissage. C'est la localisation d'Anderson [94] qui se produit quelle que

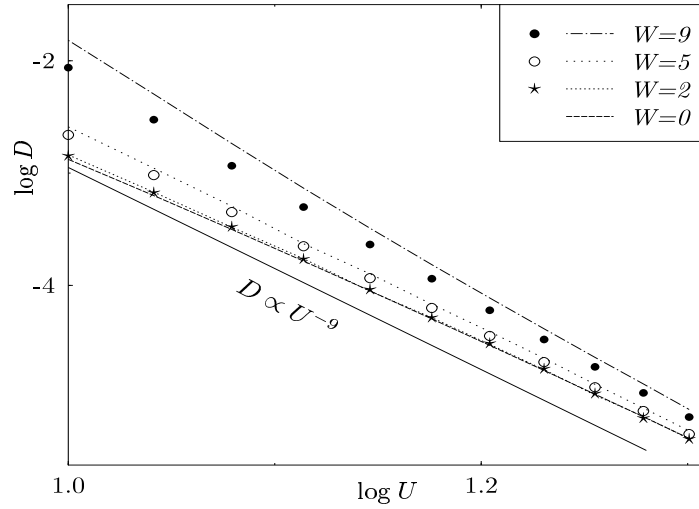


FIG. 5.16: Données de $\log D$ en fonction de $\log U$ pour un échantillon et la moyenne pour $M = N = 10$. On montre le comportement en $1/U^{M-1} = 1/U^9$. Les lignes montrent le comportement d'un échantillon individuel et les symboles sont représentatifs des moyennes.

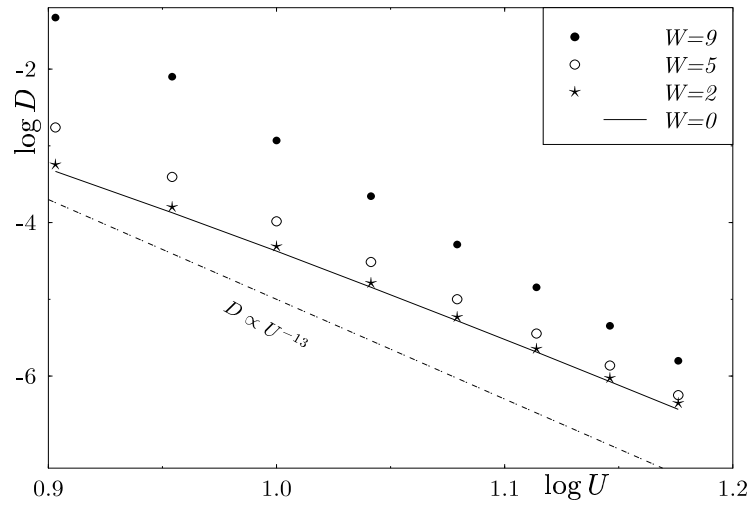


FIG. 5.17: Données de $\log D$ en fonction de $\log U$ pour la moyenne pour $M = N = 14$. On montre le comportement en $1/U^{M-1} = 1/U^{13}$. Les symboles sont représentatifs des moyennes.

soit la taille de l'anneau et le remplissage.

A désordre nul $W = 0$, le courant permanent diminue lorsque l'interaction augmente. C'est à relier au comportement du liquide de Luttinger [93].

De surcroît, même pour un échantillon, la dépendance en U de $\log D$ ne fluctue pas trop et est une courbe lisse; en effet, l'introduction du spin est connu pour uniformiser la densité de charge [119, 56].

L'information importante réside dans l'augmentation très prononcée de la raideur de charge et donc, des courants permanents pour des interactions intermédiaires, lorsque U appartient à l'intervalle $[t, W]$. Une hausse avait déjà été trouvée [5, 7] pour des fermions sans spin mais, avec une ampleur bien moindre et uniquement pour le cas de désordre très fort, tandis que d'autres études travaillant avec des valeurs de désordre modérées, ne trouvent absolument aucune augmentation [65, 66, 60].

Une augmentation de ces courants se produit lorsque interaction et désordre sont en présence et du même ordre. On passe ainsi de la localisation d'Anderson à la localisation de Mott en passant par une hausse importante du courant lorsque ces deux paramètres sont présents. Ceci s'explique par la diminution par les interactions électroniques des fluctuations de densité de charge dans le cas du modèle de Hubbard, contrairement aux fermions sans spin où les interactions augmentent les fluctuations de densité de charge [46]. Les particules s'accrocheront moins au désordre et pourront ainsi se déplacer plus facilement. Cette hausse est attribuée à la compétition entre l'interaction U et le désordre W . En effet, le désordre aura tendance à placer les électrons sur les sites les plus bas en potentiels, tandis que l'interaction aura tendance à placer les électrons seuls sur site. Lorsque ces deux paramètres sont de forces égales, il est difficile de déterminer simplement l'état de base.

Les électrons oscilleront entre se placer à deux sur le même site (énergie U) ou sur deux sites différents mais plus hauts en énergie. Les électrons se déplaceront donc plus facilement soumis à l'influence de ces deux paramètres, entraînant une hausse du courant.

En effet, les interactions répulsives homogénéisent la densité de charge et donc diminuent le couplage avec les impuretés, ce qui conduit à un effet de délocalisation [119]. En revanche, dans le cas des interactions attractives ($U < 0$), les courants sont réduits davantage [4], ce que l'on a vérifié sur quelques systèmes et montré dans la figure 5.18. On peut donc dire qu'une transition a lieu entre un régime où les interactions augmentent les courants permanents ($U < U_{\max}$) et un régime où elles les réduisent lorsque $U > U_{\max}$ [120, 122]. D'autres travaux ont effectivement montré l'existence de ce maxi-

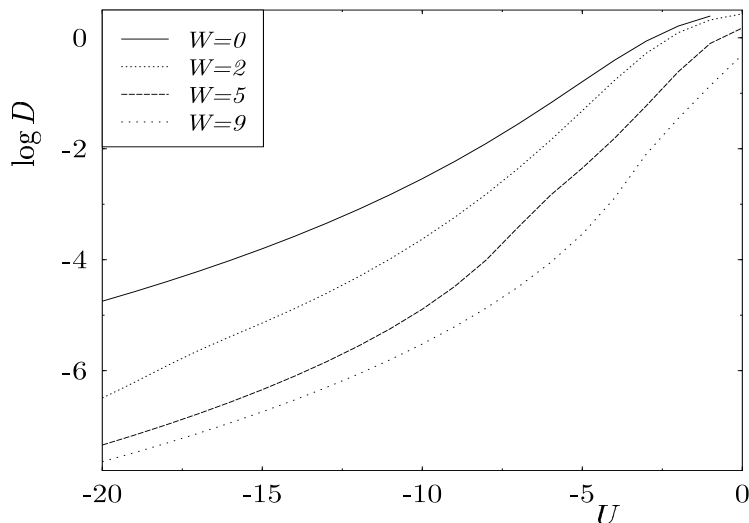


FIG. 5.18: *Comportement de $\log D$ pour un échantillon composé de $M = 9$ sites et contenant $N = 8$ électrons pour des interactions négatives U .*

mum sur de petits systèmes [119, 71, 121]. C'est ce qui a été constaté dans tous les résultats précédemment obtenus. On peut comparer ce maximum de la raideur de charge à une phase délocalisée [123]; celui-ci pourrait être précurseur de la phase métallique à deux dimensions [124]. Après cette valeur U_{\max} , les courants, quel que soit le remplissage, diminuent ce qui est le cas pour tous les types de systèmes étudiés.

On pourra consulter [126] pour une approche de la délocalisation en une dimension dans les systèmes quantiques.

Cependant, il a été montré que la loi de décroissance n'est pas la même en fonction du remplissage (demi-remplissage dans 5.2 et hors demi-remplissage 5.1).

En effet, lorsque $N < M$, le désordre joue un rôle localisant puisqu'il empêche les particules d'accéder à certains sites dont l'énergie potentielle se trouve élevée, tandis que dans le cas du demi-remplissage, pour de très fortes interactions, il y a une particule par site et le désordre n'empêche plus les électrons de se placer sur les sites avec les énergies potentielles les plus hautes.

La loi de décroissance est, pour le demi-remplissage, en $1/U^{M-1}$, et dans le

cas du hors demi-remplissage, elle est en $1/U$. En effet, les électrons à demi-remplissage lorsqu'ils se déplacent, rencontrent toujours un autre électron (car on a toujours un électron par site à demi-remplissage) et un site doublement occupé se crée. Considérons un électron qui fait le tour de l'anneau, il rencontrera $(M - 1)$ électrons, ce qui peut expliquer la puissance de la loi (voir 7.3). Dans le cas du hors demi-remplissage, un électron peut sauter sur un site vide et donc ne pas donner lieu à une énergie U . Cela peut expliquer pourquoi la loi de décroissance est plus faible que celle du demi-remplissage. De plus, si l'on considère les hamiltoniens obtenus par bosonisation [125], ceux dans le cas à demi-remplissage et hors demi-remplissage sont différents et cela confirme que le comportement est différent [78].

Dans le cas du demi-remplissage et dans la limite des fortes interactions, on a constaté que les courbes de $\log D$ en fonction de l'interaction U obtenues pour différents désordres W pour un système $M = N$ donné (échantillon ou moyenne) se croisaient et montraient un phénomène inattendu : le désordre fait augmenter le courant permanent. Ce fait très surprenant peut être relié à nouveau à la compétition entre désordre et interaction. En effet, dans la limite des très fortes interactions, les électrons se retrouvent piégés chacun sur un site et il y a autant de sites que d'électrons. Le désordre ne permet donc plus de sélectionner les sites les plus bas en énergie potentielle puisque chaque site est occupé par un électron. Lorsque l'on augmente le désordre W , l'énergie de l'état fondamental, constitué d'une particule par site, peut redevenir comparable à celle d'un état possédant un site doublement occupé et l'on se retrouve dans la situation où ces deux paramètres W et U peuvent entrer en compétition. Le chapitre 7 permettra d'étudier la limite des interactions fortes et de confirmer ces résultats et ces lois de décroissance.

De plus, on se souvient que le maximum de l'augmentation de la raideur de charge se situe dans l'intervalle $[t, W]$ et lorsque la force du désordre W augmente, cette augmentation a lieu pour des valeurs de l'interaction U de plus en plus élevées et la décroissance ne se passe que plus tard, on constate que plus on augmente le désordre, plus cette hausse s'effectuera tardivement et ainsi, la valeur de D sera plus élevée que pour des désordres plus faibles. On illustre ceci dans la figure 5.19. Donc, $\log D$ diminuera en $(W/U)^2$, et donc, σ^2 en $(W/U)^4$. Dans la limite des très fortes interactions, les fluctuations diminuent lorsque W/U va en décroissant, ce qui explique l'allure des courbes des figures 5.15.

On décide maintenant de comparer dans la figure 5.20 pour un même nombre de sites M le demi-remplissage et le hors demi-remplissage.

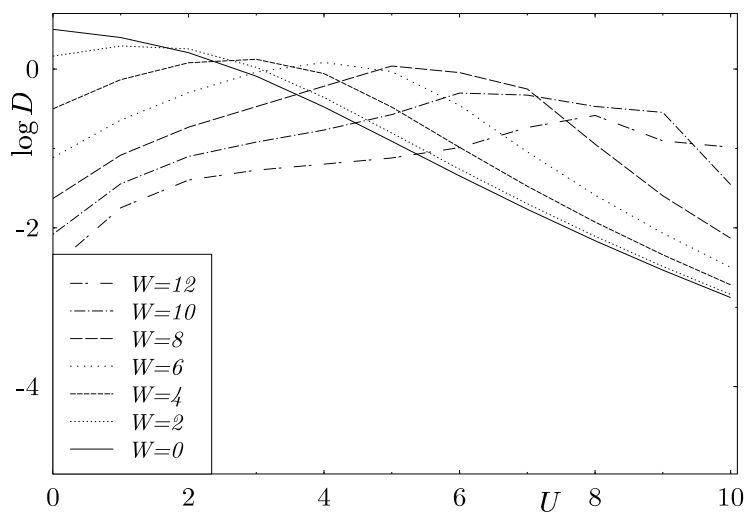


FIG. 5.19: *Comportement de la raideur de charge D en fonction de l'interaction U pour un échantillon $M = N = 10$ pour différents désordres.*

On constate que l'augmentation quel que soit le remplissage est présente mais le maximum est différent et dépend donc du remplissage.

En revanche, dans la limite des fortes interactions, les trous introduits dans le cas du hors demi-remplissage agissent comme un dopage et fait augmenter la valeur des courants permanents ce qui explique que les lois de décroissance soient différentes.

On a également vérifié que la règle de Leggett [45] s'appliquait à notre cas. Celle-ci est valable dans le cas de fermions sans spin et sans interaction. Le signe de ΔE est alors celui de $(-1)^{N_{particules}}$. En l'appliquant au cas des électrons, le signe vaut $(-1)^{N/2}$ [45, 49]. Pour un nombre impair de particules, le signe est à nouveau aléatoire.

On a considéré le signe de la sensibilité de phase pour les cas d'un nombre de sites pair : pour $M = N = 6, 10, 14$, le signe de celle-ci est négatif pour toutes les interactions et les désordres considérés. Mais pour $M = N = 20$, on a un signe positif dans le mêmes cas. Pour un nombre de sites impair, pour $M = N = 7$, la sensibilité de phase a un signe aléatoire, et la sensibilité de phase dépend alors du désordre dans un échantillon donné. Une moyenne est alors très difficile à réaliser puisqu'il faut un très grand nombre d'échantillons.

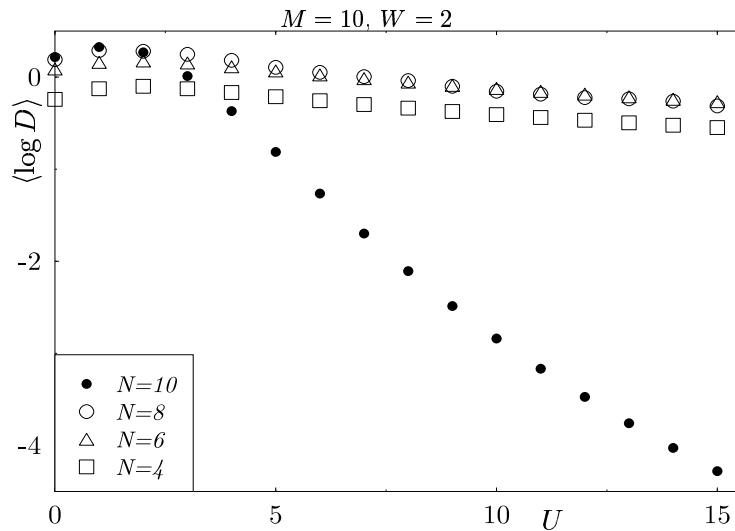


FIG. 5.20: Comportement de $\log D$ en fonction de U pour $M = 10$ et différents remplissages $N = 4, 6, 8, 10$. La loi de décroissance dans la limite des fortes interactions est en $1/U$ dans le cas du hors demi-remplissage et en $1/U^{M-1}$ pour le demi-remplissage.

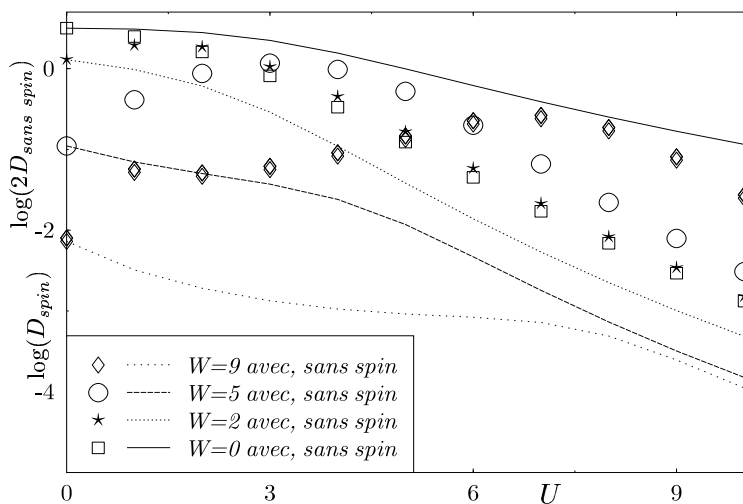


FIG. 5.21: *Comportement de $\log D$ pour un échantillon individuel dans le cas d'électrons ($M = N = 10$) et de $\log(2D)$ ($M = 10$ et $N = 5$) dans le cas de fermions sans spin pour des valeurs de l'interaction $[0, 10]$ et des valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les symboles représentent les valeurs de $\log D$ avec spin et les lignes celles des fermions sans spin.*

Hors demi-remplissage, on a vérifié que cette règle s'appliquait également, c'est $N/2$ qui gouverne le signe de la sensibilité de phase, quel que soit l'interaction ou le désordre dans le cas d'un nombre de particules pair.

On montre le comportement de la raideur de charge D pour des électrons et des fermions sans spin à demi-remplissage dans la figure 5.21.

La comparaison pour le hors demi-remplissage est présentée dans la figure 5.22.

Cela permet d'illustrer l'influence du spin sur l'augmentation de la raideur de charge D et donc des courants permanents. Les courbes avec spin montre une augmentation bien plus importante que celle sans spin.

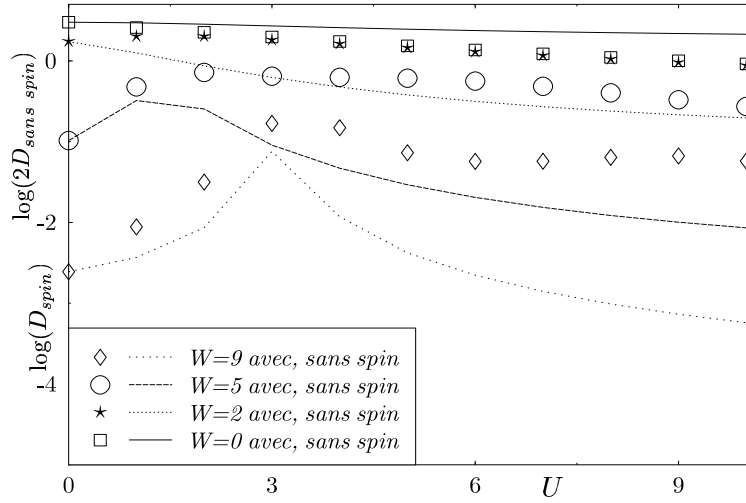


FIG. 5.22: Comportement de $\log D$ pour un échantillon individuel dans le cas d'électrons ($M = 10$ et $N = 8$) et de $\log(2D)$ ($M = 10$ et $N = 4$) dans le cas de fermions sans spin pour des valeurs de l'interaction $[0, 10]$ et des valeurs de désordres $W = 0, 2, 5, 9$. Les symboles représentent les valeurs de $\log D$ avec spin et les lignes celles des fermions sans spin.

5.4 Conclusion

Ce chapitre a permis de constater un comportement commun à tous les systèmes dans la limite des interactions faibles ou modérées. L'interaction et le désordre permettent une augmentation assez importante de la raideur de charge par rapport à sa valeur à interaction nulle et donc, des courants permanents. On peut donc dire que le spin est un paramètre pertinent puisque le modèle des fermions sans spin n'a pu conclure à une telle hausse [7]. De plus, ceci se produit en présence de désordre, même très faible, lorsque l'interaction est ajoutée. Le maximum de la raideur de charge pour des interactions modérées a lieu dans un domaine précis, lorsque l'interaction et désordre sont en compétition, entre $[t, W]$ pour $W > t$.

Pour de fortes interactions, la raideur de charge rediminue quels que soient les systèmes étudiés. Cependant, on constate que le comportement diffère dans les fortes interactions si l'on se place à demi ou hors demi-remplissage. Les lois de décroissance diffèrent car les électrons ne peuvent plus se déplacer de la même façon et on verra comment modéliser cela dans le chapitre 7.

Enfin, à demi-remplissage, dans la limite des très fortes interactions, le désordre permet une augmentation de ces courants permanents, alors que le désordre induit habituellement de la localisation, comme dans le cas du hors demi-remplissage.

On constate également que la règle de signe de Leggett ne change pas lorsque désordre et interaction sont présents dans le cas d'un nombre de particules pair. Le signe est aléatoire dans le cas d'un nombre de particules impair.

Chapitre 6

Effet combiné des interactions et du désordre sur le comportement de la longueur de localisation

Le chapitre 5 a permis de constater que la raideur de charge D augmentait par rapport à sa valeur à interaction nulle pour des interactions modérées en présence de désordre. Le but de ce chapitre est de confirmer l'existence de la hausse des courants permanents par rapport à leur valeur à interaction nulle pour une quantité qui est indépendante de la taille des anneaux, à savoir la longueur de localisation ξ .

Cette quantité ξ , comme on l'a présentée dans le chapitre 2, permet de caractériser les fonctions d'onde d'un système localisé.

On a vu dans le chapitre 3 que le désordre peut mener à la localisation. En absence d'interaction, la localisation des fonctions d'onde à une particule se produit si le désordre est suffisamment fort dans des systèmes à trois dimensions et dès que le désordre est non nul en une et deux dimensions. Cette localisation est caractérisée par le fait que l'enveloppe des fonctions d'onde à une particule décroît exponentiellement dans l'espace réel, sur une longueur ξ .

Les états exponentiellement localisés sont restreints à des régions finies de l'espace et ne peuvent donc pas contribuer au transport à la température du zéro absolu. En revanche, les états étendus permettent un déplacement des particules et une contribution au transport.

Un système unidimensionnel en présence de désordre est alors un isolant d'Anderson [94]. En présence d'interaction et sans désordre, en une dimension, un système sur réseau à demi-remplissage se comporte en isolant de Mott [85].

Le but de ce chapitre est donc d'étudier comment se comporte la longueur de localisation ξ en fonction de l'interaction et du désordre simultanément présents, dans les systèmes étudiés dans le chapitre 5, soit dans les anneaux unidimensionnels.

De nombreuses méthodes numériques existent afin de caractériser cette longueur de localisation. Celle qui sera utilisée dans la suite de ce chapitre est reliée à la sensibilité de l'énergie de l'état fondamental à multiparticules du système aux changements de condition de bord caractérisés par la quantité D . Cette méthode présente l'avantage d'éviter un calcul des vecteurs propres. On choisira donc trois tailles différentes de systèmes, tous à demi-remplissage afin de permettre l'existence d'un isolant de Mott. Ensuite, on fitte $\ln D(M)$ $\ln(D) = \ln(A(U)) - M/\xi(U)$. La pente de cette dépendance en M de $\ln(D)$ donne $-1/\xi(U)$ et sera évaluée par le biais d'une régression linéaire à partir des données de $\log D$ obtenues numériquement et présentées dans le chapitre 5. Les erreurs sont calculées à partir des erreurs obtenues sur les moyennes de $\log D$ en utilisant la formule du χ^2 appliquée à notre cas particulier [128].

Le but de ce travail est de souligner l'importance de la compétition entre désordre et interaction, qui permet d'expliquer ce phénomène de forte augmentation du courant permanent lorsque l'on se situe à des interactions moyennes, entre $[t, W]$, où t est l'élément de saut choisi comme référence unité et $W > t$ le désordre. On va montrer à quel point cet effet délocalisant, présenté dans le chapitre 5 dans le cadre de D en fonction de l'interaction U , se révèle lorsque l'on étudie la longueur de localisation. En effet, on verra que le facteur d'augmentation de la valeur de la longueur de localisation est d'autant plus fort que le désordre est fort.

6.1 Longueur de localisation à désordre nul

Cette partie est consacrée à l'étude des résultats obtenus pour la longueur de localisation ξ à désordre nul. On va vérifier que l'on obtient les résultats analytiques et numériques déjà connus.

Tout d'abord, on vérifie que, en dehors du cas $U = W = 0$, en traçant $\log D$ en fonction de la taille des systèmes considérés, on obtient une bonne approximation de droites.

A $U = W = 0$, le système est délocalisé, puisque l'on est en présence d'un gaz d'électrons libres, la raideur de charge D doit donc être la même quelle que soit la taille du système considéré et la longueur de localisation devrait diverger.

On constate qu'à interaction et désordre nuls, on n'obtient pas des droites; la longueur de localisation ξ à désordre et interaction nuls ne sera pas présentée. ξ doit être infinie car les fonctions d'onde sont des ondes planes. Numériquement, on devrait avoir une droite horizontale mais on ne peut pas reproduire ceci de façon exacte.

Dès que l'interaction est introduite, on obtient des droites, que le nombre de sites soit pair ou impair, ainsi qu'on l'illustre par la figure 6.1.

On calcule alors la longueur de localisation comme il a été expliqué dans l'introduction. On vérifie qu'à désordre nul ($W = 0$), la longueur de localisation diminue en fonction de l'interaction. Quand on augmente la force de l'interaction U , le système se localise, ainsi qu'on l'a présenté dans le chapitre 3, et la longueur de localisation ne fait que décroître quand l'interaction U augmente. On présente maintenant la longueur de localisation ξ en fonction de l'interaction U (figure 6.2). Le comportement de la longueur de localisation est bien celui escompté.

On procède maintenant à d'autres vérifications qui vont permettre de valider le calcul de la longueur de localisation à interaction nulle.

Pour de faibles interactions, on vérifie que la quantité $\xi\Delta$, où $\Delta = 16t^2/U \int_1^\infty \frac{\sqrt{(y^2-1)}dy}{\sinh(2\pi ty/U)}$ est la gap de charge de Lieb-Wu [75], tend vers le résultat calculé en champ moyen ($\xi\Delta)/t = 4$ [131]. A très fortes interactions, on vérifie que l'inverse de la longueur de localisation est une fonction linéaire du logarithme de l'interaction.

Ce comportement est très proche de la solution $\xi^{-1} = -1.48 + \ln(U/t)$ donnée par l'Ansatz de Bethe [131]. On dérivera une expression analytique de la sensibilité de phase dans la limite des fortes interactions dans le chapitre

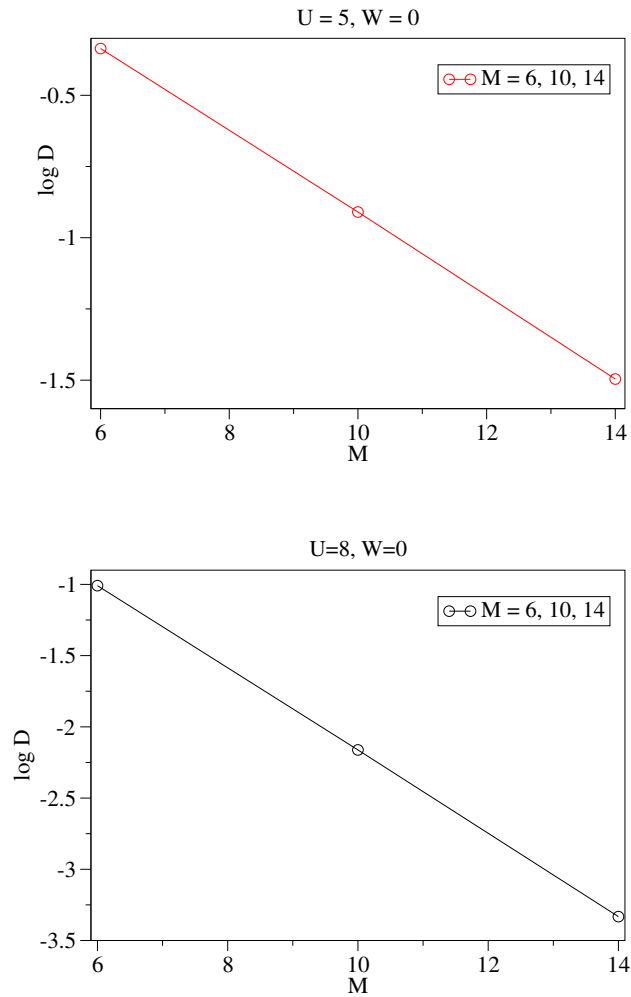


FIG. 6.1: Comportement de la raideur de charge $\log D$ en fonction de la taille du système M pour $U = 5$ et $U = 8$.

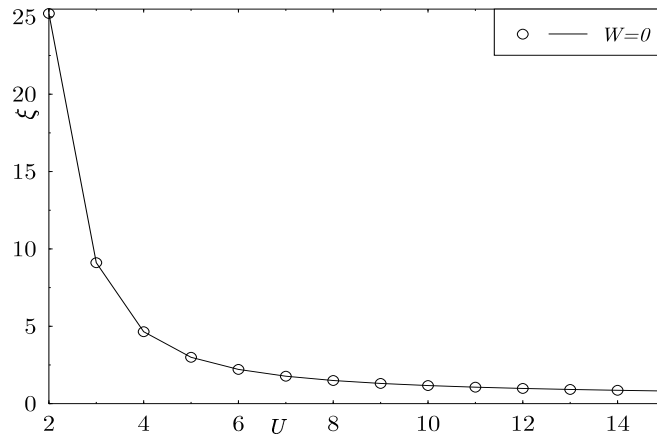


FIG. 6.2: Longueur de localisation ξ à désordre nul $W = 0$ pour le cas d'un nombre pair de sites ($M = 6, 10, 14$). Les symboles représentent les valeurs de ξ obtenues à partir des données numériques de $\log D$. Les lignes joignent ces points.

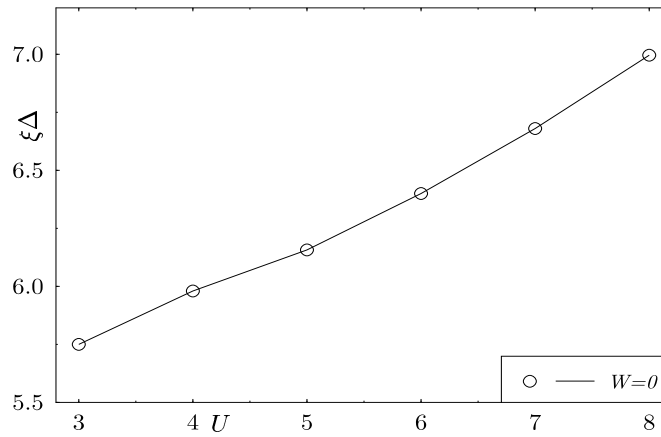


FIG. 6.3: Comportement de la longueur de localisation $\xi\Delta$ en fonction de l'interaction U/t , avec $t = 1$ pour des interactions modérées, $3 < U < 8$. Δ est la gap de charge de Lieb-Wu.

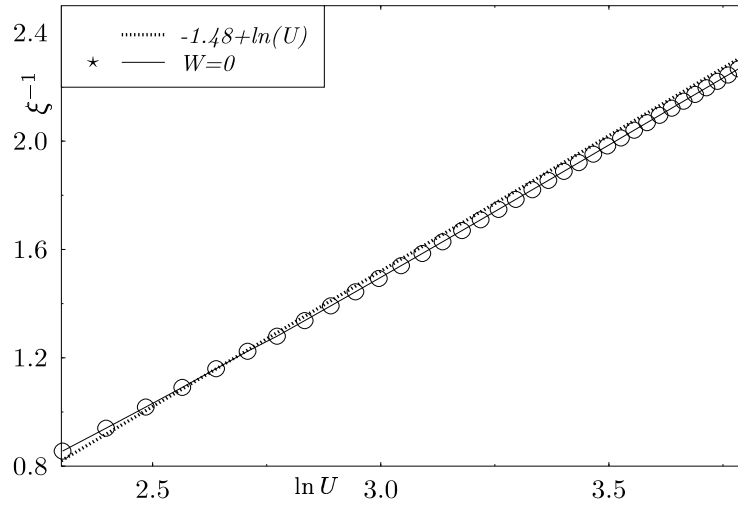


FIG. 6.4: Comportement de l'inverse de la longueur de localisation ξ^{-1} en fonction du logarithme de l'interaction $\ln(U/t)$, avec $t = 1$, pour de fortes interactions lorsque $U > 10$ dans le cas d'un nombre de sites pair. Les symboles représentent les valeurs de ξ^{-1} obtenues à partir des données numériques de $\log D$. La ligne en pointillé est la solution analytique $\xi^{-1} = -1.48 + \ln(U/t)$, donnée par l'Ansatz de Bethe.

7. Son expression comportera un terme en puissance de U , ce qui implique un terme en $\ln(U/t)$ dans l'expression de ξ^{-1} .

Cette section permet de conclure à la validité du calcul de la longueur de localisation, à désordre nul. La suite de ce travail se propose d'étudier le comportement de la longueur de localisation ξ en présence d'interaction et de désordre.

6.2 Longueur de localisation pour différents désordres

Rappelons que nous considérons des systèmes décrits par le modèle de Hubbard-Anderson et on se place à demi-remplissage afin d'obtenir un isolant de Mott dans la limite de forte interaction. Dès que $W \neq 0$, on a un isolant, même lorsque $U = 0$.

On décide de calculer la longueur de localisation pour toutes les valeurs entières de l'interaction U comprises entre $[0, 15]$ pour plusieurs valeurs du désordre W . Pour ce faire, on vérifie, comme dans 6.1, que le logarithme de la raideur de charge est une fonction linéaire de la taille du système M pour une interaction U et un désordre W donnés. On considère les mêmes systèmes que dans la section 6.1. On rappelle que l'on a choisi d'étudier les systèmes suivants : $M = N = 6$, $M = N = 10$ et $M = N = 14$.

La pente de ces droites sera calculée et on en extraira la valeur de ξ en effectuant une régression linéaire à partir des données de $\log D$. On a calculé les valeurs de $\log(D)$ en fonction de l'interaction pour de nombreux échantillons, typiquement une centaine, afin d'obtenir une moyenne.

Quelques-unes des droites $\log D$ en fonction de la taille M des systèmes considérés sont montrées. On montre les droites obtenues pour les valeurs maximales du $\log D$ qui correspondra au maximum de la longueur de localisation. On vérifie l'allure de ces droites à forte interaction (on choisit $U = 10$) pour des désordres $W = 2$, et $W = 9$ dans les figures 6.5 et 6.6. On constate que l'on obtient une bonne approximation de droites, notamment pour des valeurs élevées de l'interaction U .

Dans la figure 6.9, on présente la longueur de localisation ξ obtenue pour les systèmes considérés. Les valeurs sont calculées par le biais d'une régression linéaire, comme on l'a évoqué dans l'introduction de ce chapitre. Les erreurs

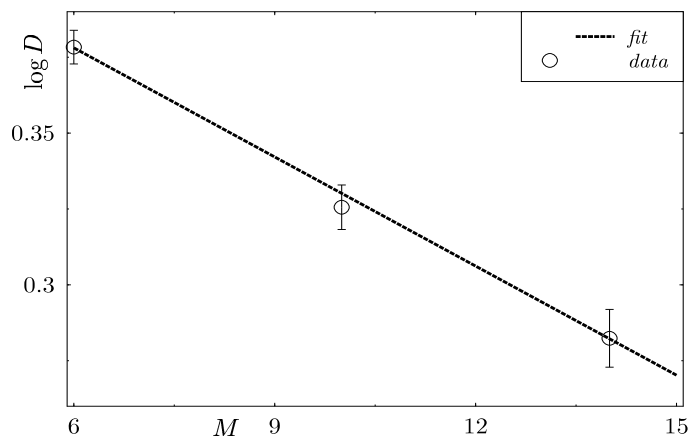


FIG. 6.5: Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $W = 2$ et $U = 1$. Les symboles représentent les moyennes effectuées sur une centaine d'échantillons. La ligne en pointillé montre la droite fittée à partir de ces résultats.

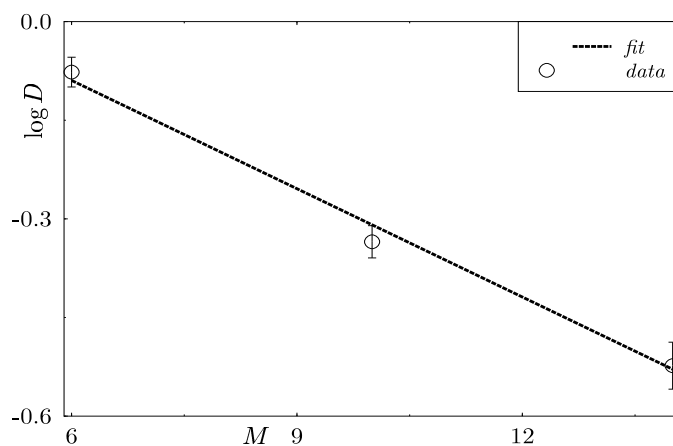


FIG. 6.6: Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $W = 9$ et $U = 5$. Les symboles représentent les moyennes effectuées sur une centaine d'échantillons. La ligne en pointillé montre la droite fittée à partir de ces résultats.

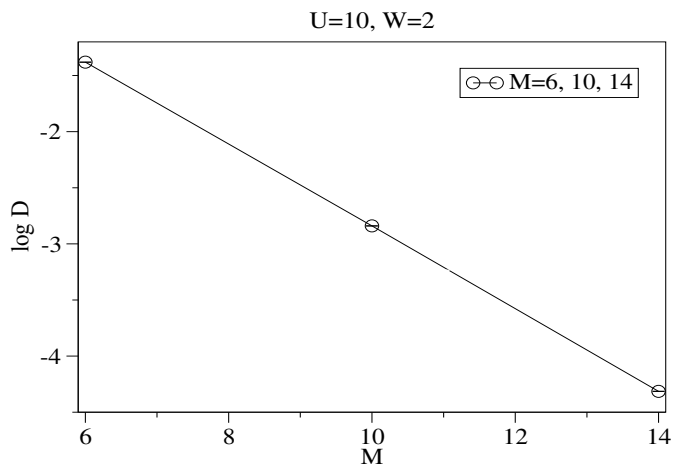


FIG. 6.7: Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $U = 10$ pour $W = 2$. Les symboles représentent les moyennes obtenues à partir d'une centaine d'échantillons. Les lignes sont les droites joignant les points entre eux.

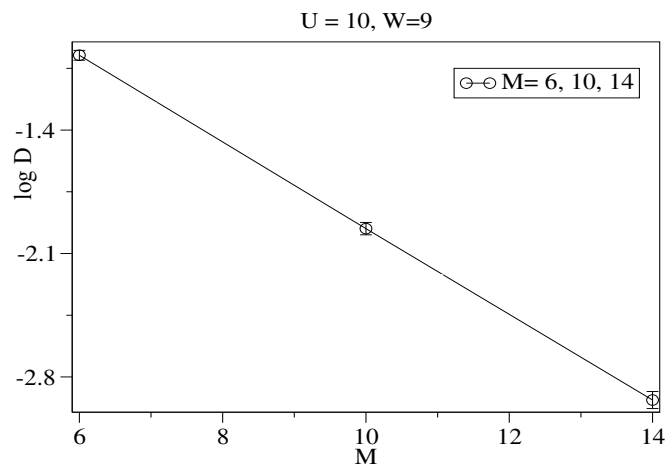


FIG. 6.8: Droite obtenue lorsque l'on trace $\log D$ en fonction de la taille M à $U = 10$ pour $W = 9$. Les symboles représentent les moyennes obtenues à partir d'une centaine d'échantillons. Les lignes sont les droites joignant les points entre eux.

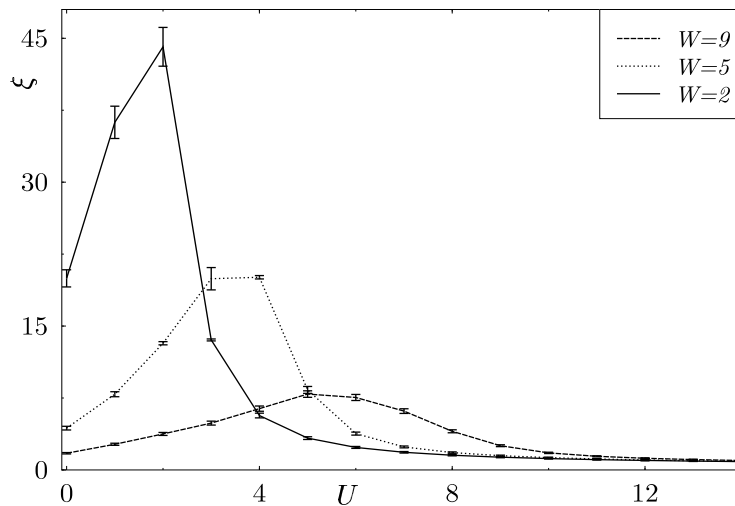


FIG. 6.9: Longueur de localisation ξ en fonction de l'interaction U obtenue à partir d'un nombre de sites pair.

sur les valeurs de la longueur de localisation ξ sont calculées en utilisant la formule de l'écart quadratique moyen (formule du χ^2).

La limite à $U = 0$ montre que la longueur de localisation décroît lorsque le désordre augmente ainsi que la localisation d'Anderson le prévoit. C'est le même comportement que celui de la raideur de charge D à interaction nulle (voir chapitre 5).

Il est important de souligner que l'on passe de l'isolant d'Anderson à l'isolant de Mott en passant par une hausse conséquente de la longueur de localisation ξ pour tous les désordres non nuls W . Les valeurs obtenues pour un désordre $W = 2$ sont très élevées et la longueur de localisation ξ devient supérieure à la taille M du système. Dans ce cas, la méthode de calcul de ξ n'est plus fiable. On ne peut que conclure que la longueur de localisation ξ atteint une valeur très élevée.

On présente les facteurs d'augmentation relatif $\xi_{\max}/\xi(0)$ de la longueur de localisation dans le tableau 6.1.

Ces facteurs d'augmentation sont dans ce cas également importants et se rattachent à l'important effet de délocalisation mentionné dans le chapitre 5. On obtient à nouveau que le maximum des longueurs de localisation ξ se

W (désordre)	ξ à $U = 0$	ξ_{\max}	U_{\max}	facteur d'augmentation
2	20	44	2	2.2
5	4.3	20.1	3	3.4
9	1.75	7.9	5	4.5

TAB. 6.1: *Facteurs d'augmentation de la longueur de localisation.*

trouve à une valeur de l'interaction $U \lesssim W$, car on a considéré $W > t$, ainsi qu'on l'a trouvé dans le chapitre 5.

Cependant, le maximum des longueurs de localisation relatives à un désordre donné W diminue quand le désordre augmente, ce qui correspond au fait que les systèmes se localisent quand le désordre augmente. Cependant, le maximum dans le cas $W = 2$ n'est pas fiable : celui-ci est élevé, mais la méthode appliquée pour le déterminer n'est plus fiable.

Les facteurs d'augmentation relatifs les plus importants sont obtenus pour le plus fort désordre $W = 9$, comme dans la cas de la raideur de charge D .

Dans la limite de fortes interactions, la longueur de localisation diminue lorsque l'interaction U augmente.

Cependant, on constate que dans cette limite, le désordre a l'effet inattendu d'accroître la longueur de localisation. Tous les calculs ont été menés à demi-remplissage et nous constatons le même effet de délocalisation que celui obtenu à partir de la raideur de charge.

6.3 Interprétation

L'étude de la longueur de localisation ξ à désordre nul a permis de retrouver les résultats connus et de valider les résultats obtenus numériquement. On a vérifié notamment que ξ diminue lorsque l'interaction augmente.

On a obtenu les longueurs de localisation pour différentes valeurs de l'interaction U et du désordre W . A interaction nulle, la longueur de localisation diminue lorsque le désordre augmente. C'est la localisation d'Anderson [94].

On a constaté que ξ augmente pour des valeurs modérées de l'interaction U dès que le désordre W est non nul.

On a calculé les facteurs d'augmentation de ces longueurs de localisation dans la section 6.2. Ceux-ci se révèlent relativement importants et soulignent

l'important effet de délocalisation qui peut être relié aux valeurs importantes des mesures expérimentales [104, 103] et peut-être augurer de la transition métal-isolant dans des dimensions supérieures à une [130]. Ceci permet de compléter l'étude de la délocalisation amorcée dans le chapitre 5 et de confirmer ce phénomène de hausse du courant permanent par rapport à sa valeur à interaction nulle. Notons tout-de-même que le système reste toujours localisé et que l'augmentation de ξ ne permet pas d'atteindre les valeurs du cas sans désordre [122].

On peut dire que cette augmentation importante de la longueur de localisation permet d'expliquer la hausse des courants permanents par rapport à sa valeur à interaction nulle. La fonction d'onde est délocalisée sur plusieurs sites et permet aux électrons de se déplacer au sein de l'anneau.

En revanche, on constate que quelques valeurs de la longueur de localisation ξ , surtout pour le désordre $W = 2$ sont supérieures à la taille de l'anneau. Dans ce cas, la loi $D \approx A \exp(-M/\xi)$ n'est pas valide. On sait que D dépend de la taille du système dans ce domaine et on ne peut que conclure que la longueur de localisation ξ est très élevée lorsque $0 < U < 2$.

On a déjà mentionné dans le chapitre 5 que c'est la compétition entre désordre et interaction qui mène à cette augmentation de la longueur de localisation.

On peut donc conclure que le modèle de Hubbard-Anderson permet de rendre compte de ce très fort effet d'augmentation des courants permanents et montre une baisse considérable de la localisation en une dimension.

Cette étude permet de conclure à l'influence du spin dans la représentation des courants permanents. La présence de celui-ci montre une augmentation, et de la raideur de charge D , et de la longueur de localisation ξ , par rapport à leurs valeurs à interaction nulle, comparativement à de nombreuses autres études qui ne montrent aucune augmentation de la raideur de charge D [60, 65] ou une faible augmentation de la raideur de charge D [7] et de la longueur de localisation ξ pour des désordres forts [129]. L'introduction du spin par le biais du modèle de Hubbard-Anderson permet de trouver **une augmentation importante** de ces deux quantités par rapport à leurs valeurs à interaction nulle. De plus, la concurrence désordre et interaction est primordiale dans cette description. La compétition entre les deux états fondamentaux relatifs à ces deux paramètres, ainsi qu'il a été évoquée dans le chapitre 5, permet d'appréhender cette hausse considérable de la raideur de charge et donc, de la longueur de localisation ξ par rapport à leur valeurs à interaction nulle.

Cet effet délocalisant avait été prévu pour des systèmes dont le remplissage N/M , N nombre d'électrons et M nombre de sites, est une fraction non rationnelle (système incommensurable) pour des systèmes loin du demi-remplissage et à remplissage incommensurable [4]. L'étude serait donc à compléter par le calcul de la longueur de localisation pour des systèmes dont le remplissage est incommensurable. On peut cependant conclure à un fort effet délocalisant.

Pour des interactions négatives, une phase délocalisée [5] a également été trouvée et une divergence exponentielle a été calculée analytiquement [119].

Dans la limite des interactions fortes, la longueur de localisation ξ décroît lorsque l'interaction U augmente. C'est la longueur de localisation de Mott qui domine alors [85]. Le système se localise lorsque l'interaction augmente.

Tous les calculs ont été menés à demi-remplissage et nous constatons que, dans la limite des fortes interactions, le désordre fait **augmenter** la longueur de localisation ξ , comme pour la raideur de charge.

6.4 Conclusion

Ce chapitre a permis de retrouver des limites connues de la longueur de localisation à désordre nul. Cela permet de valider les résultats obtenus à partir des données numériques de la raideur de charge D . On peut alors étudier le cas de la longueur de localisation en présence d'interaction et de désordre. On a pu alors constater que, pour des interactions intermédiaires $U \lesssim W$, une augmentation importante de la longueur de localisation par rapport à sa valeur à interaction nulle se produit. Cette hausse importante a lieu dès que le désordre est non nul.

Ce phénomène avait déjà été annoncé lors du chapitre 5 lorsque l'on étudiait l'augmentation de la raideur de charge en fonction de l'interaction et une confirmation vient d'en être donnée. L'interaction augmente la longueur de localisation dès que le désordre est non nul et c'est dans le cas d'un désordre fort, que l'effet relatif est le plus important, bien que la valeur maximale de la longueur de localisation soit plus faible que dans le cas d'un désordre faible.

Cette augmentation pourrait être précurseur de la transition de phase métal-isolant en deux dimensions.

Ce phénomène est attribué à la présence du spin et à la compétition désordre et interaction.

On retrouve à demi-remplissage que la longueur de localisation, dans la limite des très fortes interactions diminue lorsque les interactions croissent, mais augmente quand le désordre augmente. Le désordre jouerait donc un rôle délocalisant dans cette limite, ce qui n'est pas l'effet normalement obtenu.

Chapitre 7

Courant permanent dans la limite des interactions fortes

Ce chapitre est consacrée à **la limite des fortes interactions répulsives** : celle-ci est une limite qui permet un traitement analytique en dehors du cas à interaction et désordre nuls. On va étudier le comportement des courants permanents dans cette limite par le biais d'une théorie en perturbation. Dans la limite de très fortes interactions, $U \gg W, t$, on peut considérer que le désordre est un terme en perturbation qu'on ne considérera que par la suite. On s'intéresse à l'état fondamental de notre anneau unidimensionnel lorsque le terme des interactions est très important et impose des conditions très fortes sur la nature des états propres.

On va constater que le comportement du courant permanent diffère selon que l'on se place à demi-remplissage ou en dehors et l'on obtient des lois de décroissance du courant permanent avec l'interaction différentes.

Pour ce faire, on développe une théorie en perturbation pour calculer la sensibilité de phase, quantité représentative des courants permanents.

On constate un phénomène intéressant : hors demi-remplissage, le désordre joue son rôle habituel de localisant; tandis qu'à demi-remplissage, celui-ci fait **augmenter** la valeur des courants permanents. Ce problème a déjà fait l'objet d'une publication [118]. Ces résultats seront une confirmation des lois numériques présentées dans le chapitre 5.

7.1 Cas d'un anneau de Hubbard-Anderson dans la limite des interactions fortes

On considère l'anneau unidimensionnel sur réseau du chapitre 3 traversé par un flux ϕ . Celui-ci est composé de M sites et contient N électrons. Le désordre est représenté par un potentiel aléatoire sur site et l'interaction est répulsive sur site. Les sauts sont restreints aux plus proches voisins. Cet anneau est décrit par l'hamiltonien de Hubbard-Anderson donné en seconde quantification par la formule 3.1. Cet anneau peut être soumis à un champ magnétique et donc à l'influence d'un flux ϕ caractérisé par des conditions de bord entre le dernier et le premier site de l'anneau. Les conditions de bord ne s'expriment donc que dans le terme de saut entre premier et dernier site [41]. Dans le cas de conditions de bord périodiques, le terme de saut entre le premier et le dernier site est égal à $-t$ et négatif car on a posé $t = 1$; dans le cas antipériodique, le terme de saut entre le premier et le dernier site est égal à $+t$ et positif.

Ainsi, on calcule 2 énergies, une à flux nul, l'énergie périodique, et l'autre telle que $\Phi = \frac{2\pi\phi}{\phi_0} = \pi$, ϕ_0 quantum de flux, dite énergie antipériodique.

On se souvient que l'hamiltonien de Hubbard possède une symétrie de rotation de spin et que l'on peut restreindre la recherche de la valeur propre au sous-espace S_z le plus petit.

On écrit tous les états de base comme produits d'états sur site. On pose que l'état vide s'appelle $|0\rangle$. Il faut remplir ensuite cet état vide par les N électrons. On remplit avec $N/2$ électrons avec spin up et $N/2$ avec spin down.

Les états de base s'écrivent ensuite :

$$|\psi_\alpha\rangle = \left(\prod_{k=1}^{N/2} c_{i_k^\uparrow(\alpha),\uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{k=1}^{N/2} c_{i_k^\downarrow(\alpha),\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (7.1)$$

$i_k^{\uparrow(\downarrow)}(\alpha)$ est une fonction qui sélectionne les sites qui sont occupés par les $N/2$ \uparrow (\downarrow) électrons ($k = 1, 2, \dots, N/2$) dans la configuration α . L'état est complètement spécifié par les valeurs des fonctions $i_k^{\uparrow(\downarrow)}(\alpha)$. k est une numérotation des électrons et $i_k^{\uparrow(\downarrow)}(\alpha)$ correspond au numéro de site occupé par un électron \uparrow ou \downarrow .

En effet, considérons par exemple un état $|\psi_\alpha\rangle$ déterminé par i_k^\downarrow et i_k^\uparrow avec k dans l'intervalle $[1, N/2]$. On a donc le tableau 7.1 de points suivants pour $M = 8$ et $N = 8$.

7.1. CAS D'UN ANNEAU DE HUBBARD-ANDERSON DANS LA
LIMITE DES INTERACTIONS FORTES

k	i_k^\uparrow	i_k^\downarrow
1	1	1
2	3	2
3	4	5
4	7	8

TAB. 7.1: Exemple de répartition des électrons \uparrow ou \downarrow (fonctions i_k) correspondant à un état de base de l'hamiltonien de Hubbard (voir texte).

Il est composé de 8 électrons dont 4 électrons avec spin up et 4 avec spin down répartis comme présenté ci-dessus.

Ainsi définis, les états peuvent être classés en deux sous-espaces :

- le sous-espace des états non doublement occupés, en l'occurrence, l'espace des états à une particule par site dans ce cas précis du demi-remplissage. Ce sous-espace est noté comme lors du chapitre 3 \mathcal{S} .
- le sous-espace des états possédant au moins un site doublement occupé noté \mathcal{D} . Le nombre de sites doublement occupés varie donc de un à $N/2$.

Dans la limite de fortes interactions, les états ayant des sites doublement occupés ont alors une énergie très haute comparativement aux états de l'espace \mathcal{S} qui possèdent un ou zéro électron par site. En effet, chaque état appartenant à \mathcal{S} ou \mathcal{D} correspond à une énergie :

$$E_\alpha = E_\alpha^W + E_\alpha^U \tag{7.2}$$

avec :

$$E_\alpha^W = W \sum_k \left(v_{i_k^\uparrow(\alpha)} + v_{i_k^\downarrow(\alpha)} \right) \tag{7.3}$$

$$E_\alpha^U = U \epsilon_\alpha \tag{7.4}$$

où ϵ_α est le nombre de sites doublement occupés.

On peut donc considérer que dans le cas du modèle de Hubbard dans la limite des très fortes interactions, seul l'espace \mathcal{S} pourra déterminer l'état fondamental. Le traitement afin d'obtenir cet état fondamental diffère en

fonction du remplissage. En effet, on se souvient dans la chapitre 3 qu'à demi-remplissage, on est en présence d'un isolant de Mott [72]. On se souviendra également qu'une solution en une dimension existe [75, 76].

C'est maintenant que nous allons développer une théorie en perturbation afin de calculer la sensibilité de phase $\Delta E = E(0) - E(\pi)$ dans la limite $U \gg t$. L'écriture de l'état fondamental est fonction du remplissage ainsi que des conditions de bord, c'est pourquoi cette étude va être séparée par la suite.

Afin d'élucider le comportement de la raideur de charge dans la limite de ces très fortes interactions, un développement en perturbation de la sensibilité de phase va être effectué lorsque $U \gg W, t$. On va tout d'abord se placer dans un cas sans désordre, puis, le réintroduire en perturbation. Quand l'interaction domine, il est possible de développer cette sensibilité de phase ΔE en termes de t/U . L'hamiltonien se décompose ainsi :

$$H = H_0 + H_W, \tag{7.5}$$

en posant :

$$H_0 = H_U + H_K \tag{7.6}$$

On présente un théorème qui va permettre d'appliquer une théorie de perturbation dans la limite des fortes interactions [101, 132].

Lemme : caractérisation de la limite des interactions infinies. *La limite $U \rightarrow \infty$ du modèle de Hubbard est équivalent à étudier l'action de l'hamiltonien $\tilde{H} = P_0 H_K$ sur l'espace de Hilbert \mathcal{S} où P_0 est la projection sur l'espace \mathcal{S} .*

Dans les cas du demi-remplissage comme hors du demi-remplissage, l'hamiltonien H_K sera traité comme la perturbation de H_U et son action dans l'espace des états propres va permettre de déterminer le comportement de la sensibilité de phase dans la limite $U \gg W, t$. Le terme de désordre sera traité ensuite en perturbation en développant les termes de l'expression de la sensibilité de phase dépendant de l'interaction. On remplacera la valeur de l'énergie sur site U par une énergie contenant également du désordre.

7.2 Demi-remplissage

Cette section est dévolue à l'étude des systèmes à demi-remplissage, c'est-à-dire ayant autant de sites que d'électrons, $M = N$.

On construit les états de la base dans le sous-espace \mathcal{S} des états contenant un électron par site et qui a déjà été précédemment défini dans la section précédente par l'équation 7.1. On se place dans le cas d'un nombre pair de particules, et donc de sites, pair. Les états sont écrits dans la restriction du sous-espace $S_z = 0$ si le nombre de particules est pair, c'est-à-dire qu'il y aura autant d'électrons avec des spins up que d'électrons avec des spins down.

Les états possédant tous un électron par site, leurs énergies à $U/t \rightarrow \infty$ valent :

$$E_0^W = W \sum_{i=1}^{M=N} v_i. \quad (7.7)$$

Cette énergie est la même pour toutes les configurations de spin à une particule par site et ces états sont donc tous dégénérés.

7.2.1 Analogie avec le modèle de Heisenberg : modèle de Hubbard à demi-remplissage

A demi-remplissage, dans la limite $U/t \rightarrow \infty$, le nombre d'occupation n_i vaut 1 quel que soit i . Dans cette limite, l'hamiltonien effectif correspondant au modèle de Hubbard se trouve être le modèle de Heisenberg H^{HQM} pour spin égal à $1/2$. En étudiant celui-ci, il sera possible de déterminer la partie spin de l'état fondamental de notre système dans la limite $U \rightarrow \infty$. La suite de cette section va me permettre de présenter quelques théorèmes qui permettent de déterminer l'écriture de l'état propre.

Le modèle antiferromagnétique de Heisenberg de spin $1/2$ apparaît comme l'hamiltonien effectif des isolants de Mott [8, 72] pour un nombre de particules et de sites pairs. Cet hamiltonien est rotationnellement invariant puisqu'il commute avec les trois composantes du spin total $S_{TOT} = \sum_i S_i$. Ainsi, les états propres sont libellés par :

$$\Psi = |\hat{S}_{TOT}, m_B, \dots\rangle, \quad (7.8)$$

$$m_{B,z} = -S_{TOT}, S_{TOT} + 1, \dots, S_{TOT}, \quad (7.9)$$

$$S_{TOT} \leq NS \quad (7.10)$$

où m_B est la valeur propre de la composante z de la magnétisation totale \hat{S}_{TOT}^z et la valeur propre de \hat{S}_{TOT}^2 est $S_{TOT} \cdot (S_{TOT} + 1)$.

Lorsque l'on se restreint à un sous-espace précis m_B et on développe les fonctions d'onde :

$$\Psi^{m_B} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{m_B} \tilde{\Phi}_{\alpha}^{m_B}, \quad (7.11)$$

avec :

$$\tilde{\Phi}_{\alpha}^{m_B} = \Pi |S, \tilde{m}_i^{\alpha}\rangle_i \quad (7.12)$$

en précisant que les $|S, \tilde{m}_i^{\alpha}\rangle_i$ sont les configurations d'Ising et forment la base relative à \hat{m}_B . On a $\sum_i \tilde{m}_i^{\alpha} = m_B$ et les \tilde{m}_i sont les valeurs de la magnétisation sur site i . Les $|S, \tilde{m}_i^{\alpha}\rangle_i$ dénotent les états propres de S_i^2, S_i^z avec les valeurs propres $S(S+1)$ et m_i .

Voici le premier théorème de Marshall [8] :

état de base de l'hamiltonien de Heisenberg. *On considère l'hamiltonien de Heisenberg avec des échanges antiferromagnétiques $J_{ij} \geq 0$ qui connectent deux sous-réseaux bipartites A et B de telle sorte que chaque site est connecté par une séquence d'échanges finis avec son voisin. Dans chaque secteur m_B , l'état d'énergie le plus bas $\Psi_0^{m_B}$ peut être défini en ayant tous ses coefficients positifs dans la base d'Ising $\tilde{\Phi}_{\alpha}^{m_B}$ soit :*

$$\Psi_0^{m_B} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{m_B} \tilde{\Phi}_{\alpha}^{m_B}, f_{\alpha}^{m_B} > 0, \forall \alpha \quad (7.13)$$

L'état de base Ψ_0 quand on a autant d'électrons de spin \uparrow que de spins \downarrow est un singulet de spin total nul : $\hat{S}_{TOT}^2 |\Psi_0\rangle = 0$.

Plusieurs corollaires s'ensuivent de ces théorèmes et voici l'un d'entre eux : Pour n'importe quel m_B , Ψ_0 est non dégénéré.

Tous ces théorèmes ont été par la suite généralisés par Lieb, Schultz et Mattis aux systèmes décrits par l'hamiltonien de Hubbard. De nombreuses études et articles existent sur tout type de réseau (fcc, bcc ...) [133, 84], et notamment des réseaux bipartites. Pour des revues plus spécialisées, on peut consulter les travaux de Lieb et de Tasaki [148, 132]. Cependant, ces règles s'appliquent dans le cas d'un nombre de sites **pair**.

Cela signifie que l'on peut donc donner l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ de notre système dans la limite de Mott-Hubbard ($U \rightarrow \infty$) dans les notations suivantes dans le sous-espace $S_z = 0$:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\beta} f_{\beta} |\psi_{\beta}\rangle \quad (7.14)$$

où les poids f_{β} sont pris réels et positifs $0 < f_{\beta} < 1$ [72]. On peut réécrire l'état de base en utilisant les fonctions définies ci-dessus i_k . Puisque chaque site est peuplé d'un seul électron, cela mène à la relation $i_k^{\uparrow} \neq i_{k'}^{\downarrow} \forall k \neq k'$. L'état fondamental s'écrit ainsi :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\beta} f_{\beta} \left(\prod_{k=1}^{N/2} c_{i_k^{\uparrow}(\beta), \uparrow}^{\dagger} \right) \left(\prod_{k=1}^{N/2} c_{i_k^{\downarrow}(\beta), \downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (7.15)$$

avec $f_{\beta} > 0$ sont encore réels et positifs pour toute configuration β dans le sous-espace \mathcal{S} .

7.2.2 Calcul de la sensibilité de phase à demi-remplissage dans la limite des fortes interactions

Il s'agit dorénavant de déterminer la sensibilité de phase et donc tout d'abord, les énergies à flux nul et à flux égal π , soit la différence des énergies des états fondamentaux à plusieurs particules pour des conditions périodiques et antipériodiques. Puisque le flux n'apparaît que dans la partie cinétique H_K de l'hamiltonien qui représente la perturbation par rapport à la limite de l'isolant de Mott, pour obtenir la correction à l'énergie de l'état fondamental à l'ordre n , il s'agit d'évaluer la quantité :

$$E^{(n)} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}} \frac{\langle \psi_0 | H_K | \psi_{\alpha_1} \rangle \langle \psi_{\alpha_1} | \dots | \psi_{\alpha_{n-1}} \rangle \langle \psi_{\alpha_{n-1}} | H_K | \psi_0 \rangle}{(E_0 - E_{\alpha_1})(E_0 - E_{\alpha_2}) \dots (E_0 - E_{\alpha_{n-1}})} \quad (7.16)$$

ou encore en développant $|\psi_0\rangle$ grâce à son expression donnée en fonction des états Ψ_{β} de \mathcal{S} :

$$E^{(n)} = \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}} \sum_{\beta, \beta'} f_{\beta} f_{\beta'} \frac{\langle \psi_{\beta} | H_K | \psi_{\gamma_1} \rangle \langle \psi_{\gamma_1} | \dots | \psi_{\gamma_{n-1}} \rangle \langle \psi_{\gamma_{n-1}} | H_K | \psi_{\beta'} \rangle}{(E_0 - E_{\gamma_1})(E_0 - E_{\gamma_2}) \dots (E_0 - E_{\gamma_{n-1}})} \quad (7.17)$$

où β et β' sont les indices des configurations appartenant à l'espace \mathcal{S} et les γ sont les indices dévolus aux états $|\psi_\gamma\rangle$ de l'espace \mathcal{D} . Rappelons ici que l'étude se fait à demi-remplissage et que, dans le fondamental, chaque site est occupé par un électron. Le terme H_K est le terme de l'énergie cinétique ou encore terme de saut. Il permet à chaque particule de se mouvoir vers son plus proche voisin (saut entre plus proches voisins). Cependant, un seul saut mène à un état de \mathcal{D} possédant un site doublement occupé mais n'appartenant pas à l'état fondamental. Afin de recouvrir un des états de base ψ_β , il faut au moins deux sauts (un aller-retour) ou plutôt un nombre pair de sauts est nécessaire afin de retrouver un état de \mathcal{S} . Ces ensembles de saut menant de l'état fondamental à lui-même appelés *séquences* [136]. Celles-ci couplent deux états de \mathcal{S} par l'intermédiaire des états \mathcal{D} .

Il convient maintenant d'évaluer les valeurs des corrections à l'énergies périodiques et antipériodiques et de trouver des quantités menant à une différence afin d'obtenir une sensibilité de phase. Evaluons en tout premier lieu, le numérateur. Celui-ci n'est composé que d'éléments de matrice de saut entres plus proches voisins $\langle\psi_\gamma|H_K|\psi_{\gamma+1}\rangle$ tous égaux à $-t$ sauf lors d'un saut au travers de la condition de bord, du dernier site vers le premier ou inversement. Toutes les séquences sont donc constituées de processus de saut à une particule : les électrons sautent les uns après les autres en se déplaçant d'un site. Ainsi, la correction à l'énergie fondamentale $E^{(n)}$ peut alors être exprimée en utilisant des sommes sur les séquences mentionnées plus haut, que l'on note $\mathbf{A}^{(\beta,\beta')}$, démarrant en $|\psi_{\beta'}\rangle$ et se terminant en $|\psi_\beta\rangle$. Une séquence $\mathbf{A}^{(\beta,\beta')}$ se caractérise par une suite de sauts à une particule conduisant d'un état β à un autre état β' , pouvant être différent ou non. Tous les termes du numérateur sont égaux à $-t$, comme on l'a déjà mentionné précédemment, mais un autre signe surgit dû à la permutation des électrons de spin up et ceux de spin down en raison du réarrangement de l'ordre des opérateurs causé par le terme de saut et l'éventuelle traversée du bord. Pour des conditions de bord périodiques, le numérateur s'écrit :

$$N_p = (-t)^n \text{sign}(P_\uparrow) \text{sign}(P_\downarrow), \quad (7.18)$$

où l'on définit $P_{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{A})$ étant les permutations des positions des électrons $\uparrow(\downarrow)$ sur l'anneau, résultant des séquences (\mathbf{A}) .

Si maintenant, on évalue le numérateur dans le cas de conditions antipériodiques, le seul changement réside dans les sauts au travers de la condition de bord ce qui introduit un signe négatif dans le numérateur. Plusieurs

sauts pouvant être effectués à travers celle-ci, le numérateur pour des conditions antipériodiques est donné par :

$$N_{ap} = (-1)^{h_b} N_p. \quad (7.19)$$

h_b étant le nombre de sauts au travers de la condition de bord entre les sites $1 \longleftrightarrow M$ contenu dans les séquences \mathbf{A} . Tous les termes du dénominateur sont évalués comme suit :

$$E_0 - E_{\gamma_l} = - \underbrace{(E_{\gamma_l}^W - E_0^W)}_{W d_{\gamma_l}} - \underbrace{(E_{\gamma_l}^U - E_0^U)}_{\epsilon_\gamma U} \quad (7.20)$$

où ϵ_γ est le nombre d'états doublement occupés et d_{γ_l} la différence entre les variables aléatoires de l'état β et de l'état γ .

A des ordres plus petits que M , les énergies périodiques et antipériodiques sont égales et ne dépendent pas du flux car les séquences caractéristiques ne traversent pas ou un nombre pair de fois la condition de bord ce qui implique que la correction de la sensibilité de phase est nulle. Une différence naît dès que $n = M$, soit lorsque l'ordre de la perturbation n est égal au nombre de sites sur l'anneau M . C'est là la contribution d'ordre le plus bas et avec un seul saut à travers la condition de bord. Les électrons doivent alors se mouvoir tout le long de l'anneau et connecter un état β et un autre β' .

Il est nécessaire d'étudier les séquences connectant les états entre eux. Il existe deux possibilités de séquences :

- les séquences connectant un état β avec lui-même. Tous les électrons ayant le même spin se déplacent de deux sites dans le même sens. Les séquences que je viens d'évoquer sont illustrées par la figure suivante, pour l'exemple de la configuration de spins alternés :

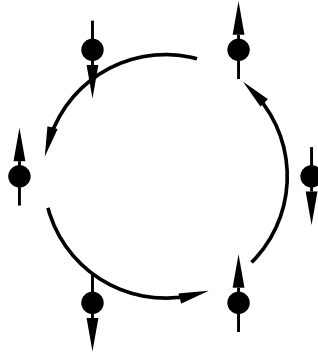


FIG. 7.1: *exemple de séquences de sauts d'ordre $n = M = 6$ contribuant à la sensibilité de phase et connectant un même état β à lui-même pour le cas particulier de spins alternés.*

- les séquences connectant un état β à un autre état β' en M sauts. Il existe de nombreux types de ces séquences; par exemple, tous les électrons se mouvant dans le même sens d'un site. On s'intéresse encore une fois au cas des configurations de spins alternés. On peut passer d'une configuration de spins alternés à une autre en faisant sauter chaque spin sur le site voisin ainsi qu'on peut le voir sur la figure 7.2:

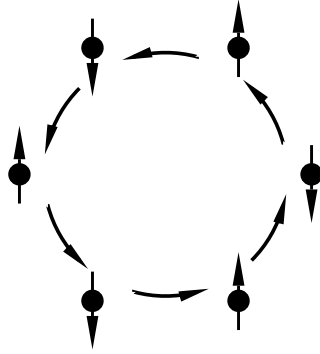


FIG. 7.2: exemple de séquences de sauts d'ordre $n = M = 6$ contribuant à la sensibilité de phase et connectant une des deux configurations de spins alternées β à l'autre β' .

Remarquons que dans toutes ces séquences, le bord n'est traversé qu'une seule fois et la condition de bord n'intervient alors qu'une fois et ainsi, un signe négatif apparaît dans la contribution à la sensibilité de phase: les énergies périodiques et antipériodiques ne diffèrent que de ce signe et permettent de déterminer la valeur de la sensibilité de phase.

On décide de séparer les séquences en fonction du sens dans lequel les particules se déplacent et on les nomme contributions "forward" (les électrons se déplacent dans le sens trigonométrique) et "backward" (les électrons se déplacent dans le sens anti-trigonométrique). Ces séquences sont exactement identiques si on renverse le sens le long de l'anneau ce qui permet d'exprimer l'énergie plus simplement. En se servant de la formule (7.17), l'énergie d'ordre M s'écrit dans le cas de conditions périodiques :

$$E^{(M)} = -2t^M \times \sum_{\beta, \beta'} \sum_{\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')}} \frac{f_\beta f_{\beta'} \text{sign} P_\uparrow(\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')}) \text{sign} P_\downarrow(\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')})}{(U\epsilon_{\gamma_1} + d_{\gamma_1} W)(U\epsilon_{\gamma_2} + d_{\gamma_2} W) \cdots (U\epsilon_{\gamma_{M-1}} + d_{\gamma_{M-1}} W)}, \quad (7.21)$$

où les \mathbf{A}_f sont les séquences forward. Le facteur dans le numérateur provient donc de ces processus vers l'avant (sens trigonométrique) et vers l'arrière (sens antitrigonométrique) et le signe s'introduit à cause des $(M - 1)$ signes

négatifs des dénominateurs des différences d'énergie et les M signes négatifs des éléments de saut dans le numérateur. Les contributions périodiques et antipériodiques étant de signe opposé, on obtient le résultat suivant :

$$\Delta E^{(M)} = \frac{-4t^M}{U^{M-1}} \times \sum_{\beta, \beta'} \sum_{\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')}} \frac{f_\beta f_{\beta'} \text{sign} P_\uparrow(\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')}) \text{sign} P_\downarrow(\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')})}{(\epsilon_{\gamma_1} + d_{\gamma_1} W/U)(\epsilon_{\gamma_2} + d_{\gamma_2} W/U) \cdots (\epsilon_{\gamma_{M-1}} + d_{\gamma_{M-1}} W/U)} \quad (7.22)$$

après avoir factorisé les termes U au dénominateur. Toutes les séquences menant à une contribution conduisent à une permutation cyclique des $N/2$ opérateurs correspondant à des électrons de spin donné.

Comme tous les poids f_β sont positifs, le signe de la sensibilité de phase, dans la limite des fortes interactions, est donné par le signe de $(-1)^{N/2}$, comme dans le cas sans interaction. Ce résultat est confirmé par les résultats numériques du chapitre 5.

Afin d'étudier l'influence du désordre sur la sensibilité de phase dans la limite des fortes interactions $U \gg W$, un développement limité en puissance de W/U va être effectué à partir de l'équation (7.22).

Considérons deux sites voisins i et $i-1$ occupés par des électrons de spins opposés. Les sauts $i \rightarrow i-1 \rightarrow i$ et $i-1 \rightarrow i \rightarrow i-1$ conduisent à un couplage $-2t^2/[U(1 - (v_i - v_{i-1})^2 W^2/U^2)]$ indépendant du flux, entre deux états qui ne diffèrent que dans l'orientation des spins de deux électrons plus proches voisins.

Les éléments de matrice de l'hamiltonien de Heisenberg effectif sont donc des fonctions paires du désordre (en puissances paires de W/U), et les poids f_β le sont également.

Leur développement en fonction du désordre donne :

$$f_\beta \approx f_\beta^{(0)} + f_\beta^{(2)} \left(\frac{W}{U}\right)^2 \quad (7.23)$$

Aucun terme linéaire en W/U n'existe ainsi que dans l'hamiltonien et la condition de normalisation $\sum_\beta (f_\beta)^2 = 1$ implique $\sum_\beta f_\beta^{(0)} f_\beta^{(2)} = 0$. Tous les $f_\beta^{(0)}$ étant positifs, les $f_\beta^{(2)}$ peuvent être négatifs. Dans le développement, seuls les $f_\beta^{(0)}$ sont conservés et on fera l'approximation $f_\beta \approx f_\beta^{(0)}$ puisque dans les limites de fortes interactions, les termes en W/U tendent vers zéro. Il s'agit

de développer le dénominateur en puissance de W/U jusqu'au second ordre :

$$\Delta E^{(M)} \approx \frac{(-1)^{N/2} 4t^M}{U^{M-1}} \times \sum_{\beta, \beta'} \sum_{\mathbf{A}_f^{(\beta, \beta')}} \frac{f_\beta f_{\beta'}}{\prod_l \epsilon_{\gamma_l}} \left(1 - \frac{W}{U} \sum_l \frac{d_{\gamma_l}}{\epsilon_{\gamma_l}} + \frac{W^2}{U^2} \left(\sum_l \frac{d_{\gamma_l}^2}{\epsilon_{\gamma_l}^2} + \sum_{l < m} \frac{d_{\gamma_l} d_{\gamma_m}}{\epsilon_{\gamma_l} \epsilon_{\gamma_m}} \right) \right). \quad (7.24)$$

Le terme qui domine dans l'équation (7.24) correspond à la limite $W \rightarrow 0$ et montre une suppression du courant permanent par l'interaction en $U(t/U)^M$. Cette suppression se renforce exponentiellement avec la taille. Ceci est lié à la longueur de localisation en fonction de l'interaction suivant cette loi : $\xi(U) = 1/\ln(U/t)$.

On va montrer que le terme linéaire en W/U disparaît dans notre cas d'un anneau à demi-remplissage. En effet, considérons une séquence de sauts que l'on peut caractériser par les positions de trous et de sites doublement occupés. Alors, on peut toujours construire une seconde séquence en échangeant les positions des sites doublement occupés et les sites vides et en renversant l'ordre des sauts. Ces séquences \mathbf{A} et \mathbf{A}' ont le même nombre de sites doublement occupés mais les coefficients d_{γ_l} sont de signe opposé ce qui entraîne que, en prenant la somme sur toutes les séquences, le terme du premier ordre est annulé.

Ainsi, c'est donc le second terme qui détermine la dépendance en W du courant permanent dans la limite $U \gg W$. On va regarder comment le préfacteur de celui-ci se comporte. Il est composé de sommes sur deux termes :

- le premier est de l'ordre de un et est toujours positif et la somme sur les $M - 1$ états avec sites doublement permet d'estimer $\sum_l (\frac{d_{\gamma_l}}{\epsilon_{\gamma_l}})^2 \lesssim M$. En sommant sur toutes les séquences, on obtient une contribution positive d'ordre $N_S M$, où N_S est le nombre de séquences.
- le deuxième terme est également d'ordre un mais de signe aléatoire. En effectuant la somme, on l'évalue à environ $\frac{\pm \sqrt{N_S M}}{\sqrt{2}}$. Le nombre de séquences étant très élevées, on a $\sqrt{N_S} \ll N_S$.

On conclut de cette étude que la sensibilité de phase a des corrections positives en $(W/U)^2$. Comme la sensibilité de phase est la différence entre les énergies périodiques et antipériodiques des états fondamentaux, les conclusions sont valides également dans le cas de la raideur de charge $D = \frac{M}{2} |\Delta E|$.

Cela conduit à l'importante conclusion que, *dans le cas spécifique du demi-remplissage*, le désordre accroît la sensibilité de phase et par la même occasion, la raideur de charge, et on peut étendre cette conclusion au courant permanent des électrons fortement corrélés.

Ceci est un résultat surprenant qui va dans un sens opposé à de résultats plus connus, notamment la localisation d'Anderson. En effet, le désordre est connu pour localiser les fonctions d'onde, ainsi qu'on l'a présenté dans le chapitre sur les anneaux unidimensionnels et le courant permanent 3.3 ainsi que dans le chapitre sur le modèle d'Anderson 3.2.

En effet, le désordre diminue le gap entre les états propres formés des états de base \mathcal{S} et des états excités \mathcal{D} et facilite le saut sur des sites doublement occupés. Le passage des électrons dans l'anneau est facilité et fait donc augmenter la valeur de la sensibilité de phase. Afin d'illustrer ce comportement, dans la figure 7.3, on représente ΔE en fonction du désordre et on montre que ΔE évolue en puissances paires de W . On écrit $\Delta E = a_0/U^9 * (1 + b_0 * W^2/U^2 + c_0 * W^4/U^4)$, en ajustant les coefficients a_0 et b_0 en fonction du désordre.

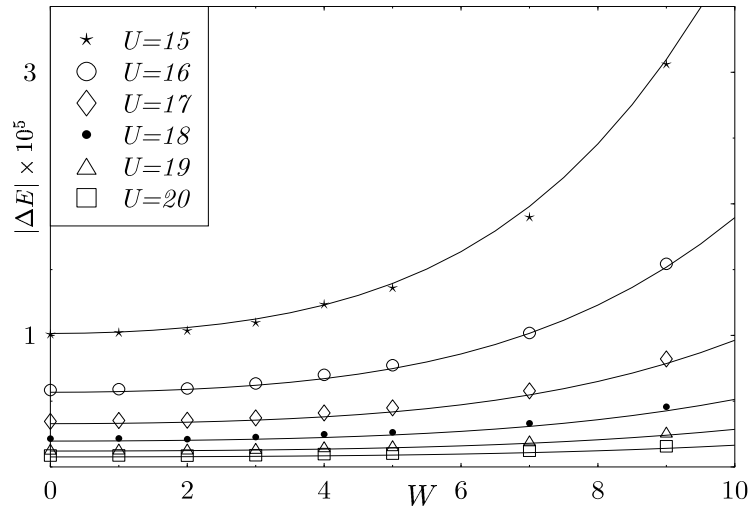


FIG. 7.3: *Dépendance de ΔE en fonction du désordre d'un échantillon individuel $M = N = 10$. Les données données par les symboles sont comparées aux résultats donnés par la théorie en perturbation (lignes).*

La théorie analytique est développée jusqu'à l'ordre quatre afin de pouvoir la comparer avec les données numériques.

Ceci est en accord avec le comportement de la sensibilité de phase du chapitre 5, dans la section 5.2 qui ne comprend que des termes de puissances paires en W/U .

7.2.3 Etude des poids de l'état fondamental

Un autre travail a consisté à considérer le cas des interactions infinies. Un programme a été élaboré afin de calculer la valeur des poids des états de base lorsque les interactions sont tellement fortes que deux particules ne peuvent plus se retrouver sur le même site ($U \rightarrow \infty$).

On n'a considéré que les cas où M varie de $M = N = 2$ à $M = N = 14$. Les poids les plus importants sont retenus et on réalise que ceux-ci sont ceux des états aux spins alternés, les autres poids les plus hauts sont ceux dont deux spins ont été échangés par rapport au cas de spins alternés. On regarde le comportement des poids correspondant aux deux états décrits ci-dessus ainsi que le rapport de ceux-ci.

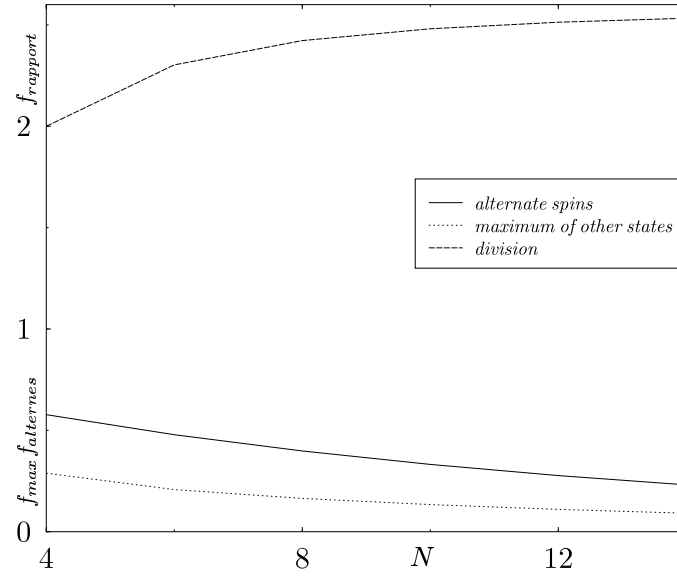


FIG. 7.4: Comportement des poids des états de base dans l'état fondamental en fonction de la taille $M = N$ du système.

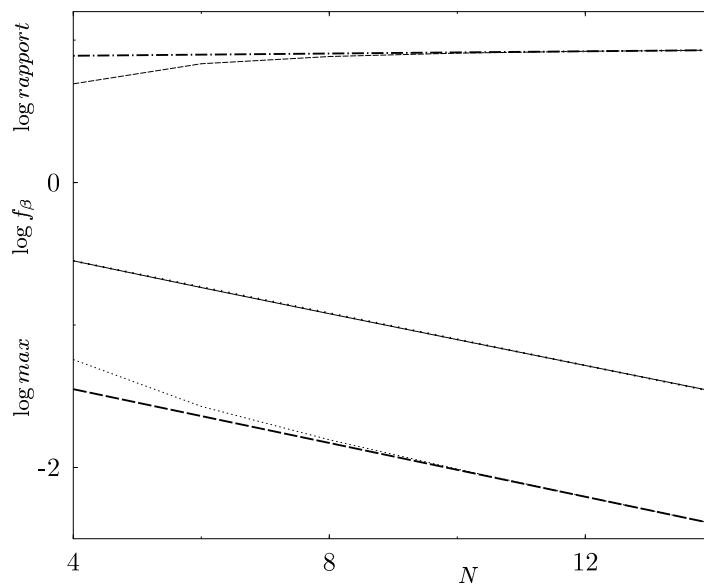


FIG. 7.5: *Comportement du logarithme des poids des états de base dans l'état fondamental en fonction de la taille M du système lorsque l'on est à demi-remplissage $M = N$.*

On observe la décroissance exponentielle de f_β avec N . Ceci permet de montrer que dans la limite de très fortes interactions U , les états prépondérants sont ceux dont la configuration présente des spins alternés.

7.3 Le hors demi-remplissage

Cette partie est consacrée à l'étude des systèmes hors demi-remplissage lorsque $N \neq M$. On garde les mêmes notations que dans la section précédente. L'hamiltonien est décomposé comme pour le cas du demi-remplissage par 3.1. Et le traitement en perturbation s'effectue dans le même ordre que précédemment, en utilisant H_K comme la perturbation dans l'espace des états de base.

On peut considérer deux cas différents: lorsque le nombre de particules est supérieur au nombre de sites ou lorsqu'il lui est inférieur. Ces deux cas

sont semblables et devraient avoir le même type de comportement car grâce à la symétrie particule-trou du modèle de Hubbard, une équivalence existe et on doit avoir à désordre nul les mêmes valeurs de la raideur de charge pour des remplissages tels que $|M - N_1| = |M - N_2|$ où 1 et 2 sont les indices des deux systèmes considérés. Le nombre de sites vides dans le premier système avec $M > N_1$ correspond au nombre de sites doublement occupés du second avec $M < N_2$. Cette symétrie a été vérifiée numériquement dans le chapitre 3 dans les cas de systèmes ordonnés. Lorsque l'on introduit du désordre, ce fait n'est plus vérifié sur un échantillon donné, mais reste valable en moyenne.

On considère le cas d'un nombre pair N de particules. L'écriture des états s'effectue dans le sous-espace $S_z = 0$ lorsque le nombre d'électrons est pair. On considère donc pour $S_z = 0$ $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$. On se souvient que l'état $|0\rangle$ est toujours l'état vide comportant M sites vides. Les états s'écrivent dans la limite des interactions fortes :

$$|\psi_\alpha\rangle = \left(\prod_{k=1}^{N/2} c_{i_k^\uparrow(\alpha),\uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{k=1}^{N/2} c_{i_k^\downarrow(\alpha),\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (7.25)$$

$i_k^{\uparrow(\downarrow)}(\alpha)$ sont les fonctions qui sélectionnent les sites sur lesquels se trouvent les électrons \uparrow (\downarrow) dans la configuration α . $i_k^{\uparrow(\downarrow)}(\alpha)$ appartient à $[1, M]$ tandis que k se trouve dans $[1, 2, \dots, N/2]$. Les énergies de ces états s'écrivent maintenant :

$$E_0^W = W \left[\sum_{k=1}^{N/2} v_{i_k^\uparrow(\alpha)} + \sum_{k=1}^{N/2} v_{i_k^\downarrow(\alpha)} \right]. \quad (7.26)$$

Contrairement à la section sur le demi-remplissage, les différents états Ψ_β ne possèdent pas tous la même énergie car celle-ci dépend des potentiels de désordre sur site. En effet, les électrons vont préférer se placer dans les sites de potentiels les plus bas et il se forme ainsi un sous-espace \mathcal{S}_0 à l'intérieur de \mathcal{S} dont l'énergie est plus basse.

Nous considérons le cas sans désordre et l'existence d'un seul trou (site vide). En réalité, la démonstration qui va suivre ne sera valide que dans le cas où $N = M - 1$ [133, 137]. Pour l'appliquer lorsque plusieurs trous existent, il faudrait s'assurer que les trous sont distincts, soit que l'ordre des trous ne changent pas lors des sauts des particules [137].

Tout d'abord, il faut remarquer que, maintenant que le hors demi-remplissage est considéré, un seul saut peut mener d'un état de base du sous-espace \mathcal{S} à un autre : il s'agit là d'une théorie en perturbation au premier ordre.

7.3.1 Obtention des états de fondamentaux

On considère des états connectés par un seul saut. On définit un super-réseau comme étant l'ensemble des états connectés par un seul saut entre eux [84].

Définition de la connectivité. *Un super-réseau satisfait au critère de connectivité si tous les états ayant la même valeur S_z sont connectés par des sauts au premier ordre allant tous dans la même direction.*

Considérons la matrice de l'hamiltonien au premier ordre. On se restreint au cas N pair et au sous-espace $S_z = 0$. Celle-ci ne comporte que des éléments de matrice égaux à $-t$ lorsque les états considérés sont connectés sans franchir la condition de bord ou $\pm t$ s'il y a franchissement du bord (selon la condition de bord avec laquelle on travaille).

La matrice correspondant au terme de saut H_K dans le modèle de Hubbard dans la limite de fortes interactions $U \rightarrow \infty$ et $N = M - 1$ est dite répondre au critère de connectivité si tous les états de base Ψ_β se trouvant dans le même sous-espace S_z sont connectés entre eux par le biais d'éléments de matrice non nuls de H_K [101]. On constate l'existence de nombreux sous-blocs à l'intérieur de cette matrice. Ceux-ci proviennent de la *connectivité* entre états.

Ainsi la matrice est-elle composée de sous-groupes β_{C_i} , i étant le nombre de particules de même spin côte à côte. En effet, les sauts permettant à la particule de se déplacer un site par un site, la disposition des électrons ne s'en trouve pas changée par permutation puisque l'on reste confiné aux sous-espace S_z et \mathcal{S} : le saut ne doit s'effectuer que vers le site vide afin de recouvrir un état de base, comme le montre la figure .

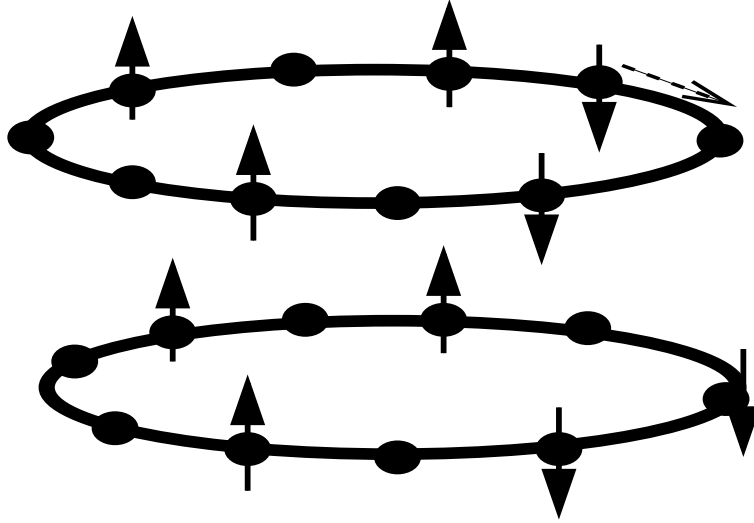


FIG. 7.6: *Exemple d'un seul saut permettant de passer d'un état beta quelconque à un autre β' .*

Cela revient à faire se déplacer le trou dans le sens inverse des particules, et ceci ne change pas l'ordre des particules: deux électrons côte à côte seront toujours voisins après ces sauts sans oublier que les sites 1 et M sont également connectés. Tous ces états ainsi connectés forment un ensemble nommé boucle ou super-réseau [143, 144], comme défini ci-dessus.

Dans le cas d'un unique site vide, le nombre de boucles est exactement égal au nombre d'électrons de même spin puisque les états varient entre l'état de spins alternés à celui où tous les électrons de même spin sont côte à côte.

Pour des conditions de bord périodiques, l'état de base consiste donc en une combinaison linéaire des états de base du sous-espace S_z considéré avec des coefficients *tous positifs* si ces états obéissent à la loi de connectivité [134]. En effet, cela provient du théorème de Perron-Frobenius. Tout d'abord, énonçons le théorème de Perron-Frobenius, standard en algèbre linéaire [101]. Une version plus générale de ce théorème est présentée dans la référence [138].

Théorème de Perron-Frobenius pour une matrice réelle symétrique.

Soit $T = (t_{i,j})_{i,j=1,\dots,N}$ une matrice réelle symétrique, c'est-à-dire que $t_{i,j} =$

$t_{j,i} \in R$ qui possède les propriétés suivantes :

1. $t_{i,j} \geq 0$ pour $i \neq j$.
2. tous les $i \neq j$ sont connectés par des éléments de matrice non nuls de T . Plus précisément, quel que soit $i \neq j$, on peut trouver une séquence (i_1, \dots, i_K) telle que $i_1 = i$, $i_K = j$ et $t_{i_k, i_{k+1}} \neq 0$ pour tout $k < K$.

Alors, la valeur propre la plus élevée de T est non dégénérée et le vecteur propre correspondant $e = (e_i)_{i=1, \dots, N}$ est écrit comme une combinaison linéaire des vecteurs de base dont les coefficients peuvent être choisis positifs pour tout i .

Ces boucles donnent également le nombre de sous-espaces composant la matrice de l'hamiltonien. A chaque sous-espace correspond une énergie valant $-2t$ à cause de la présence d'un trou unique [145], ainsi qu'un état fondamental, superposition des états de base. On conclut que l'énergie est dégénérée et sa dégénérescence est égale à la moitié du nombre d'électrons $N/2$. A chacune de ces énergies correspond un état propre qui est la superposition des états Ψ_β . Les signes des poids de ces états dépendent des conditions de bord. Ceux-ci s'écrivent en respectant la convention de signe de Perron-Frobenius : lorsque l'amplitude de transition entre deux états est négative, on superpose de ceux-ci avec le même signe et lorsque la transition est positive, on les superpose avec des signes opposés. Pour plus de détails sur cette convention de signe, on se référera à la convention de signe de Marshall [8]. Des applications de cette règle de signe existent [?, 141] et également dans le modèle de Hubbard [142].

Conditions périodiques

Dans le cas de conditions de bord périodiques, les signes des états propres seront tous identiques (choisis tous positifs) et on aura $N/2$ états propres dégénérés relatifs à la valeur propre $-2t$. Chaque état propre sera la superposition de états de base faisant partie du super-réseau. On considère tout d'abord un anneau dont les conditions de bord sont périodiques. Le système étudié est donc fermé et on a la relation : $c_{0,\sigma} = c_{M,\sigma}$.

On se référera à l'article de Tasaki [134] pour l'extension de ce théorème au cas du modèle de Hubbard lorsque tous les états de base sont reliés par un seul saut. L'état de base relatif à des conditions périodiques sera donc

dégénéré : à chaque boucle de S_z correspond une valeur propre unique et un vecteur propre composé des états de base de cette boucle ou super-réseau dont tous les poids sont positifs.

Conditions antipériodiques

Considérons maintenant le cas de conditions antipériodiques. L'élément de saut entre le premier et dernier site est positif. Dans ce cas, on aura également $N/2$ états propres qui seront la superposition des états de base du super-réseau. Toutefois, ces états de base seront superposés avec des signes différents.

Dorénavant, le théorème de Perron-Frobenius ne s'applique plus directement et l'on doit recourir à un théorème plus général. Il faut dorénavant utiliser la règle de signe de Perron-Frobenius qui stipule qu'à l'intérieur d'un sous-espace S_z lorsque les états obéissent à la condition de connectivité dans l'état fondamental, ceux-ci se superposent selon la convention de signe de Perron-Frobenius ou de Marshall [8, 138]. On considère les états de base connectés par un saut : si l'amplitude de transition entre deux états est négative, on superpose ces deux états avec le même signe, en revanche, lorsque l'amplitude entre deux états est positive, ceux-ci sont superposés avec des signes opposés. Cette règle servira par la suite dans l'écriture de l'état de base et donnera naissance à des états ayant des signes alternés.

Dans l'annexe, on présente un exemple concret qui comporte deux électrons sur trois sites. Dans le cas de systèmes plus larges que ce simple modèle de deux électrons sur trois sites, on obtient une matrice par blocs, comme on l'a évoqué précédemment. En effet, celle-ci contiendra les termes relatifs de saut relatif à chaque sous-réseau puisqu'en une dimension, tous les états de base ne sont pas connectés entre eux. On aura pour chaque sous-bloc (qui répond au critère de connectivité) un état propre qui sera la superposition des états de base formant le sous-bloc de la matrice.

On conclut de cette étude que l'état de base est dégénéré et qu'il va falloir réaliser un développement en perturbation dégénéré.

7.3.2 Calcul de la sensibilité de phase

Au premier ordre :

Il faut évaluer les éléments de matrice qui ont cette forme :

$$\mathcal{H}^{(i,j)} = \langle \psi_0^{\mathcal{C}_i} | H_K | \psi_0^{\mathcal{C}_j} \rangle, \quad (7.27)$$

où les $|\psi_0^{C_i}\rangle$ sont les états fondamentaux des sous-blocs C_i . En développant ces différents états de base, on obtient :

$$\mathcal{H}^{(i,j)} = \sum_{\beta, \beta'} f_{\beta}^{C_i} f_{\beta'}^{C_j} \langle \psi_{\beta}^{C_i} | H_K | \psi_{\beta'}^{C_j} \rangle. \quad (7.28)$$

Au sein d'un même sous-espace C^i , si on calcule l'énergie à l'ordre nul, il s'agit d'évaluer les termes $f_{\beta}^{C_1} f_{\beta'}^{C_1} \langle \Psi_{\beta}^{C_1} | H_K | \Psi_{\beta'}^{C_1} \rangle$.

Dans le cas de conditions périodiques, tous les termes valent $-t$. Pour des conditions antipériodiques, le signe négatif introduit par le flux est compensé par les signes opposés des poids $f_{\beta}^{C_1}$ et $f_{\beta'}^{C_1}$ dus à la convention de signe de Marshall (Perron-Frobenius) [8]. On aura donc également une somme de $-t$. En ce qui concerne les séquences de saut qui ne traversent pas le bord, elles donnent des contributions identiques dans les cas périodiques et antipériodiques.

Pour $i \neq j$, tous ces termes sont nuls car les états de sous-espaces différents ne sont pas couplés par un seul saut.

Les deux matrices sont donc nulles, indépendantes des conditions de bord, ce qui implique que les deux corrections aux énergies périodiques ou antipériodiques sont identiques. Ainsi la sensibilité de phase est-elle nulle. Il faut donc aller à un ordre plus élevé dans la perturbation afin de trouver une contribution à la sensibilité de phase.

La sensibilité de phase est donc nulle au premier ordre.

Il faut remarquer que toutes les contributions provenant de séquences de sauts où les particules ne se rencontrent jamais sur le même site (jamais de site doublement occupé : tous les électrons se déplacent d'un site dans la même direction) ne donnent lieu à aucune contribution.

Au second ordre :

On va donc devoir évaluer les éléments de matrice suivants :

$$\mathcal{H}^{(i,j)} = \sum_{\gamma} \sum_{\beta, \beta'} f_{\beta}^{C_i} f_{\beta'}^{C_j} \frac{\langle \psi_{\beta}^{C_i} | H_K | \psi_{\gamma} \rangle \langle \psi_{\gamma} | H_K | \psi_{\beta'}^{C_j} \rangle}{(E_0 - E_{\gamma})} \quad (7.29)$$

Les états intermédiaires ψ_{γ} correspondent à des états appartenant au sous-espace \mathcal{D} . Dans notre cas, un seul site vide, l'état intermédiaire est nécessairement un état avec un site doublement occupé car le second saut doit aboutir à un état $\psi_{\beta}^{C_i}$. Les séquences sont donc composées d'un premier saut vers un autre site déjà occupé et d'un second saut vers un site vide.

On va montrer que les termes des deux matrices des hamiltoniens du second ordre diffèrent.

On appelle, comme dans la section précédente, ces deux sauts “séquences” [136] et certaines de ces séquences traversent la condition de bord et permettent d’obtenir des contributions différentes à la sensibilité de phase.

Les séquences ne traversant pas le bord ne mènent à aucune contribution dans la sensibilité de phase, puisque les poids des états de base auront le même signe et que le flux n’interviendra pas. On obtiendra donc des termes en $-t^2/U$.

Considérons maintenant des séquences qui traversent le bord.

Afin de connaître le signe des termes de l’équation (7.29), il va falloir évaluer les signes des poids des états de base considérés et tenir compte du signe introduit par le flux.

Certaines de ces séquences sont des allers-retours au travers de la condition de bord lorsque les électrons sur les premier et dernier site sont de spins opposés. Elles mènent à des contributions identiques quelles que soient les conditions de bord. En effet, on connecte un état de base à lui-même, on aura alors une contribution $f_\beta^2((\pm t)(\pm t)/(-U)) = f_\beta^2(-t^2/U)$ dans le cas périodique et antipériodique.

D’autres types de séquences que l’on appellera “échange”, sont composées d’un premier saut à travers le bord et c’est l’autre électron qui revient sur le site vide lors du second saut.

Echanger deux électrons de spins différents entraîne que l’on change de sous-espace \mathcal{C}^i et que les poids des deux états sont de signes opposés afin de respecter la convention de signe de Marshall [139, ?]. En effet, on classe les états de base $\psi_\beta^{\mathcal{C}_j}$ en commençant par les états dont le premier site est un spin \uparrow quel que soit le super-réseau considéré \mathcal{C}_j . L’échange de deux électrons de spins opposés entre les premier et dernier site entraîne l’apparition d’un signe négatif dans les poids des deux états. Pour des conditions périodiques, on aura $f_\beta f_{\beta'}(-t^2/U) < 0$ car les poids f_β et $f_{\beta'}$ ont le même signe. Dans le cas antipériodique, on aura $f_\beta f_{\beta'}(-t^2/U) > 0$ parce-que f_β et $f_{\beta'}$ seront de signe différent.

On constate donc qu’au second ordre, les éléments de matrice \mathcal{H}_{ij} diffèrent à cause de l’existence des termes d’échange précédemment évoqués.

Ainsi, les énergies périodiques et antipériodiques seront donc différentes et mèneront à une sensibilité de phase non nulle.

Considérons les doubles sauts vers l’avant ou l’arrière. On aura une contri-

bution $-t^2/U$ dans le cas périodique ou t^2/U dans le cas antipériodique. Les sauts dont la première particule saute pour former un état doublement occupé, puis, l'autre saute à travers le bord afin de retrouver un état $\Psi_\beta^{C_i}$ permet de rester à l'intérieur du même sous-espace C_i : les signes des poids seront donc opposés dans le cas de conditions antipériodiques. En effet, cela revient à faire avancer une particule après l'autre d'un site, ce qui introduit un signe négatif dans le poids de l'état considéré, puis, d'échanger la place des spins, d'où l'apparition d'un signe négatif à nouveau dans le poids : les deux états auront ainsi des poids de même signe.

On se référera aux articles [140, 139, ?] pour des explications de la règle de signe dans les chaînes de spin.

Les termes périodiques et antipériodiques auront donc le même signe. Lorsque la même particule saute vers un site doublement occupé, puis, traverse la condition de bord pour aller sur un site vide, l'ordre des particules change et le signe des poids de ces états est identique. Ces termes vont également induire des différences dans les éléments des matrices relatives aux conditions périodiques et antipériodiques.

Les dénominateurs des éléments de matrice sont tous égaux à $-U$ et chaque numérateur comporte un terme en t^2 et ceux-ci peuvent être factorisés. On peut donc écrire la sensibilité de phase ainsi :

$$\Delta E^{(2)} = |E^{(2)}(0) - E^{(2)}(\pi)| \quad (7.30)$$

$$\Delta E^{(2)} = \frac{-t^2}{U} \Upsilon \quad (7.31)$$

et $E^{(2)}(0)$ ($E^{(2)}(\pi)$) est la valeur propre la plus basse de l'hamiltonien du second ordre pour des conditions de bord périodiques (antipériodiques). Υ est une constante obtenue en factorisant le terme $-t^2/U$ dans la sensibilité de phase, celle-ci ne dépend ni de t ni de U et n'est donc qu'une constante relativement aux deux variables précédemment citées et aux conditions de bord (Φ). Le terme t étant l'unité, on obtient une loi en $1/U$ [147]. Cette loi a déjà été confirmée numériquement dans le chapitre 5.

Le désordre est introduit en donnant tout d'abord des poids de moindre importance aux états dont les électrons ne se trouvent pas répartis dans les sites de désordre les plus faibles, mais également, on va introduire du désordre au dénominateur et, afin d'étudier l'influence de celui-ci sur la sensibilité de phase, on va effectuer un développement limité du dénominateur. On considère que certains états de base auront des poids f_β plus faibles que les autres qui apparaîtront dans l'écriture de l'état fondamental. On introduit

maintenant le désordre dans le dénominateur où l'on remplace U par $U\epsilon_\gamma + Wd_\alpha$.

Il s'ensuit :

$$\begin{aligned}\Delta E^{(2)} &= \sum_{\gamma} \frac{-t^2}{U\epsilon_\gamma + Wd_\gamma} \Upsilon \\ \Delta E^{(2)} &= \frac{-t^2}{U} \sum_{\gamma} \left(1 - \frac{Wd_\gamma}{U} + \frac{(Wd_\gamma)^2}{U^2}\right) \Upsilon\end{aligned}\quad (7.32)$$

On constate que la loi de décroissance évolue toujours en $1/U$; l'effet premier dû au désordre est de faire diminuer le courant permanent lorsque le désordre augmente, en effet, lorsque l'on effectue un développement limité en puissance de W/U , les corrections à la sensibilité de phase dues au désordre vont faire diminuer la valeur de celle-ci puisque le terme linéaire ne disparaîtra plus car les séquences étant réduites à deux sauts, les sommes sur ces séquences ne permettront plus de se compenser. De plus, dans le cas de double saut, le saut d'un état de base mène à un autre état β' qui sera plus élevé en énergie, donc le terme linéaire sera négatif.

Cela permet de dire que, pour un nombre pair de particules, dès que $N = M - 1$, le comportement de la sensibilité de phase, dans la limite des interactions fortes, évoluera en $1/U$.

7.4 Conclusion

Dans ce chapitre, on a constaté que l'on retrouve analytiquement les mêmes résultats que dans le chapitre 5 où l'outil numérique a été utilisé. On conclut que, hors demi-remplissage, le comportement de tout système est similaire et aboutit à cette loi en $1/U$. La raideur de charge décroît lorsque l'on augmente les interactions. On obtient un développement au second ordre en t^2/U .

Au demi-remplissage, nous trouvons un comportement différent car la décroissance est plus forte en fonction de l'interaction, en $1/U^{M-1}$. Cette loi apparaît dans le cas du demi-remplissage, le comportement de la partie en spin du modèle de Hubbard étant décrite par le modèle de Heisenberg dans la limite $U/t \rightarrow \infty$.

Le phénomène étonnant réside dans le fait qu'à très fortes interactions,

le désordre, connu jusqu'à présent pour localiser les électrons, au demi-remplissage, augmente les courants permanents.

Dans le cas du hors demi-remplissage, le désordre reprend son rôle de localisant, empêchant les électrons de se placer dans les sites trop hauts en énergie.

Conclusion

Une des tâches de ce travail a été de faire fonctionner le programme “Density Matrix Renormalization Group” modélisant le modèle de Hubbard-Anderson contenant le spin. Grâce à l’outil puissant que constitue ce programme *DMRG* avec spin, il a été possible d’étudier des anneaux unidimensionnels contenant des électrons, décrits par le modèle de Hubbard. Ces systèmes furent étudiés à demi-remplissage et hors demi-remplissage, avec un nombre de sites pair et impair et un remplissage commensurable et incommensurable. On a vérifié que les limites connues telles la localisation d’Anderson étaient vérifiées et il a été possible de traiter des cas où interaction et désordre étaient présents simultanément.

La première constatation réside dans la grande augmentation du courant permanent pour des interactions intermédiaires. Cette hausse spectaculaire pourrait indiquer que le rôle des interactions est important dans les mesures expérimentales dont l’ordre de grandeur avait toujours été supérieur aux valeurs théoriques sans interaction. De plus, cette valeur maximale du courant permanent a été trouvée quel que soit le système étudié soumis à un désordre non nul quelconque et pour une valeur donnée de l’interaction. Cette augmentation se produit quelle que soit la taille du système et quel que soit le remplissage, les seuls facteurs importants étant le désordre et l’interaction. Le remplissage et la taille du système jouent tout-de-même un rôle dans la proportion de cette augmentation mais celle-ci est toujours présente dès qu’il y a désordre et interaction, aussi faibles soient ces deux paramètres.

Il a été ainsi mis en évidence l’effet important du spin dans l’augmentation des courants permanents, à demi-remplissage comme hors demi-remplissage. On peut donc conclure que le paramètre spin est d’importance dans le cas d’anneaux unidimensionnels.

Cette augmentation a été confirmée par l’étude de la longueur de localisation qui montre une très forte délocalisation quelle que soit la force du

désordre. Cet effet de délocalisation très important pourrait se révéler un point de départ pour considérer la transition métal-isolant en deux dimensions. Notons également que le signe de la sensibilité de phase est donné par $(-1)^{N/2}$, soit en considérant les permutations des électrons dans l'anneau, quels que soient le désordre et les interactions étudiés.

Un autre point important se trouve dans l'étude de la limite de forte interaction qui révèle des aspects intéressants. Pour des systèmes hors demi-remplissage, dans cette limite, la raideur de charge se comporte en $1/U$ comme il est escompté selon le modèle de Hubbard. Il est intéressant de noter que cette loi de décroissance est valable quel que soit le désordre, cette loi n'apparaissant que pour des interactions de plus en plus fortes lorsque l'on augmente la force du désordre. Cette loi est obtenue pour des systèmes commensurables et incommensurables, quelle que soit la parité du nombre de sites et quel que soit le remplissage pour un nombre pair d'électrons.

Le phénomène le plus étonnant réside dans le fait qu'à demi-remplissage, cette loi change et devient une loi de décroissance en $1/U^{M-1}$. Ceci provient du fait que le désordre ne parvient plus à jouer son rôle de localisant puisque, l'interaction étant trop forte, le système comporte une particule par site. Le désordre ne peut plus empêcher les particules de se positionner sur les sites les plus hauts en énergie. On montre ici un effet imprévu du désordre qui fait augmenter le courant permanent dans la limite des très fortes interactions.

Il faut préciser que tous ces résultats ont été trouvés dans le cas d'anneaux unidimensionnels décrits par le modèle de Hubbard-Anderson avec sauts entre plus proches voisins, interaction répulsive et désordre sur site. Il est donc légitime de se demander ce qu'étend ce modèle en des dimensions plus grandes pourraient apporter, notamment à deux dimensions. Peut-être serait-il possible de décrire les expériences sur les courants permanents? Ou encore, la transition métal-isolant trouvée expérimentalement pourrait-elle être appréhendée grâce à ce modèle?

Annexe A

Deux électrons sur trois sites

Ce système a été étudié afin de rendre compte des phénomènes développés dans le cadre de modèles de N électrons sur M sites. On espère que celui-ci permettra d'aborder le cas général plus facilement et qu'il va aider à la compréhension du comportement des courants permanents dans la limite des fortes interactions pour des systèmes hors demi-remplissage.

Considérons donc trois sites sur lesquels on va devoir placer deux électrons. On va donc pouvoir écrire les états de base. Ce petit modèle illustre parfaitement les notions de connectivité et de super-réseau. L'ensemble des états reliés par des sauts aux plus proches voisins menant d'un état de base à lui-même, soit $2 \times M$ sauts et $2 \times M$ états. On a traité le même petit modèle que H. Tasaki afin de pouvoir contrôler les calculs et vérifier les résultats [84].

Ce petit système est décrit par l'hamiltonien 3.1 bien que l'on se cantonne à trois sites. On va tout d'abord donner les états de base qui sont toujours classés en deux sous-espaces \mathcal{S} et \mathcal{D} qui ont la même représentation que dans le chapitre 3, c'est-à-dire que les états non doublement occupés ou encore possédant un ou zéro électron par site Ψ_β sont classés dans l'espace \mathcal{S} et les états possédant au moins un site doublement occupé Ψ_γ sont rangés dans le sous-espace \mathcal{D} .

Placer deux électrons de spins différents sur trois sites mène à considérer un espace de Hilbert de dimension neuf auquel il faut rajouter les états de spins polarisés étant au nombre de six, trois avec deux électrons de spin up et trois avec des électrons de spin down. On ne considère que les états dont les électrons ont des spins différents formant le sous-espace de Hilbert de dimension neuf.

En effet, ceux dont les spins sont totalement polarisés forment deux matrices qui correspondront donc à des $S_z = 1$ et $S_z = -1$ et auraient été des sous-blocs de la matrice correspondant à l'hamiltonien complet.

En raison des symétries de l'hamiltonien déjà évoquées dans le chapitre 3, on se restreint au sous-espace dont le spin total selon O_z , S_z est nul.

On doit donc maintenant diagonaliser une matrice 9×9 et pour ce faire, on utilise maple. On considère le cas sans désordre $W = 0$. On calcule les valeurs propres pour les deux conditions de bord différentes; on se souvient que celles-ci apparaissent dans le terme de saut entre le premier et le dernier site, ici, le troisième sous la forme $c_{0,\sigma} = \exp(i\Phi)c_{3,\sigma}$.

On aura les hamiltoniens suivants :

$$H^{p(ap)} = \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & 0 & 0 & -(+)t & -t & -t & 0 \\ -t & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & -(+)t & 0 & -(+)t \\ 0 & -t & 0 & -(+)t & 0 & 0 & 0 & -t & -t \\ 0 & 0 & -(+)t & 0 & -t & 0 & -t & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t & -(+)t & 0 & -(+)t \\ -(+)t & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & -t & -t \\ -t & -t & 0 & -t & -(+)t & 0 & U & 0 & 0 \\ -t & 0 & -t & -t & 0 & -t & 0 & U & 0 \\ 0 & -(+)t & -t & 0 & -(+)t & -t & 0 & 0 & U \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

On obtient pour des conditions périodiques la valeur propre la plus basse suivante :

$$E_{\text{periodic}} = \frac{1}{2}U - t - \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 4Ut + 36t^2} \quad (\text{A.2})$$

tandis que pour des conditions antipériodiques, on a :

$$E_{\text{antiperiodic}} = -2t. \quad (\text{A.3})$$

On peut maintenant calculer la sensibilité de phase $\Delta E = E(0) - E(\pi)$ qui est la différence de deux valeurs propres données ci-dessus. Celle-ci vaut :

$$\Delta E = t + \frac{1}{2}U - \frac{1}{2}\sqrt{(U^2 + 4Ut + 36t^2)} \quad (\text{A.4})$$

et, dans la limite des très fortes interactions $U \rightarrow \infty$, on effectue un développement limité en t/U qui mène à la quantité suivante :

$$\Delta E \approx -\frac{8t^2}{U}. \quad (\text{A.5})$$

On constate que celle-ci décroît en $1/U$ comme il a été évoqué dans le chapitre 7 et diminue lorsque les interactions augmentent. Cela conforte également les résultats numériques trouvés dans le chapitre 5.

Afin de confirmer la validité de la théorie en perturbation de la section 7.3, on calcule les énergies périodiques et antipériodiques en utilisant une théorie de perturbation afin de voir si l'on obtient le résultat de l'équation A.5.

On néglige les états Ψ_γ doublement occupés car leur énergie sera trop élevée et on se restreint toujours au sous-espace $S_z = 0$. Il reste six états Ψ_β non doublement occupés à considérer. Ceux-ci sont reliés entre eux par des sauts aux plus proches voisins et il s'agit là d'un couplage au premier ordre. On présente ici les états Ψ_β et la façon dont ils sont reliés entre eux : on montre le super-réseau relatif au système de deux particules sur trois sites, notion précédemment évoquée dans le chapitre 7.

Les Ψ_β sont toujours les états à une particule ou zéro par site. On les note $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |6\rangle$.

Voici donc les états de base relatifs à ce système :

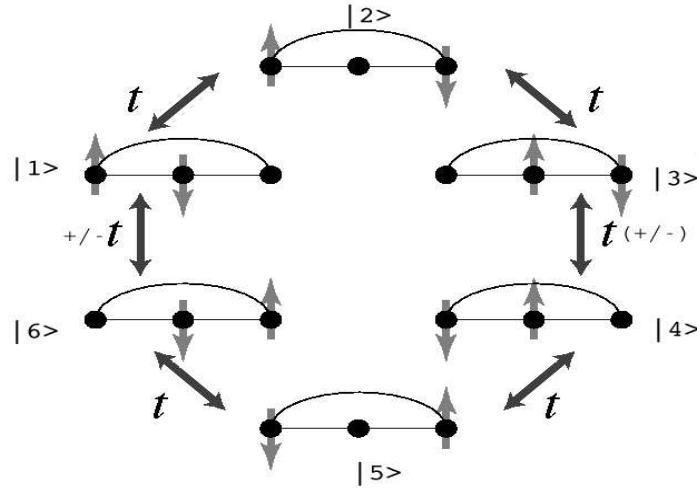


FIG. A.1: *Etats de base et amplitudes de transition dans le cas de deux électrons de spins différents sur trois sites.*

Ce super-réseau illustre parfaitement le théorème de connectivité présenté

précédemment dans le chapitre 7. A partir d'un état Ψ_β de base donné, chaque saut mène à un autre état Ψ'_β et les $2M = 6$ sauts conduisent au même état Ψ_β . Cette séquence de saut est la seule possible (sauf les permutations de l'ordre des états) comme il est représenté dans la figure A.1 et relie tous les états de base entre eux. En effet, dans ce système précis de deux électrons sur trois sites, avec un seul site vide, l'ordre des spins n'intervient pas (un seul électron avec spin up et un seul avec spin down) et on ne peut pas arranger différemment l'ordre des électrons de même spin. Lorsque l'on augmente le nombre de particules et ainsi, le nombre d'électrons de spins différents, les permutations des électrons autour de l'anneau ne pourront pas décrire toutes les possibilités de placer les électrons de même spin. C'est pourquoi plusieurs super-réseaux existeront comme il est écrit dans la section 7.3.

Dans le cas qui nous importe ici, soit deux particules sur trois sites, un seul super-réseau existe et donc, l'hamiltonien ne comportera que le bloc relatif à ce super-réseau.

On présente maintenant la matrice H_K relative à ces états.

$$H_k^{p(ap)} = \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & 0 & 0 & -(+)t \\ -t & 0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -(+)t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(+)t & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t \\ -(+)t & 0 & 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

On veut maintenant connaître l'état de base de ce système lorsque l'on considère des conditions de bord périodiques et antipériodiques. On utilise la diagonalisation directe (logiciel maple) afin d'obtenir l'état de base et on constate que dans le cas de conditions de bord périodiques, l'état propre est une superposition des états de base avec des poids positifs tandis que dans le cas de conditions de bord antipériodiques, il s'agit d'une superposition des états de base avec des poids dont les signes sont alternés.

Cela confirme l'utilisation du théorème de Perron-Frobenius mentionné dans la section 7.3 ainsi que la règle de signe de Marshall.

En effet, on les superpose de la façon suivante dans les cas de conditions périodiques et antipériodiques :

$$|\Psi_{0,\Phi=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle + |5\rangle + |6\rangle) \quad (\text{A.7})$$

$$|\Psi_{0,\Phi=\pi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle - |4\rangle - |5\rangle - |6\rangle) \quad (\text{A.8})$$

en se référant aux règles précédemment citées.

Lorsque l'on diagonalise la matrice 6×6 (A.6), on obtient la même valeur propre $-2t$ pour des conditions périodiques et antipériodiques.

On a alors recours à une théorie en perturbation et on doit calculer les termes $\langle \Psi_{0,\Phi} | H_K | \Psi_{0,\Phi} \rangle = \sum_{\beta,\beta'} \langle \Psi_{\beta,\Phi} | H_K | \Psi_{\beta',\Phi} \rangle$, puis prendre la différence entre les deux énergies afin d'avoir la sensibilité de phase.

Dans le cas de conditions de bord périodiques, tous les termes sont positifs. Chaque état Ψ_β est couplé à deux autres par un saut et on a alors $E(0) = \frac{1}{6} \times (-2t) \times 2 \times 6 = -2t$.

Considérons des conditions antipériodiques. En regardant la figure A.7, on constate qu'à chaque passage au travers de la condition de bord, correspond un changement de signe dû aux signes opposés des poids des deux états de base. Ainsi, le signe négatif de la condition de bord est compensé par celui qui naît lors du produit scalaire entre les deux états de base considérés.

On a alors $E(\pi) = \frac{1}{6} (\langle 1 | H_K | 2 \rangle + \langle 1 | H_K | 6 \rangle + \langle 2 | H_K | 1 \rangle + \langle 2 | H_K | 3 \rangle + \langle 3 | H_K | 2 \rangle + \langle 3 | H_K | 4 \rangle + \langle 4 | H_K | 3 \rangle + \langle 4 | H_K | 5 \rangle + \langle 5 | H_K | 4 \rangle + \langle 5 | H_K | 6 \rangle + \langle 6 | H_K | 5 \rangle + \langle 6 | H_K | 1 \rangle)$. En se référant à la figure A.1, on évalue

$$E(\pi) = \frac{1}{6} (-t + \exp(i\pi)(+t) - t - t - t + \exp(i\pi)(+t) + \exp(i\pi)(+t) - t - t - t - t + \exp(i\pi)(+t)) = -2t.$$

$\exp(i\pi)$ correspond à la condition de bord antipériodique. On obtient donc la même énergie que dans le cas périodique et la différence mène à une valeur nulle de la sensibilité de phase. Ce sont les valeurs propres obtenues par diagonalisation exacte.

On doit donc aller au second ordre. Il s'agit relever toutes les séquences possibles de deux sauts où un électron saute sur un site déjà occupé, puis, l'un des deux électrons saute sur un site vide afin de retrouver un des états de base. On définit $\Psi_{\alpha,\Phi}$ comme un état contenant un ou plusieurs états doublement occupés, comme ils ont été définis dans le chapitre 7. On doit donc évaluer les termes $\frac{1}{E_0 - E_1} \langle \Psi_{0,\Phi} | H_K | \Psi_{\alpha,\Phi} \rangle \langle \Psi_{\alpha,\Phi} | H_K | \Psi_{0,\Phi} \rangle$, soit évaluer tous les $\frac{1}{E_\beta - E_\gamma} \langle \Psi_\beta(\Phi) | H_K | \Psi_\gamma \rangle \langle \Psi_\gamma | H_K | \Psi_{\beta'}(\Phi) \rangle$.

Chaque état i sera connecté à 8 autres états (2 possibilités pour l'état doublement occupé et chaque état doublement occupé mène à quatre états).

Pour des conditions de bord périodiques, on aura : $E^{(2)}(0) = \frac{1}{6U} (6 \times 2 \times 2 \times 2t^2) = -8t^2/U$.

Pour les conditions de bord antipériodiques, en se référant à la figure (A.1), on considère chaque état séparément. Par exemple, pour l'état 1), on doit évaluer : $\langle 1 | H_K^2 | 2 \rangle + \langle 1 | H_K^2 | 1 \rangle + \langle 1 | H_K^2 | 4 \rangle + \langle 1 | H_K^2 | 6 \rangle + \langle 1 | H_K^2 | 1 \rangle +$

$$\langle 1|H_K^2|4\rangle + \langle 1|H_K^2|5\rangle + \langle 1|H_K^2|2\rangle \\ = t^2/U(+1 + 1 - 1 - 1 + 1 - 1 + 1 - 1) = 0.$$

Ce résultat s'applique à tous les états. L'énergie fondamentale pour des conditions de bord antipériodiques est donc nulle.

On évalue ensuite la sensibilité de phase qui est la différence entre les deux énergies trouvées ci-dessus. On obtient la même valeur que celle calculée par diagonalisation exacte qui est donc de $-8t^2/U$.

Cela permet de confirmer que la théorie de perturbation utilisée permet de calculer la sensibilité de phase. C'est celle-ci qui a été employée dans le chapitre 7 et qui permet de déterminer le comportement des courants permanents.

On vérifie également que le poids des états de base doublement occupés diminuent considérablement lorsque l'interaction augmente. Ces poids varient en t/U et on peut donc négliger ces états dans la limite des fortes interactions et ne considérer que les états à une ou zéro électron par site. On valide là encore la théorie en perturbation qui ne tient compte que des états classés dans l'espace \mathcal{S} .

Ce simple modèle a permis de montrer comment la théorie en perturbation permet de calculer la sensibilité de phase. Introduire du désordre dans le modèle ajoute des termes sur la diagonale du hamiltonien.

Bibliographie

- [1] M. Büttiker, Y. Imry and R. Landauer, Phys. Lett. A **96 A**, 365 (1983).
- [2] V. Chandrasekhar, R.A. Webb, M.J. Brady, M.B. Ketchen, W.J. Gallagher, and A. Kleinsasser, Phys. Rev. Lett. **67**, 3578 (1991).
- [3] L.P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir, and H. Bouchiat, Phys. Rev. Lett. **64**, 2074 (1990).
- [4] T. Giamarchi, B.S. Shastry, Phys. Rev. B **51**, 10915 (1995).
- [5] P. Schmitteckert, R.A. Jalabert, D. Weinmann et J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **81**, 2308 (1998).
- [6] W. Kohn, Phys. Rev. **133**, A171 (1964).
- [7] D. Weinmann, P. Schmitteckert, R.A. Jalabert, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **19**, 139 (2001).
- [8] W. Marshall, Proc. Roy. Soc. A **232**, 48 (1955).
- [9] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press (1995).
- [10] Y. Imry, Introduction to Mesoscopic Physics, Oxford University Press, Oxford, Second Edition (2002).
- [11] E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard et J. Zinn-Justin, *Physique quantique mésoscopique*, Elsevier Science (1995).
- [12] Mikaël Cassé, Etude du transport électronique dans des systèmes mésoscopiques: Interféromètre à anneau, thèse INSA Toulouse, (2001).

- [13] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College Publishing (1976).
- [14] L. Shubnikov, W.J. de Haas, Leid. Comm., 206, 210 (1940).
- [15] R. Bell, www.physique.usherb.ca/~pfournie/EHQ-PF.pdf.
- [16] K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [17] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn, 12, 570, (1957).
- [18] R. Kubo, S.J. Miyake, N.Hashitsume, Solid State Phys **17**, 269 (1965).
- [19] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, The Quantum Hall Effects **Springer Series in Solid-State Sciences**, 85 (1995).
- [20] R.E. Prange, Phys. Rev. B **23**, 4802 (1981).
- [21] H.L. Stormer, Rev. Mod. Phys. **71**, 875 (1999); R.B. Laughlin, Rev. Mod. Phys. **71**, 863 (1999); D.C. Tsui, Rev. Mod. Phys. **71**, 891 (1999).
- [22] J.K. Jain, Adv. Phys., 41, (1992).
- [23] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [24] T. Ando, Y. Arakawa, K. Furuya, S. Komiyama, H. Nakashima, *Mesoscopic Physics and Electronics*, Springer-Verlag (1998).
- [25] R. Landauer, Reed et Kirk **Nanostructure, Physique et Fabrication**, Academic Press (1989).
- [26] H-L. Engquist et P.W. Anderson, *Phys. Rev. B*, 24 (1151)1981.
- [27] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [28] M. Büttiker, Nanostructured Systems **Semiconductors and Semimetals 35**, Academic Press (1992).
- [29] J. T. Edwards, D.J. Thouless, J. Phys. C **5**, 807 (1972).
- [30] A. Altland, Y. Gefen, G. Montambaux, Phys. Rev. Lett. **76**, 1130 (1996).

- [31] R. Molina *et al*, preprint cond-mat 0402250, archived on cond-mat, (2004).
- [32] R. Deblock, Cohérence aux échelles mésoscopiques: réponse électromagnétique d'anneaux isolés et supercourants dans les nanotubes de carbone, thèse d'Orsay (2001).
- [33] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).
- [34] Albert Messiah, *Mécanique Quantique*, Dunod, Paris (1995).
- [35] M.V. Berry, Proc. B Soc. London A **392**, 45 (1984).
- [36] Geometric Phases in Physics, A. Shapere and F. Wilczek **World Scientific**, Singapore (1989).
- [37] R. Resta, Berry Phase in Electronic Wavefunctions **Troisième Cycle de la Physique Romande**, 8 chapitres (1995-96).
- [38] C. Terrier, Non-equilibrium Current in Mesoscopic Conductors, thèse de Universität Basel,(2002).
- [39] D. Y. Sharvin, Y. V. Sharvin, JETP Lett. **34**, 272 (1981).
- [40] L.I. Glazman, Am. J. Phys. **70**, 376 (2002).
- [41] N. Byers et C.N. Yang, Phys. Rev. Lett., **7**,46 (1979).
- [42] M. Büttiker, Y. Imry, M. Y. Azbel, Phys. Rev. A **30**, 1982 (1984).
- [43] A. Groshev, I.Z. Kostadinov, I. Dobrianov, Phys. Rev. B **45**, 6279 (1992).
- [44] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, Phys. Rev. B **50**, 8460 (1989).
- [45] A.J. Leggett, in *Granular Nanoelectronics*, edited by D.K. Ferry, J.R. Barker, and C. Jacobini, NATO ASI Ser. **B251** (Plenum, New York, 1991).
- [46] Georges Bouzerar, Effet des interactions dans les anneaux mésoscopiques désordonnés, thèse Paris XI,(1996).

- [47] U. Eckern and P. Schwab, *Journal of Low Temperature Physics*, **126** (2002).
- [48] H. Bouchiat and G. Montambaux, D. Sigeti et R. Friesner, *Phys. Rev. B* **42**, 7647 (1990).
- [49] H. Bouchiat and G. Montambaux, *J. Phys. France* **50**, 2695 (1989).
- [50] H.F. Cheung *et al*, *Phys. Rev. B* **37**, 6050 (1988); H.F. Cheung, E. K. Riedel et Y. Gefen, *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 587 (1990), E. K. Riedel et Y. Gefen, *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 587 (1990).
- [51] D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoît, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2020 (1993).
- [52] B. Reulet, M. Ramin, H. Bouchiat, and D. Mailly, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 124 (1995).
- [53] E.M.Q. Jariwala, P. Mohanty, M.B. Ketchen, and R.A. Webb, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1594 (2001).
- [54] W. Rabaud, L. Saminadayar, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoît, and B. Etienne, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3124 (2001).
- [55] E.L. Altshuler, B.L. Altshuler et A.G. Aronov, *Solid State Commun.*, **54**, 617 (1985).
- [56] M. Ramin, B. Reulet, H. Bouchiat, *Phys. Rev. B* **51**, 5582 (1995).
- [57] N. Trivedi et D. Browne, *Phys. Rev. B* **38**, 9581 (1988).
- [58] A. Schmid, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 80 (1991).
- [59] F. Von Oppen and E.K. Riedel, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 84 (1991).
- [60] B.L. Altshuler, Y. Gefen and Y. Imry, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 88 (1991).
- [61] M. Abraham, R. Berkovits, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1509 (1993).
- [62] R. Berkovits, *Phys. Rev. B* **48**, 14381 (1993).
- [63] A. Müller-Groeling, H.A. Weidenmüller, C.H. Lewenkopf, *Europhys. Lett.* **22**, 193 (1993); A. Müller-Groeling, H.A. Weidenmüller, *Phys. Rev. B*, **49**, 4572 (1994).

- [64] V. Ambegoakar et U. Eckern, Phys. Rev. Lett., **65**, 381 (1990).
- [65] G. Bouzerar, D. Poilblanc, G. Montambaux, Phys. Rev. B **49**, 8258 (1994).
- [66] H. Kato, D. Yoshioka, Phys. Rev. B **50**, 4943 (1994).
- [67] A. Cohen, K. Richter, and R. Berkovits, Phys. Rev. B **57**, 6223 (1998).
- [68] G. Benenti, X. Waintal and J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **83**, 1826 (1999).
- [69] G. Benenti, X. Waintal and J.-L. Pichard, Contribution to the Proceedings of the Rencontres de Moriond, 1999.
- [70] R.A. Römer and A. Punnoose, Phys. Rev. B **52**, 14809 (1995).
- [71] H. Mori and M. Hamada, Phys. Rev. B **53**, 4850 (1996).
- [72] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer (1994).
- [73] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **240**, 539 (1957); *ibid.* Proc. Roy. Soc. Ser. A **243**, 336 (1958).
- [74] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [75] E.H. Lieb, F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [76] E.H. Lieb, F.Y. Wu, Physica A, 312, 1 (2003).
- [77] H.A. Bethe, Zur Theorie der Metalle: I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atom Kette, Zeits. f. Physik, **71**, p.205 (1931). traduit en anglais dans D.C. Mattis, *The Many-Body Problem*, World Scientific, Singapore (1993).
- [78] J. Solyom, Adv. Phys **28**, 209 (1979).
- [79] K. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [80] M. Salerno, Z. Phys. B **9**, 469 (1996).
- [81] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **276**, 238 (1963); *ibid.* Proc. Roy. Soc. Ser. A **277**, 237 (1963).

- [82] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **281**, 401 (1964).
- [83] N. Andrei “*Integrable Models in Condensed Matter Physics*, p457, in *Low-Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists*, ed. by S. Lundquist, G. Morandi, and Yu Lu, Series on Modern Condensed Matter Physics **6**, World Scientific, Singapore (cond-mat/9408101) (1995).
- [84] H. Tasaki, Journal of Physics: Condensed Matter, **10**, (1998).
- [85] N.F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London, 2nd. edition (1990).
- [86] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
- [87] D. Belitz and T.R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).
- [88] André Luiz Malvezzi, archived on cond-mat, 0304375 preprint (2003).
- [89] D.C. Mattis, The Theory of Magnetism I, livre Solid State Sciences, 17 (1981).
- [90] *The Many-Body Problem, An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension*, ed. by D.C. Mattis, World Scientific, Singapore (1993).
- [91] J. Voit, Rep. Prog. Phys **58**, p.977 (1995).
- [92] H.J. Schulz, Physique quantique mésoscopique, Elsevier Science, (1995).
- [93] D. Loss, Phys. Rev. Lett. **69**, 343 (1992).
- [94] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 5, 1492, (1958).
- [95] P.W. Anderson, Solid State Phys. **14**, (1963).
- [96] P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys **57**, 287 (1985).
- [97] B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys **56**, 1469 (1993).
- [98] J. Richert, *Localisation dans les systèmes désordonnés*, cours Ecole Doctorale Strasbourg (1999).
- [99] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**,673 (1979).

- [100] D. Vollhardt et P. Wölfle, Phys. Rev. Lett. **48**, 699 (1982).
- [101] H. Tasaki, Prog. Theo. Phys, **99**, 489 (1998).
- [102] J-M. Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, livre Aléa Saclay (1992).
- [103] S.V. Kravchenko, G.V. Kravchenko and J.E. Furneaux, Phys. Rev. B **50**,8039 (1994).
- [104] E. Abrahams, S.V. Kravchenko and M.P. Sarachik, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001).
- [105] M. Goldstein, R. Berkovitz, preprint cond-mat 0306200, (2003).
- [106] S. R. White and R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **68**, 3486 (1992).
- [107] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [108] Karen Hallberg, archived on cond-mat, 0303557 preprint (2003).
- [109] M. Andersson, Numerical Renormalization Group Methods, Licenciate Thesis de Göteborg en Suède (1999).
- [110] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [111] Peter Schmitteckert, Interplay between interaction and disorder in one-dimensional Fermi systems, thèse de l'Université d'Augsburg (1996).
- [112] Philipp Brune, Insulating Phases of Correlated Electron Systems in Low Dimensions, thèse de l'Université d'Augsburg (2001); P. Brune, A. Kampf, Europhys. Journal B, 18, 2, 241 (2001).
- [113] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [114] *Density-Matrix Renormalization*, ed. by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg (Springer, Berlin, 1999).
- [115] J. W. Bray and S. T. Chui, Phys. Rev. B **19**, 4876 (1979); C. Y. Pan and X. Chen, Phys. Rev. B **36**, 8600 (1987); M. D. Kovarik, Phys. Rev. B **41**, 6889 (1990); T. Xiang and G. A. Gehring, J. Magn. Magn. Mater. **104-107**, 861 (1992).

- [116] E. Davidson, *Computers in Physics* **7**, 519 (1993); *J. Comput. Phys.* **17**, 87 (1975).
- [117] W. Zotos, F. Naef, M. Long, P. Prelovsek, *Open Problems in Strongly Correlated Electron Systems*, livre 273 (2001).
- [118] E. Gambetti-Césaire, D. Weinmann, R.A. Jalabert, P. Brune, *Europhys. Lett.* **60**, 120 (2002).
- [119] T. Giamarchi and H. Schulz, *Phys. Rev. B* **37**, 325 (1988).
- [120] W. Deng *et al*, *Phys. Rev. B* **50**, 7655 (1994).
- [121] T. Giamarchi and H. Schulz, *Europhys. Lett* **3**, 1287 (1987).
- [122] G. Chiappe *et al*, *Phys. Rev. B*, **54**, 19, 13515; archived on cond-mat, 9603153 preprint (1996).
- [123] E. Tsiper et A. Efros, *Journal Phys. : Condens Matter* **9**, L561 (1997).
- [124] E. Tsiper et A. Efros, *Phys. Rev. B* **57**, 6949 (1998).
- [125] *Strongly Correlated Fermions and Bosons in Low-Dimensional Disordered Systems*, I. Lerner, B.L. Altshuler, V.I. Falko, T. Giamarchi, NATO Science Series, Kluwer Academic Publishers (2002).
- [126] J-L. Pichard et al., *Interplay disorder-interaction in one dimensional quantum models*, *Annalen der Physik* 1 (1998).
- [127] P. Schmitteckert, T. Schulze, C. Schuster, P. Schwab, U. Eckern, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3, 560 (1998).
- [128] *Savoirs de référence scientifiques et techniques*, INRP accueil.
- [129] R.A. Jalabert, D. Weinmann, J-L. Pichard, *Physica E*, **9**, 347 (2001).
- [130] X. Waintal, G. Benenti, J-L. Pichard, *Ann. Phys. (Leipzig)* 8, 691 (1999).
- [131] C. A. Stafford, A. J. Millis, B. S. Shastry, *Phys. Rev. B* **43**, 13660 (1991).
- [132] H. Tasaki, *Archived on cond-mat/0301071*.

- [133] E.H. Lieb, in Proceedings of 1993 conference in honor of G.F. Dell'Antonio, *Advances in Dynamical Systems and Quantum Physics*, pp, 173-193, World Scientific (1995), Proceedings of 1993 NATO ASW *The Physics and Mathematical Physics of the Hubbard Model*, Plenum (in press), and *Proceedings of the IXth International Congress of Mathematical Physics*, Paris, 1994, D. Iagolnitzer ed., pp. 392-412, International Press (1995). Archived on cond-mat/9311033.
- [134] Hal Tasaki, Phys. Rev. B **40**, 13, 9192 (1989).
- [135] E. Lieb et D. Mattis, Journal of Mathematical Physics **4**, 2, (1962).
- [136] F. Selva, D. Weinmann, Eur. Phys. J. B, **18**, 137 (2000).
- [137] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **75**, 25, 4618 (1995).
- [138] B. Simon, The statistical mechanics of lattice gases, livre **1**, 130 (1993).
- [139] Z.Y. Weng, Phys. Rev. B, **50**, 18 (1994).
- [140] Z.Y. Weng et al, Phys. Rev. Lett., **67**, 23(1991); Z.Y. Weng et al, archived on cond-mat, preprint 9506070, (1995).
- [141] U. Schollwöck, Phys. Rev. B, **58**, 8194 (1998).
- [142] M. Cyrot, Physica B, **91**, (1977).
- [143] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 1, 392 (1966).
- [144] S.A. Trugman, Phys. Rev. B, **42**, 10, 6612 (1990).
- [145] A. Mielke and Hal Tasaki, Ferromagnetism in the Hubbard Model, Commun. Math. Phys. **158**, 341 (1993).
- [146] A. Mielke, Ferromagnetism in the Hubbard Model on line graphs, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, L73-77, 1991; A. Mielke, Ferromagnetism in the Hubbard Model on line graphs and further considerations, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 3311, 1991.
- [147] A. Mielke, Journal of Statistical Physics **62**, 509 (1991).
- [148] E.H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1202 (1989), errata Phys. Rev. Lett. **62**, 1927 (1989).