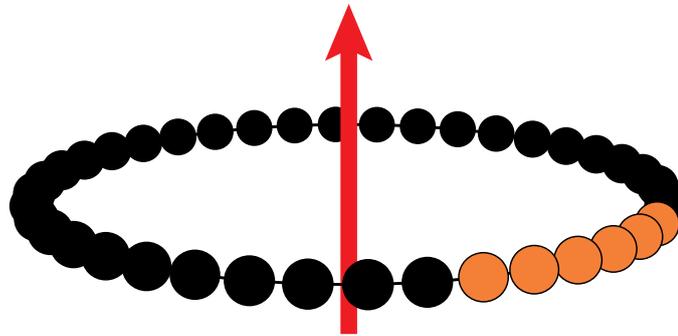


Transport mésoscopique dans des systèmes d'électrons fortement corrélés



THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Louis Pasteur de Strasbourg

Spécialité : Physique Théorique

par

Gabriel VASSEUR

Directeur de thèse

Dr. Dietmar WEINMANN

Thèse soutenue le 15 septembre 2006 devant le jury :

Dr.	Dietmar Weinmann	<i>Directeur de Thèse</i>
Prof.	Daniel Cabra	<i>Rapporteur Interne</i>
Dr.	Marc Sanquer	<i>Rapporteur Externe</i>
Dr.	Jean-Louis Pichard	<i>Président du Jury et Rapporteur Externe</i>
Prof.	Gert-Ludwig Ingold	
Prof.	Rodolfo A. Jalabert	

Résumé

À l'heure où la miniaturisation électronique atteint ses limites, une meilleure compréhension du transport quantique à travers des systèmes de dimensionalité réduite, dans lesquels l'interaction entre électrons ne peut plus être ignorée ou même traitée comme une perturbation, devient primordiale. La description théorique du transport électronique dans de tels systèmes est de fait un des problèmes majeurs de la physique mésoscopique actuelle.

Le traitement correct des corrélations introduites par l'interaction est un problème extrêmement non-trivial et malgré les nombreux travaux entrepris dans cette thématique et les résultats accumulés, beaucoup reste à faire pour réellement comprendre les effets des corrélations dans les nano-systèmes.

L'approche retenue dans cette thèse consiste à simuler sur ordinateur des modèles physiques simplifiés et à se limiter à des tailles suffisamment petites pour pouvoir faire un traitement numérique exact. Le but est de mettre en évidence les mécanismes qui prennent place dans ces modèles et qui peuvent être similaires à ceux qui apparaissent dans les systèmes réels.

En calculant numériquement (à l'aide de la technique de diagonalisation exacte de Lanczos) la statistique des niveaux d'énergie multi-particules, nous avons étudié les effets combinés du désordre et de l'interaction dans les systèmes bidimensionnels. Alors que l'interaction diminue les corrélations spectrales et donc augmente la localisation des électrons (caractère isolant) dans le régime de faible désordre, un comportement non-monotone apparaît dans le régime de fort désordre. Dans ce régime, alors que les électrons sont déjà localisés par le désordre, une interaction modérée a un effet délocalisant. Cette conclusion est confirmée par une étude de la structure des fonctions d'onde multiparticules. L'effet de délocalisation peut être compris comme résultant de réorga-

nisations de charge dues à une compétition entre le désordre et l'interaction pour établir la structure de l'état fondamental.

Nous nous sommes également intéressé à l'influence des corrélations sur la conductance des boîtes quantiques. Pour calculer numériquement la conductance en prenant en compte toutes les corrélations, nous avons utilisé une méthode récemment développée : la méthode de la boucle, utilisant un code basé sur l'algorithme DMRG. La généralisation de la méthode à des systèmes inhomogènes a permis d'étudier l'effet d'une tension de grille sur la conductance d'une chaîne en interaction. Bien que le couplage entre la chaîne et les fils jouant le rôle de réservoirs soit parfait dans notre modèle, nos résultats numériques, étendus par une étude analytique dans la limite de forte interaction, montrent que le blocage de Coulomb apparaît sous l'effet des corrélations. L'existence de ce blocage de Coulomb en l'absence de barrières de potentiel constitue le résultat le plus important de cette thèse.

Enfin, nous avons aussi travaillé au développement de la méthode de la boucle pour des systèmes avec spin. Introduire ce degré de liberté est bien évidemment souhaitable en vue d'améliorer le réalisme des modèles étudiés. Les premiers résultats que nous avons obtenus montrent que la méthode est toujours valable pour ces systèmes.

Mots-Clés: Fermions fortement corrélés, Transport Mésoscopique, Blocage de Coulomb, Localisation.

Remerciements

Ce manuscrit est le résultat de trois années passées à l'école de la Recherche, expérience formatrice s'il en est. Je souhaiterais ici remercier tous ceux qui ont participé à cette aventure, que ce soit au niveau scientifique ou à un niveau plus général.

Merci tout d'abord à mon directeur de thèse, Dietmar Weinmann, pour avoir guidé ma recherche pendant ces trois années avec beaucoup de présence et de disponibilité. Merci de m'avoir fait confiance et d'avoir respecté mon indépendance dans ma façon de travailler. Ça n'a pas toujours été facile, mais au bout du compte j'ai énormément appris grâce à cela. Je te remercie également de m'avoir fait redécouvrir l'escalade. J'espère que tu auras plein d'autres thésards pour oublier que ton premier est parti dans l'industrie!

Merci à Rodolfo A. Jalabert, qui a été beaucoup impliqué dans les discussions scientifiques et qui a beaucoup contribué à la qualité des résultats ainsi que celle de leur exposé dans cette thèse et les articles publiés.

Je souhaite également remercier Gert-Ludwig Ingold et Jean-Louis Pichard avec lesquels j'ai eu le plaisir d'avoir de stimulantes discussions scientifiques.

Merci à Peter Schmitteckert pour son code DMRG et nos longs échanges de courriels à propos du programme avec spin. Ça m'a permis indirectement d'apprendre beaucoup sur la programmation. Merci à Romaric David pour son aide sur la machine hpc et sa bonne humeur.

Merci à Dominique Spehler pour m'avoir donné l'opportunité de me frotter à l'enseignement, expérience ô combien enrichissante!

Avec un soupçon de nostalgie, je souhaite adresser des remerciements à Mme Maillot et à M. Pierquin, professeurs au lycée Jean-Jaurès à Reims, pour leur cours qui ont été pour moi plus formateurs peut-être qu'ils ne l'imaginent. Merci également à Pierre

Trebbia pour son enthousiasme dans son cours d'Histoire de la Physique à l'Université de Reims et en particulier pour m'avoir fait découvrir le personnage de Richard Feynman.

Merci à tous ceux avec lesquels j'ai eu la joie de jouer régulièrement au foot, et en particulier à Madjid Abes, Nadjib Baadji, Ovidiu Ersen, Ahmed Nait Abdi, Antoine Senger et Sébastien Thomas. Il a été particulièrement agréable de se défouler un peu dans une ambiance (la plupart du temps;-) détendue! Merci aussi à Guillaume Weick pour les séances d'escalade.

Je souhaite saluer également Samir Abdelouahed, Corina Etz, Thomas Fix, Élise Gambetti-Cesare, Ali Jaafar, Ali Kachmar, Stephane Klein, Emmanuel Maurat, Romaric Montsouka, Mircea Rastei, Pablo Tamborenea, Logane Tati Bismaths, Vincent Vlamink, et ceux que j'ai oublié... Merci à Max et à sa multinationale Hofheinz Telecom & Finance pour l'agréable séjour à Aussois. Salutations également à Nicolas Dumelié et à mes autres collègues restés à Reims. Enfin merci à Julien Venuat pour nos innombrables échanges autour d'une tasse de thé.

Merci à Bruno Petit (a.k.a. BP One) pour nos conversations trop rares et ton intérêt constant pour mon parcours. Merci à Dominique Sénon pour ton indéfectible soutien dans les moments difficiles et/ou stratégiques;-) Ton amitié m'est précieuse. Je tiens également à remercier Andrew Dufresnes pour son attitude, qui a su m'inspirer dans les moments difficiles.

Merci à Peter E. Falloon pour avoir rendu bien plus agréable de nombreux mois de la thèse, que ce soit en faisant de la musique ensemble ou bien en se risquant sur des snowboards. Je me souviendrai particulièrement de nos longues discussions qui ont vu notamment nos points de vue sur la vocation du chercheur évoluer et mûrir tout au long de la thèse (merci pour l'ouvrage qui est devenu ma référence sur le sujet [1]). Et enfin, merci pour m'avoir aidé à sauter le pas et à partir à l'aventure outre-Manche!

Je profite de ces remerciements pour exprimer mon affection pour ma sœur et mes frères. Le temps passé auprès de vous est toujours trop court! Enfin, merci à mes parents pour m'avoir pourvu dans la vie de ce qui s'avère être si rare et qui est pourtant l'essentiel...

Table des matières

1	Physique mésoscopique et problème à N corps	1
1.1	Introduction à la physique mésoscopique	3
1.1.1	Le régime mésoscopique	3
1.1.2	La localisation d'Anderson	4
1.1.3	Les courants permanents	6
1.1.4	Le blocage de Coulomb	10
1.2	De l'importance des corrélations	13
1.2.1	L'origine du succès des théories à un corps	13
1.2.2	L'importance de la densité électronique	15
1.2.3	Transition Métal-Isolant à deux dimensions	16
1.2.4	Amplitude des courants permanents	18
1.2.5	Blocage de Coulomb sans barrières tunnel	18
1.3	Le problème à N corps	19
1.3.1	Méthodes variationnelles	19
1.3.2	Théorie de la fonctionnelle de la densité	22
1.3.3	L'approche considérée pour cette thèse	24
1.4	Plan de la thèse	28
2	Modèles et concepts utilisés	31

2.1	Désordre et interaction	31
2.1.1	Le modèle	31
2.1.2	Courte revue	33
2.1.3	La statistique spectrale	35
2.2	Déterminer la conductance	38
2.2.1	Modèle d'un nano-système connecté à des fils unidimensionnels	38
2.2.2	Méthodes standards pour étudier le transport quantique	41
2.2.3	Courant permanent et conductivité : le lien de Kohn	45
2.2.4	La méthode de la boucle pour la conductance	46
2.3	Blocage de Coulomb faible	50
2.3.1	Premiers cas étudiés	51
2.3.2	Cas général	53
2.3.3	Hors-équilibre	54
3	Effets des interactions sur les états multi-particules	57
3.1	Introduction	58
3.2	Modèle utilisé	60
3.3	Répulsion des niveaux induite par l'interaction	61
3.4	Délocalisation dans la base des états sur site	65
3.5	Conclusion du Chapitre 3	68
4	Conductance en présence d'interaction : la méthode de la boucle	71
4.1	Des courants permanents à la conductance	71
4.1.1	Le cas sans interaction	73
4.1.2	Application de la méthode en présence d'interactions	76
4.2	L'extrapolation à taille infinie	79

4.2.1	Premiers contacts	79
4.2.2	D'où peuvent venir les difficultés	83
4.2.3	En densité inhomogène	85
4.2.4	Remarque sur la pente de l'extrapolation	90
4.3	Conclusion du Chapitre 4	91
5	Blocage de Coulomb sans barrières de potentiel	93
5.1	Introduction	93
5.2	Oscillations de conductance en fonction de la tension de grille	95
5.3	Approche perturbative à interaction forte	100
5.3.1	Introduction du formalisme	100
5.3.2	Conductance en régime de forte interaction	102
5.3.3	Positions et formes des pics	105
5.4	Lissage des contacts	110
5.5	Conclusion du Chapitre 5	114
6	Conductance d'une chaîne de Hubbard	117
6.1	Hamiltonien	117
6.2	La méthode de la boucle avec spin	119
6.2.1	Position du problème	119
6.2.2	Diffusion avec ou sans renversement de spin	120
6.2.3	Test de la méthode	122
6.3	Résultats numériques	123
6.3.1	Décroissance à L_S pair	124
6.3.2	Résonance Kondo à L_S impair	126
6.4	Conclusion du Chapitre 6	127

Conclusion	129
A Statistique spectrale non-universelle dans de petits systèmes	135
A.1 Sans interaction	135
A.1.1 Avec interaction	136
B Courant permanent dans un anneau comportant un diffuseur	139
B.1 États à une particule	140
B.1.1 Matrice de diffusion et matrice de transfert	140
B.1.2 États à une particule	141
B.2 Le courant permanent	145
B.3 La raideur de charge	146
C Diffusion par un puits de potentiel	149
Bibliographie	155

“Remember, it’s supposed to be fun!”
— Richard P. Feynman.

Chapitre 1

Physique mésoscopique et problème à N corps

“Let me bring you up to speed!”

— Wayne Campbell, *Wayne’s world*.

On apprend dans nos premiers cours d’électricité que le courant I traversant un conducteur métallique obéit à la loi d’Ohm : $I = GV$, où G est la conductance de l’échantillon et V est la différence de potentiel à laquelle il est soumis. La version locale de ce point de vue consiste à dire que la densité de courant \vec{j} est proportionnelle au champ électrique \vec{E} . Le coefficient de proportionnalité est appelé la conductivité électrique, σ .

Ces deux approches, globale et locale, sont bien entendu équivalentes. Dans le cas tridimensionnel, la conductance d’un échantillon en forme de cylindre de longueur L et de section S s’obtient à partir de la conductivité du matériau qui le constitue par la relation :

$$G = \sigma S/L. \tag{1.1}$$

Cette relation est valable à condition que le conducteur considéré soit suffisamment grand. Si c’est le cas, on dit qu’il s’agit d’un conducteur ohmique et on peut le décrire à l’aide de la physique classique, c’est-à-dire en négligeant l’aspect ondulatoire de la propagation des électrons. C’est ce qui est considéré dans l’électronique standard encore

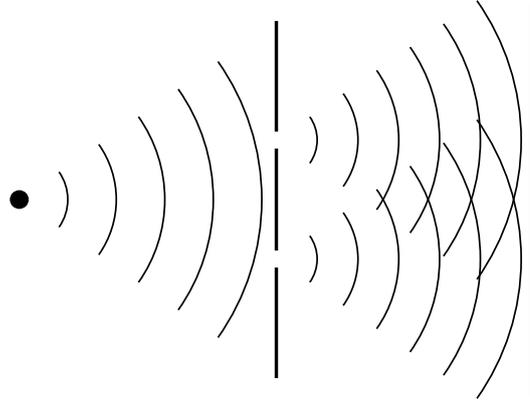


FIG. 1.1: Schéma de l'expérience des fentes d'Young. Une source ponctuelle émet une onde sphérique qui est divisée par un écran percé de deux fentes. La figure d'interférence des deux ondes résultantes peut être observée sur l'écran. L'expérience a été initialement réalisée par Young avec de la lumière, mais la même figure d'interférence peut être obtenue avec des électrons [3].

aujourd'hui.

D'autre part, on sait que la physique à l'échelle des atomes et des molécules, c'est-à-dire à l'échelle microscopique, est gouvernée par la mécanique quantique [2]. Un électron est représenté par une onde d'amplitude de probabilité qui se propage dans l'espace et peut interférer avec elle-même.

Une jolie démonstration de cette dualité onde/corpuscule est une réalisation relativement récente [3] de l'expérience des fentes d'Young dans laquelle les électrons sont envoyés un par un vers deux fentes et détectés sous la forme d'impacts sur un écran placé derrière les fentes (voir Figure 1.1). Malgré le caractère purement particulaire avec lequel les électrons sont détectés, on voit apparaître, à partir d'un nombre d'électrons suffisamment grand, une figure d'interférence sur l'écran, ce qui démontre le caractère ondulatoire des électrons.

Ces phénomènes d'interférence, ici observés dans le vide, peuvent survivre dans des conducteurs métalliques, pourvu que la propagation cohérente des électrons ne soit pas perturbée. C'est le cas dans des échantillons suffisamment petits et/ou à température suffisamment basse, voir section 1.1.1. Dans ces conditions, la cohérence avec laquelle les électrons se propagent donne lieu à une variété de phénomènes que l'on regroupe sous le nom de physique mésoscopique.¹

¹Le grec *mesos* signifie « au milieu », le régime mésoscopique est donc intermédiaire entre microscopique et macroscopique.

La course à la miniaturisation qui a lieu en électronique de pointe s'approche à grand pas du régime dans lequel ces nouveaux phénomènes apparaissent, invalidant entre autres la relation (1.1). Il est donc d'un intérêt crucial d'étudier ces effets. Cela a été fait durant les deux dernières décennies et il a déjà été possible de comprendre beaucoup de nouveaux phénomènes en utilisant des théories essentiellement basées sur une image de particules indépendantes. Cependant, au cours des dernières années, des phénomènes sont apparus qui sont difficiles à expliquer sans prendre en compte les interactions électron-électron.

Dans ce Chapitre d'introduction, nous nous proposons, après avoir défini le régime de la physique mésoscopique et introduit brièvement quelques exemples de phénomènes qui le caractérise (section 1.1), de nous intéresser à quelques expériences récentes qui soulignent l'importance d'étudier les corrélations dues à l'interaction entre les électrons (section 1.2), avant de dresser le panorama des différentes méthodes possibles pour étudier le problème à N corps et de présenter l'approche adoptée dans cette thèse (section 1.3).

1.1 Introduction à la physique mésoscopique

1.1.1 Le régime mésoscopique

La longueur de cohérence de phase L_ϕ est définie comme la longueur typique sur laquelle un électron peut se propager de façon cohérente. Au delà de cette longueur, l'électron subit un événement qui lui fait perdre sa phase. Cela peut être une collision inélastique avec un autre électron ou avec un phonon, ou bien une collision élastique avec une impureté magnétique au cours de laquelle l'électron voit son spin renversé.

Tant que l'électron garde sa cohérence, il peut être décrit par une amplitude de probabilité qui se propage comme une onde. Cette dernière peut interférer avec elle-même et cela mène à une variété de phénomènes quantiques qui font l'objet de ce que l'on appelle la physique mésoscopique.

Le régime mésoscopique est atteint lorsque la longueur L_ϕ est plus grande que les autres longueurs caractérisant le système, et en particulier la longueur L de l'échantillon étudié :

$$L \lesssim L_\phi. \quad (1.2)$$

Comme les collisions avec les phonons détruisent la cohérence, la température a un

impact important sur L_ϕ . Pour être réalisée, la condition (1.2) impose typiquement de considérer des échantillons petits (de l'ordre du micromètre, voire de la dizaine de nanomètres) à des températures relativement petites ($< 0.1\text{K}$).

Nous terminons ce paragraphe en introduisant deux autres échelles de longueurs importantes. La longueur d'onde de Fermi, $\lambda_F = h/\sqrt{2mE_F}$, est la longueur d'onde de Broglie associée aux électrons de conduction (d'énergie E_F). Il s'agit de la plus petite taille caractérisant le système.

Le libre-parcours moyen ℓ , quant à lui, dépend de l'intensité du désordre. Il correspond à la distance typique qu'un électron parcourt avant de voir sa direction de propagation aléatoirement modifiée par une collision élastique avec une impureté (non-magnétique) du matériau. Les conditions $\ell > L$ et $\ell \ll L$ correspondent au régime balistique et au régime diffusif, respectivement.

Chacune des trois sections suivantes présente en quelque détail un phénomène de la physique mésoscopique. Nous les introduisons pour leur pertinence avec le travail présenté dans cette thèse.

1.1.2 La localisation d'Anderson

Dans le régime diffusif, la conductance classique est donnée par la formule² de Drude [4] :

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{e^2}{3\pi^2\hbar}k_F^2\ell \quad (1.3)$$

où n est la densité électronique, $\tau = \ell/v_F$ est le temps de relaxation de la quantité de mouvement due aux collisions élastiques, et où k_F et v_F sont le vecteur d'onde et la vitesse au niveau de Fermi, respectivement. La prise en compte de la cohérence de phase apporte une correction négative, dite de localisation faible, à cette conductance [5].

Si le désordre est plus important, la propagation de la fonction d'onde associée à l'électron forme un réseau d'interférence particulièrement complexe. Des interférences constructives peuvent alors piéger l'électron. Il peut ainsi exister des états électroniques localisés, malgré le fait que l'électron ne soit pas enfermé dans un puits de potentiel. On parle dans ce cas de localisation forte.

²À trois dimensions.

La longueur de localisation ξ caractérise la distance sur laquelle l'amplitude de la fonction d'onde localisée diminue, loin du centre \vec{r}_0 du domaine de localisation (voir la revue [6]) :

$$|\psi(\vec{r})| \propto \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\xi). \quad (1.4)$$

À température nulle, la conduction à travers un système dans le régime localisé ($L \gg \xi$) se fait via des événements tunnel entre les états localisés. On a donc la relation de proportionnalité suivante pour la conductance :

$$G \propto \exp(-L/\xi). \quad (1.5)$$

La théorie d'échelle de la localisation [7] fournit une vision de l'effet du désordre selon la dimensionnalité d de l'espace considéré. Dans cette théorie on s'intéresse au coefficient

$$\beta = L \frac{d \ln g}{dL}, \quad (1.6)$$

où g est la conductance G en unités de e^2/h . Il est possible de déterminer β dans deux cas limite : $g \gg 1$ et $g \ll 1$.

Dans le cas $g \gg 1$, le désordre est faible et la loi d'Ohm est vérifiée. On peut généraliser la relation (1.1) au cas d'un hyper-cube de dimension d :

$$G = \sigma L^{d-2} \quad (1.7)$$

Ce qui donne dans cette limite $\beta = d - 2$.

Dans la limite $g \ll 1$, on est dans le régime localisé et la conductance décroît exponentiellement avec L , selon (1.5), de sorte que $\beta = \text{const} + \ln g$.

En supposant que rien de spécial ne se passe dans le régime intermédiaire et en sachant que la correction de localisation faible est négative et proportionnelle à $1/g$, on arrive au comportement schématisé sur la Figure 1.2.

Les conclusions que l'on peut tirer de cette Figure sont les suivantes. Pour $d \leq 2$, $\beta(g)$ est toujours négatif, et donc le système ne peut être qu'un isolant dans la limite thermodynamique. Pour $d = 3$, en revanche, il existe une transition métal-isolant, dite transition d'Anderson, dictée par l'importance du désordre.

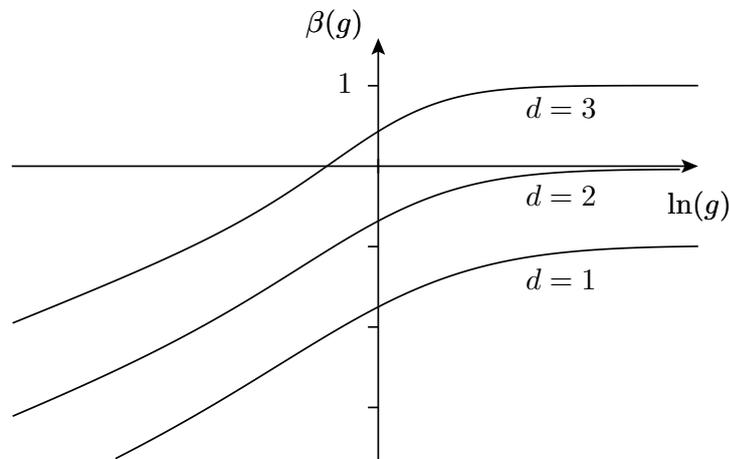


FIG. 1.2: Évolution du coefficient $\beta(g)$ en fonction de $\ln(g)$ pour des systèmes à $d=1,2$ et 3 dimensions.

Ces conclusions ont été confirmées numériquement ainsi que par l'expérience (voir [6]). Il est à noter que cette théorie ne prend pas en compte les interactions entre électrons.

1.1.3 Les courants permanents

Dans un anneau cohérent, un champ magnétique perpendiculaire a pour effet de créer un courant [8, 9, 10]. Ce courant existe dans l'état fondamental du système et est donc permanent, même dans un métal normal (non-supraconducteur). Une des propriétés de ce courant est qu'il est périodique de période h/e en fonction du flux magnétique φ qui traverse l'anneau. h/e est appelé quantum de flux.

Pour que l'anneau soit cohérent, sa circonférence L doit bien sûr être plus petite que la longueur de cohérence de phase L_ϕ . La réalisation la plus simple d'un tel anneau est la molécule de benzène. En physique mésoscopique, il est possible de fabriquer des anneaux métalliques très petits notamment grâce à des techniques de lithographie.

Intéressons-nous au cas d'un anneau unidimensionnel sans désordre de circonférence L traversé par un flux magnétique $\varphi = \phi_e \frac{h}{e}$ (voir Figure 1.3a). On peut écrire les potentiels

électromagnétiques en coordonnées polaires :

$$\vec{A}(r, \theta) = \frac{\phi \hbar}{2\pi e} \frac{\vec{e}_\theta}{r} = \frac{\phi \hbar}{2\pi e} \vec{\nabla} \theta, \quad (1.8)$$

$$V(r, \theta) = 0. \quad (1.9)$$

Nous allons voir qu'il est possible de prendre en compte le champ magnétique simplement en modifiant les conditions de bords du système.

On commence par rappeler que le champ électromagnétique (\vec{E}, \vec{B}) est obtenu à partir des potentiels (\vec{A}, V) par :

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (1.10)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \cdot V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (1.11)$$

Un choix de jauge consiste à choisir un couple (\vec{A}, V) particulier. Il est possible de changer de jauge à l'aide d'un champ scalaire arbitraire $F(\vec{r}, t)$ avec les relations suivantes :

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} F, \quad (1.12)$$

$$V' = V - \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (1.13)$$

En mécanique quantique, l'Hamiltonien d'un électron de charge $-e$ et de masse m s'écrit [11] :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A} \right)^2 - eV. \quad (1.14)$$

À partir des solutions $\psi(x, t)$ de l'équation de Schrödinger

$$H\psi = E\psi, \quad (1.15)$$

avec les potentiels (\vec{A}, V) dans l'Hamiltonien H , on peut obtenir les solutions $\psi'(x, t)$ du même problème dans une autre jauge, avec les potentiels (\vec{A}', V') dans un Hamiltonien H' , par :

$$\psi' = \psi e^{-\frac{ie}{\hbar} F}. \quad (1.16)$$

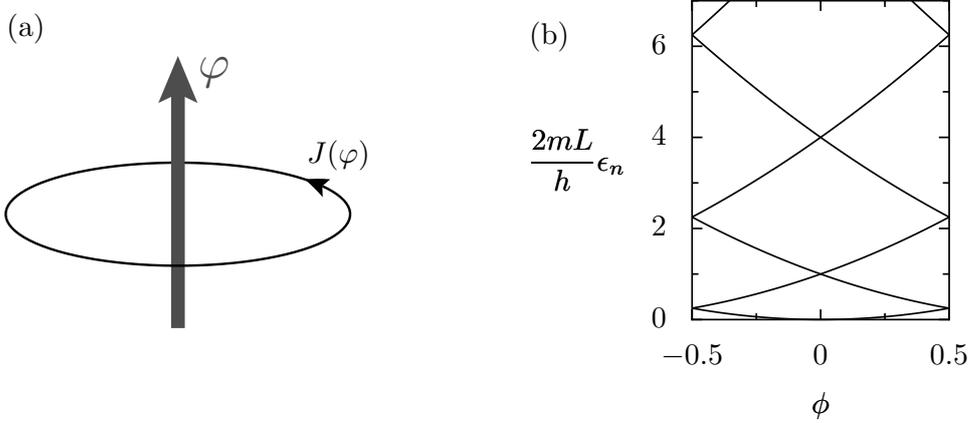


FIG. 1.3: (a) Un anneau unidimensionnel traversé par un flux $\varphi = \phi \frac{h}{e}$ est parcouru par un courant permanent $J(\varphi)$. (b) Évolution des énergies propres ϵ_n des états à un corps en fonction de ϕ .

La forme particulière (1.8) sous laquelle peut s'écrire le potentiel vecteur dans le problème de l'anneau qui nous intéresse ici fait qu'un choix de jauge judicieux

$$F(r, \theta) = -\frac{\phi \hbar}{2\pi e} \theta \quad (1.17)$$

permet de reporter totalement l'effet du champ magnétique dans l'application des conditions de bords. On peut donc reformuler le problème en celui d'un système d'électrons libres dans un conducteur unidimensionnel :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi'(x)}{\partial x^2} = \epsilon \psi'(x). \quad (1.18)$$

On a donc $\psi'_n(x) = e^{ik_n x}$ et $\epsilon_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$. Les valeurs de k_n sont déterminées en appliquant la condition aux bords :³

$$\psi'(x + L) = e^{i2\pi\phi} \psi'(x), \quad (1.19)$$

ce qui donne $k_n = 2\pi(n + \phi)/L$.

L'énergie ϵ_n du n -ième état à une particule est donc

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} (n + \phi) \right)^2. \quad (1.20)$$

³On remarque que pour $\phi = 0$ on retrouve la condition de bords périodiques, alors que pour $\phi = 1/2$ on a une condition de bords antipériodiques.

Et on comprend d'où vient la périodicité en flux. Chaque fois que φ change d'un quantum de flux h/e , le remplissage des états à une particule (voir Figure 1.3b) change pour que l'énergie de l'état multi-particule soit toujours minimale (pour le fondamental).

On peut calculer l'amplitude du courant porté par le n -ième état à une particule à partir de la vitesse v_n :

$$j_n = -e \frac{v_n}{L} = -\frac{e}{\hbar L} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial k} = -\frac{\partial \epsilon_n}{\partial \varphi} \quad (1.21)$$

Ce qui donne :

$$j_n = -\frac{eh}{mL^2}(n + \phi). \quad (1.22)$$

Du fait de la périodicité en flux, on peut se limiter aux valeurs de ϕ comprises entre $-1/2$ et $1/2$. Comme n est un entier et que l'on remplit les états dans l'ordre⁴ $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ on voit que le courant porté change de signe quand on passe d'un état au suivant. Comme de plus le dernier état occupé porte le courant le plus intense, c'est essentiellement lui qui domine le courant total

$$j = -\frac{\partial E_0}{\partial \varphi}, \quad (1.23)$$

où E_0 est l'énergie du fondamental.

Si on calcule

$$j = \sum_n j_n = -\frac{eh}{mL^2} \sum_n (n + \phi). \quad (1.24)$$

pour le cas où le nombre de particules est impair (n va alors de $-n_F$ à n_F), on obtient

$$j = -\frac{eh}{mL^2} n_F 2\phi. \quad (1.25)$$

On voit ainsi que l'amplitude maximale du courant total (pour $\phi = 1/2$) est donnée par le courant porté par l'état à une particule au niveau de Fermi à flux nul :

$$j_{\max} = \frac{ev_F}{L}. \quad (1.26)$$

⁴Le signe rempli en premier (+ ou -) dépend du signe de ϕ , voir Figure 1.3b.

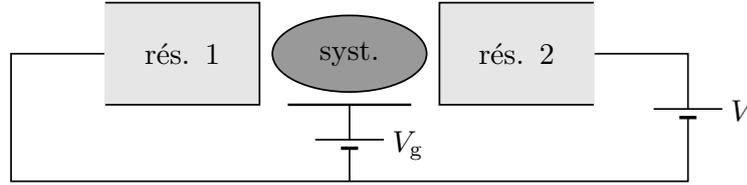


FIG. 1.4: Montage typique pour observer le blocage de Coulomb. Le nano-système est connecté aux réservoirs par des barrières tunnel. Une tension de grille V_g permet de faire varier le potentiel chimique du nano-système.

L'inclusion d'un faible désordre (de sorte que l'on soit dans le régime diffusif : $\xi \gg L \gg \ell$) mène à un courant permanent typique réduit [10] :

$$j_{\max} = \frac{ev_F \ell}{L^2}. \quad (1.27)$$

Ce résultat peut se comprendre en disant que le courant porté par un électron vaut e divisé par le temps typique t qu'il met à traverser l'anneau. Dans le cas sans désordre, ce temps est simplement $t = L/v$, où v est la vitesse de l'électron auquel on s'intéresse. Dans le cas désordonné, le mouvement aléatoire rend ce temps plus grand : $t = DL^2$ où D est la constante de diffusion, qui se trouve égale à $(lv)^{-1}$ dans le cas du régime diffusif à une dimension.

1.1.4 Le blocage de Coulomb

Le blocage de Coulomb est un effet dû aux interactions entre électrons. Il trouve son origine dans le fait que la charge e d'un électron est finie, et que par conséquent la charge totale (et l'énergie d'interaction associée) d'un nano-système quasi-isolé ne peut prendre que des valeurs discrètes (pour une revue, voir [12]).

L'observation du blocage de Coulomb nécessite donc que le nano-système soit quasiment isolé, afin que sa charge soit bien définie. Dans la théorie orthodoxe, on suppose que ceci est réalisé en le connectant aux réservoirs par des barrières tunnel de faible conductance ($\ll e^2/h$). Le schéma du montage expérimental typique est donné sur la Figure 1.4.

Comme le nano-système est quasi-isolé, les états électroniques à l'intérieur sont bien définis. Il est possible de les représenter avec une image à une particule en prenant en compte toutefois une renormalisation des niveaux due à l'énergie d'interaction. On note

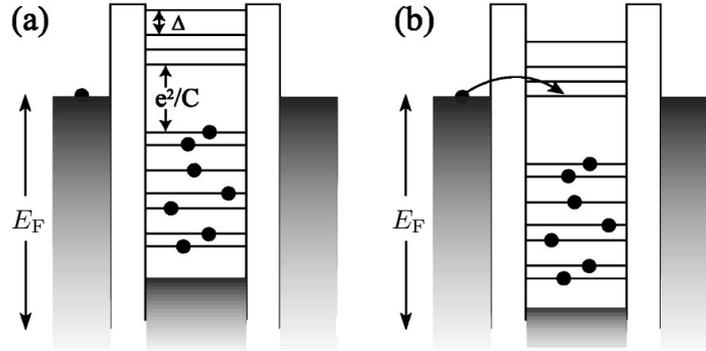


FIG. 1.5: États à une particule dans le système de la Figure 1.4. (a) situation de blocage de Coulomb. (b) situation à résonance. (Figure reproduite à partir de la référence [13])

$\langle \Delta \rangle$ l'écart moyen entre états à une particule (sans interaction). L'énergie nécessaire pour ajouter un électron au nano-système est donc typiquement $\langle \Delta \rangle$ plus l'énergie d'interaction entre cet électron et la charge déjà présente dans le nano-système. Cette dernière énergie augmente pour chaque électron ajouté au système d'une quantité E_C que l'on appelle l'énergie de charge et que l'on peut évaluer avec l'électromagnétisme standard à partir de la capacité C du nano-système :

$$E_C = \frac{e^2}{C}. \quad (1.28)$$

Pour que le blocage de Coulomb soit observé, il faut que l'énergie de charge excède l'énergie de l'agitation thermique $k_B T$ ainsi que celle eV due à une tension source-drain V . Si c'est le cas, le transport à travers le nano-système peut être bloqué.

Dans la Figure 1.5, on a tracé schématiquement les niveaux d'énergie à une particule dans le système. On a des continus dans les réservoirs et des niveaux discrets dans le nano-système. Il ne faut pas perdre de vue que, du fait des interactions, le tracé des niveaux dans le nano-système dépend en fait de l'occupation de ces niveaux.

Dans la situation de la Figure 1.5a, un électron au niveau de Fermi E_F dans un réservoir n'a pas assez d'énergie pour entrer dans le nano-système. Le transport est donc bloqué. Grâce à la tension de grille, il est possible de déplacer l'ensemble des niveaux à l'intérieur du dot. Lorsqu'un niveau jusqu'alors inoccupé arrive au niveau du niveau de Fermi dans les réservoirs (Figure 1.5b), un électron peut entrer (et sortir) du nano-système sans coût énergétique. On a donc une bonne conductance.

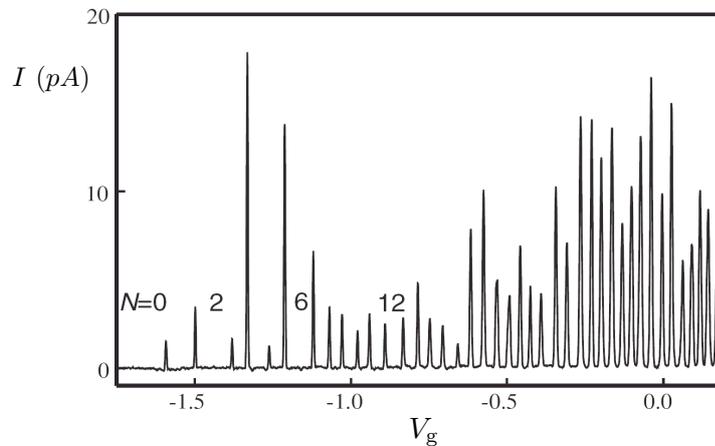


FIG. 1.6: Le courant à travers le nano-système mesuré en fonction de la tension de grille V_g dans une expérience du type de celle schématisée sur la Figure 1.4. Dans les vallées de conductance, le nombre N d'électrons dans le nano-système est bien défini. Chaque résonance ajoute un nouvel électron. (Figure reproduite à partir de la référence [13])

Une fois que la résonance est dépassée, l'état qui permettait la conduction devient occupé de façon permanente et on retrouve une situation équivalente à celle de la Figure 1.5a.

Si on mesure la conductance (ou le courant) en fonction de la tension de grille V_g , on observe donc une alternance de vallées (correspondant au blocage) et de résonances. Un résultat expérimental typique est présenté Figure 1.6.

Les transistors à effet de champ (FET pour *Field Effect Transistor*) utilisant le blocage de Coulomb sont appelés à juste titre transistor à un électron. Chaque vallée correspond à un nombre N bien défini d'électrons remplissant le nano-système. Hormis d'importantes applications possibles en nano-électronique, le blocage de Coulomb peut aussi servir d'outil pour explorer la physique des nano-systèmes (voir par exemple [14, 15]).

Si l'on augmente le couplage entre le nano-système et les réservoirs, les fluctuations quantiques (dues à des sauts virtuels d'un électron hors du nano-système) élargissent les niveaux du nano-système, qui deviennent de moins en moins bien définis à mesure que l'on augmente le couplage. En l'absence de barrières tunnel on s'attend donc à ce que le blocage de Coulomb disparaisse.

1.2 De l'importance des corrélations

La grande majorité des phénomènes de la physique mésoscopique a pu être comprise dans le cadre de théories à une particule (ce qui inclut les théories de champ moyen). Or, dans l'Hamiltonien

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_i V(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (1.29)$$

de N électrons placés dans un potentiel $V(\vec{r})$ (qui peut être un potentiel de confinement, ou bien un potentiel dû à un réseau d'ions périodique), le dernier terme, qui décrit les interactions entre électrons, introduit des corrélations qui invalident l'approximation des électrons indépendants, à la base des théories à une particule.

Dans cette section, après avoir expliqué pourquoi les théories à une particule peuvent souvent donner des résultats satisfaisants et discuté l'importance des corrélations, nous nous intéressons aux résultats d'expériences relativement récentes qui semblent nécessiter la prise en compte des corrélations pour être bien compris au niveau théorique.

1.2.1 L'origine du succès des théories à un corps

Si l'on introduit une charge dans un gaz d'électrons, ce dernier va vouloir se réorganiser pour l'écranter. S'il s'agit d'une charge négative, par exemple, les électrons vont avoir tendance à s'en éloigner, jusqu'à ce que la charge positive des ions compensent la charge introduite. Un électron un peu éloigné ne ressent donc quasiment pas la charge ajoutée. Si cela est valable pour une charge fixe, c'est en fait également valable pour n'importe quel électron.

Dans la théorie semiclassique de Thomas-Fermi, le potentiel en $1/r$ d'une charge ponctuelle devient, sous l'effet de l'écrantage, un potentiel en

$$\frac{e^{-k_s r}}{r} \quad (1.30)$$

où l'inverse de k_s peut être compris comme la longueur typique au-delà de laquelle une charge est considérée écrantée [4].

Ainsi, l'écrantage réduit considérablement l'importance des interactions. L'exponentielle dans le comportement (1.30) implique une portée finie de l'interaction, alors qu'un

potentiel en $1/r$ a une portée infinie.

Il est possible, et c'est ce qui est fait dans la théorie de Landau des liquides de Fermi, de considérer non plus des électrons, mais ce que l'on appelle des quasi-particules. Une quasi-particule est en quelque sorte un électron se déplaçant avec son nuage d'écrantage. Les quasi-particules interagissent donc faiblement entre elles.

Supposons que l'on peut utiliser une théorie à un corps pour les décrire. Le fondamental multi-particule est donc obtenu en peuplant les états à une particule jusqu'au niveau de Fermi. À partir de ce fondamental, les excitations peuvent être décrites en terme de paires particule-trou. Comme les quasi-particules interagissent (faiblement) les unes avec les autres, ces excitations vont avoir une durée de vie finie, du fait des événements de diffusion particule-particule induit par l'interaction. Or, le principe de Pauli réduit considérablement la taille de l'espace de phase pour le résultat d'une collision : À température nulle, la seule évolution possible pour une quasi-particule d'énergie ϵ (mesurée à partir du niveau de Fermi) est de décroître en une quasi-particule d'énergie ϵ' plus petite en créant une paire particule-trou d'énergie $\epsilon - \epsilon'$. Cela implique que la durée de vie d'une quasi-particule devient infinie quand on s'approche du niveau de Fermi.

Cet argument, dû à Landau, montre que l'image à un corps tient à condition de considérer la physique à pas trop grande énergie. Cela explique pourquoi les théories à un corps comptent tant de succès dans la physique du solide.

Dans les systèmes mésoscopiques, dont les dimensions peuvent être très petites et qui peuvent contenir relativement peu d'électrons, l'écrantage peut jouer un rôle bien moins important que dans un bon métal à trois dimensions. En particulier, si les dimensions du système considéré sont comparables à k_s^{-1} , l'écrantage ne peut pas être efficace.

La qualité de l'écrantage dépend dramatiquement de la quantité d'électrons pouvant y participer. Cela signifie que l'efficacité de l'écrantage dépend beaucoup de la densité électronique (voir section suivante) ainsi que de la dimensionalité : à trois dimensions, il y a davantage d'électrons qui peuvent s'approcher (et écranter) une charge qu'à deux dimensions par exemple.

Le cas purement unidimensionnel est particulier, car les électrons ne peuvent pas s'éviter et l'écrantage est quasi-inexistant. En revanche, si on suppose une relation de dispersion linéaire, on peut traiter les interactions dans ce cas de façon exacte grâce à la technique de bosonisation. Cela mène à ce que l'on appelle les liquides de Luttinger (voir section 2.2.1).

1.2.2 L'importance de la densité électronique

Si on prend le cas d'un gaz d'électrons libres ($V(\vec{r}) = 0$), on peut évaluer la dépendance en taille L de la contribution des deux autres termes de l'Hamiltonien à l'énergie $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ du fondamental.

Pour l'énergie cinétique E_c , en supposant des ondes planes (cf. section 1.3.1) on a :

$$E_c = \sum_n \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \sim \frac{1}{L^2}. \quad (1.31)$$

Pour ce qui est du terme d'interaction, il faut poser des variables spatiales adimensionnées : $\vec{x} = \vec{r}/L$. La normalisation des états impose alors de poser $\Psi'(\vec{x}) = \sqrt{L}\Psi(\vec{x}L)$. On a ainsi une évaluation de l'énergie d'interaction E_i qui se comporte en $1/L$:

$$E_i \propto \sum_{i \neq j} \int dr dr' \frac{|\Psi_i(\vec{r})|^2 |\Psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{L} \sum_{i \neq j} \int dx dx' \frac{|\Psi'_i(\vec{x})|^2 |\Psi'_j(\vec{x}')|^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \sim \frac{1}{L}. \quad (1.32)$$

On fait le rapport des deux estimations, on voit que :

$$\frac{E_c}{E_i} \sim \frac{1}{L}. \quad (1.33)$$

L'Hamiltonien (1.29) étant écrit pour un nombre fixe de particules (c'est pourquoi on ne s'est intéressé qu'à la dépendance en taille des énergies), on ne peut faire varier la densité électronique qu'en faisant varier la taille L en gardant N constant. On voit alors que plus la densité est petite (L grand pour N fixé), plus le terme d'interaction est important par rapport au terme cinétique. Au contraire, pour une forte densité (L petit pour N fixé), il devient envisageable de négliger les interactions, comme on l'a vu dans la section précédente.

Une unité très utilisée pour caractériser la densité (et donc indirectement l'importance des interactions) est le paramètre adimensionnel r_s , qui correspond au rayon d'une hypersphère dont le volume est égal au volume par électron, exprimé en unité du rayon de Bohr $a_B = \hbar^2/mc^2$. À d dimensions, on a :

$$\frac{1}{n} = \frac{V}{N} = S_d (r_s a_B)^d \quad (1.34)$$

Où le coefficients S_d vaut $4\pi/3$ à $d = 3$, π à $d = 2$ et 1 à $d = 1$.

Dans les trois sections suivantes, on introduit des expériences relativement récentes dans lesquelles les corrélations semblent être importantes.

1.2.3 Transition Métal-Isolant à deux dimensions

En l'absence d'interactions (donc dans la limite de forte densité, $r_s \ll 1$), on a vu (section 1.1.2) que tout système désordonné à deux dimensions était un isolant, du fait de la localisation forte. Dans l'autre limite (faible densité, $r_s \gg 1$), les interactions sont si fortes que les électrons se localisent et cherchent à rester loin les uns des autres en formant ce que l'on appelle un cristal de Wigner. Une étude analytique [16] montre qu'en l'absence de désordre le cristal se forme aux alentours de $r_s = 37$. En présence de désordre, le cristal peut se former à des valeurs de r_s plus petites et est piégé par le désordre, de sorte que le système est isolant [17, 18].

Expérimentalement, la résistivité (ou la conductivité) est mesurée en fonction de la température et de la densité électronique. Dans les deux régimes qui viennent d'être discutés (c'est-à-dire à forte et faible densité), le comportement observé est isolant (la résistivité croît lorsque la température diminue). Cependant, pour une densité électronique intermédiaire (correspondant à typiquement $r_s \sim 10$), un comportement métallique est observé [19, 20] : la résistivité décroît lorsque la température baisse (voir aussi les revues [21] et [22]). Sur la Figure 1.7, on peut voir le comportement isolant à faible densité et le comportement métallique à densité intermédiaire.

Si les électrons sont polarisés par un fort champ magnétique, le comportement métallique disparaît. Cela suggère l'importance du degré de liberté de spin dans le mécanisme donnant lieu à cette phase.

L'existence d'un tel comportement métallique est surprenant. Il n'est pas prédit par une théorie sans interaction (la théorie d'échelle de la localisation, voir section 1.1.2). Une introduction perturbative de l'interaction mène même à un renforcement de la localisation des électrons [23]. Cela semble impliquer que le comportement métallique résulte des effets combinés du désordre et de l'interaction, dans un régime où aucun des deux n'est perturbatif. Plusieurs approches ont été proposées, entre autres dans cette direction, pour déterminer l'origine de ce comportement métallique (voir la revue [24] et la section 2.1.2).

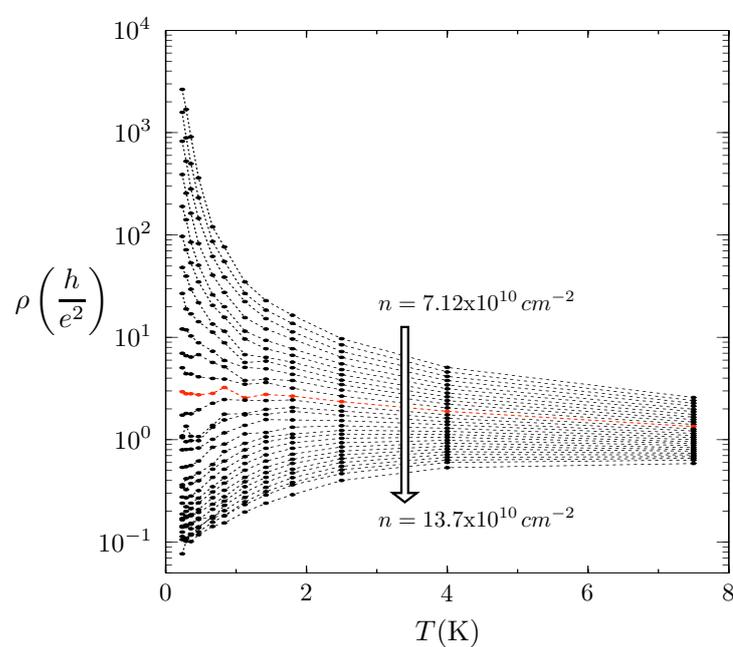


FIG. 1.7: Exemple de résultats expérimentaux concernant l'évolution de la résistivité ρ d'un gaz bidimensionnel d'électrons en fonction de la température T pour différentes densités électroniques n . Le comportement est isolant à faible densité, alors qu'il est métallique pour une densité plus grande. Figure reproduite de la référence [21].

1.2.4 Amplitude des courants permanents

L'existence des courants permanents, dont on a parlé dans la section 1.1.3 n'a été démontrée expérimentalement que relativement récemment, en 1990, par Lévy *et al.* [25] grâce à des mesures dans un réseau de 10^7 anneaux mésoscopiques de cuivre en régime diffusif.

Des études théoriques négligeant les interactions sur la moyenne sur le désordre (en régime diffusif) des courants permanents [26, 27] prédisent cependant un résultat un ordre de grandeur en-dessous des mesures de Lévy *et al.* .

Il a été possible peu de temps après de mesurer expérimentalement le courant permanent dans des anneaux d'or individuels [28]. Le libre-parcours moyen ℓ dans les anneaux est obtenu à partir de mesures de conductance de fils réalisés selon le même procédé que les anneaux, à partir de la formule (1.3) (on est dans le régime diffusif). Les courants permanents mesurés sont également un à deux ordres de grandeur plus intenses que la prédiction théorique donnée par la formule (1.27).

Des expériences menées sur des anneaux mésoscopiques en régime balistique (sur des semiconducteurs) [29, 30] s'avèrent en revanche en accord avec la prédiction de la théorie sans désordre (équation (1.26)). On peut donc s'attendre à ce que désordre et interaction soient tous deux cruciaux dans l'origine des observations expérimentales (voir la revue [31]).

1.2.5 Blocage de Coulomb sans barrières tunnel

Récemment, le blocage de Coulomb a été observé expérimentalement dans de très petits (dimension typique : 40 nm) transistors à effet de champ à base de silicium (MOS-FET, pour *Metal-Oxyde-Silicium Field Effect Transistor*) dans lesquels il n'y a pas de barrières tunnel construites délibérément [32, 33].

Dans ces échantillons, il est probable que le blocage de Coulomb soit dû soit au caractère très désordonné des accès [34], soit à des barrières de potentiel électrostatiques apparaissant avec la tension de grille. Néanmoins, la tendance à l'étude d'échantillons toujours plus petits, dans lesquels on s'attend à ce que l'interaction joue un rôle crucial, rend pertinente l'étude théorique des nouveaux phénomènes qui peuvent prendre place dans ces systèmes du fait des corrélations électroniques.

La question se pose par exemple de savoir si de mauvais contacts (et donc un nano-système presque isolé) sont réellement nécessaires pour observer le blocage de Coulomb. En particulier se pourrait-il que le blocage de Coulomb apparaisse avec des contacts parfaits, seulement par le fait des corrélations électroniques? Dans le Chapitre 5 de cette thèse, nous apportons une réponse positive à cette question.

1.3 Le problème à N corps

Les corrélations introduites par le troisième terme dans l'Hamiltonien (1.29), et dont nous souhaitons étudier les effets dans cette thèse, rendent l'équation de Schrödinger

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.35)$$

extrêmement difficile à résoudre. Dans cette section, on dresse un panorama des différentes approches qui ont été développées pour traiter le problème des interactions entre électrons, avant de présenter celle que l'on utilisera dans cette thèse.

1.3.1 Méthodes variationnelles

Une méthode variationnelle [11] consiste tout d'abord à choisir une forme particulière (on parle de fonctions d'essai) $\Xi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, dépendante d'un certain nombre de paramètres, pour la fonction d'onde multi-particule $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$. On cherche ensuite le jeu de paramètres qui rend minimum l'énergie

$$E_\Xi = \frac{\langle \Xi | H | \Xi \rangle}{\langle \Xi | \Xi \rangle} \quad (1.36)$$

de l'état multi-particule ainsi défini. La méthode variationnelle consiste en quelque sorte à réduire l'espace des états dans lequel on cherche une solution à l'équation de Schrödinger. Cette réduction peut simplifier considérablement la recherche d'une solution, mais elle peut aussi conduire à des fonctions d'onde relativement éloignées des véritables solutions. Tout l'art des méthodes variationnelles consiste donc à bien choisir les fonctions d'essai Ξ .

Hartree

Dans la méthode d'Hartree, on cherche à simplifier le problème posé par l'Hamiltonien (1.29) en se ramenant à un problème à une particule en traitant les interactions en champ moyen. Hormis le fait que les électrons ont tendance à se disposer pour minimiser leur énergie d'interaction, cette première approximation nous fait perdre toute corrélation.

La fonction d'essai choisie correspond simplement à un produit de fonctions d'onde à une particule :

$$\Xi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_i \xi_i(\vec{r}_i). \quad (1.37)$$

L'approche variationnelle mène à l'équation d'Hartree :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + e^2 \sum_{j \neq i} \int dr' |\xi_j(\vec{r}')|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \xi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \xi_i(\vec{r}) \quad (1.38)$$

On a donc une équation auto-cohérente à résoudre pour obtenir les fonctions à une particule $\xi_i(\vec{r})$.

Hartree-Fock

Une façon d'améliorer considérablement l'équation d'Hartree est de prendre en compte le caractère fermionique des électrons. Le principe de Pauli requiert que la fonction d'onde multi-particule soit antisymétrique lors de l'échange des positions de deux particules :

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = -\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N). \quad (1.39)$$

Ainsi, un certain type de corrélation (appelé échange) est pris en compte dans Hartree-Fock, puisque l'échange de deux particules affecte tout le système.

La fonction d'essai retenue pour Ψ est cette fois-ci un déterminant de Slater d'états

à une particule :

$$\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \xi_1(\vec{r}_1) & \dots & \xi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \xi_N(\vec{r}_1) & \dots & \xi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (1.40)$$

En appliquant le principe variationnel, on obtient les équations d'Hartree-Fock :

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + e^2 \sum_j \int dr' |\xi_j(\vec{r}')|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \xi_i(\vec{r}) \\ - e^2 \sum_j \int dr' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \xi_j^*(\vec{r}') \xi_i(\vec{r}') \xi_j(\vec{r}) = \epsilon_i \xi_i(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1.41)$$

On retrouve l'équation d'Hartree dans laquelle un nouveau terme apparaît : le terme d'échange. Sa présence complique considérablement l'équation : elle devient non-locale. Comme le terme d'échange ne peut pas se mettre sous la forme $U(\vec{r})\xi_j(\vec{r})$, Hartree-Fock n'est pas un champ moyen usuel, bien qu'il s'agisse toujours d'une image à une particule.

Notons que pour le problème du gaz homogène infini (c'est-à-dire en l'absence du potentiel $V(\vec{r})$), les solutions des équations de Hartree et de Hartree-Fock sont particulièrement simples : ce sont des ondes planes.

Méthodes post-Hartree-Fock

Bien que Hartree-Fock tienne compte d'un certain type de corrélations (celles qui proviennent du caractère fermionique des électrons), cela reste une image à une particule. Une façon systématique d'améliorer la prise en compte des corrélations est donnée par les théories dites Post-Hartree-Fock [35].

Celles-ci supposent qu'un ensemble complet de fonctions d'onde à une particule $\phi_i(\vec{r})$ est déjà connu (comme les fonctions d'Hartree-Fock par exemple). Les corrélations sont ensuite rétablies en incluant dans la fonction d'essai les diverses excitations possibles :

$$\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \Phi_0 + \sum_{i,a} C_i^a \Phi_i^a + \sum_{i<j,a<b} C_{ij}^{ab} \Phi_{ij}^{ab} + \dots \quad (1.42)$$

où Φ_0 est le résultat Hartree-Fock pour la fonction d'onde multi-particule, Φ_i^a correspond à la fonction Φ_0 dans laquelle la fonction $\phi_i(\vec{r})$ est remplacée par la fonction $\phi_a(\vec{r})$, *etc.*

Les coefficients C_i^a , C_{ij}^{ab} , \dots , sont les paramètres du processus variationnel.

Le développement (1.42) est appelé en anglais *Configuration Interaction (CI) wavefunction*. S'il n'est pas tronqué (et contient donc $N + 1$ termes pour un problème à N corps), alors le résultat est exact (d'où le côté systématique de l'approche). La façon d'écrire ce développement et de le tronquer constitue tout l'art des méthodes post-Hatree-Fock (notamment la *Coupled Cluster theory*). Ces méthodes, très utilisées en chimie quantique, sont très coûteuses numériquement.

En plus de ces méthodes numériques, mentionnons l'approche analytique RPA (pour *Random Phase Approximation*) qui consiste en un développement diagrammatique dont le paramètre est l'unité r_s , définie dans l'équation (1.34). Cette approche permet de prendre en compte de façon systématique une partie des corrélations dans le problème du gaz d'électrons homogène infini ($V(\vec{r}) = 0$). En pratique, l'approche RPA peut être utilisée pour des systèmes dans lesquels la densité électronique ne varie pas très rapidement sur l'échelle donnée par la longueur caractéristique de l'écrantage.

1.3.2 Théorie de la fonctionnelle de la densité

Dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT, pour l'anglais *Density Functional Theory*), on s'intéresse à la densité électronique $n(\vec{r})$ [36] plutôt qu'à la totalité de la fonction d'onde multi-particule $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ du fondamental.

Le premier théorème de Hohenberg-Kohn stipule que l'énergie E_0 du fondamental d'un système d'électrons en interaction placés dans un potentiel extérieur $V(\vec{r})$ peut s'écrire sous la forme d'une fonctionnelle unique de la densité électronique :

$$E[n] = \int n(\vec{r})V(\vec{r})d\vec{r} + F[n] \quad (1.43)$$

où $F[n]$ est une fonctionnelle de $n(\vec{r})$ indépendante du potentiel $V(\vec{r})$.

Le second théorème de Hohenberg-Kohn précise que la densité $n_0(\vec{r})$ du fondamental ψ_0 du système est celle qui rend la fonctionnelle $E[n]$ minimum.

Tout le problème consiste à obtenir une expression pour $F[n]$. La méthode proposée par Kohn et Sham [37] consiste à l'écrire sous la forme :

$$F[n] = E_K[n] + E_H[n] + E_{XC}[n] \quad (1.44)$$

où $E_K[n]$ est l'énergie cinétique d'un système d'électrons sans interaction ayant la densité $n(\vec{r})$, où $E_H[n]$ est l'énergie d'Hartree (répulsion Coulombienne) qui néglige les effets de corrélation et d'échange et $E_{XC}[n]$ est en quelque sorte le tapis sous lequel on glisse tout ce qui n'est pas contenu dans les deux premiers termes. L'avantage de cette décomposition de $F[n]$ est qu'une expression simple est connue pour les deux premiers termes.

Pour déterminer $E_{XC}[n]$, l'approximation la plus simple et la plus utilisée est nommée LDA (*Local Density Approximation*). Elle consiste à discrétiser le gaz d'électrons inhomogène en éléments de volume pour chacun desquels l'énergie d'échange et de corrélation est décrite à l'aide d'un modèle de gaz d'électrons en interaction *homogène* de même densité, à l'aide de l'approche RPA.

Une fois qu'on a une expression pour $E_{XC}[n]$, il reste à trouver la densité $n_0(\vec{r})$ qui rend l'énergie totale $E[n]$ minimum. Cette recherche de minimum peut se mettre sous la forme d'une équation de Schrödinger

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right) \phi(\vec{r}) = \epsilon \phi(\vec{r}) \quad (1.45)$$

pour le problème fictif de N particules sans interaction dans un potentiel effectif $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ qui, en plus de contenir $V(\vec{r})$, modélise l'effet de l'échange et des corrélations. Le potentiel $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ dépend bien entendu de la densité électronique, qui à son tour peut-être obtenue connaissant les fonctions $\phi(\vec{r})$:

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2. \quad (1.46)$$

Il s'agit donc d'un problème auto-cohérent dans le même style que Hartree (au niveau de la difficulté). Notons que si l'énergie E du fondamental et la densité $n(\vec{r})$ ont une interprétation physique bien établie, cela n'est pas le cas des fonctions $\phi(\vec{r})$, qui doivent donc être considérée comme des outils.

Cette théorie peut être étendue aux états excités en prenant en compte la dépendance en temps (TD-DFT pour *Time Dependent Density Functional Theory*). La théorie de la fonctionnelle de la densité est très employée pour calculer des structures de bande.

1.3.3 L'approche considérée pour cette thèse

Une autre voie possible pour améliorer notre compréhension des systèmes en interaction est d'étudier des Hamiltoniens modèles. Il s'agit de simplifier considérablement l'Hamiltonien (1.29), tout en capturant l'essentiel du problème à N corps dans un certain régime.

Un exemple est le modèle de Hubbard (voir Chapitre 6), dans lequel l'espace est discrétisé en un réseau de sites (pouvant représenter des atomes) pouvant accueillir chacun au plus deux électrons (s'ils sont de spin opposés). L'interaction entre électrons est réduite à sa plus simple expression : deux électrons n'interagissent que lorsqu'ils sont sur le même site. Malgré cette simplicité, le modèle contient les ingrédients nécessaires pour étudier l'effet des corrélations.

Ce genre d'Hamiltonien modèle peut éventuellement être justifié par un processus de renormalisation dans lequel on ne garde que les interactions les plus significatives [38]. Le but n'est cependant pas de décrire avec réalisme un système ou un matériau particulier. L'avantage, par contre, est la simplicité : on peut étudier les corrélations et obtenir des résultats quantitatifs sur leurs effets et les mécanismes sous-jacents. Ces résultats peuvent ensuite améliorer la compréhension (au niveau qualitatif) des systèmes réels.

Les Hamiltoniens modèles étant des Hamiltoniens sur sites (c'est-à-dire dans un espace discrétisé), ils se prêtent particulièrement bien à une étude numérique. L'étude de systèmes relativement petits autorise même l'utilisation de techniques numériques (quasi-)exactes, telle que la diagonalisation Lanczos ou bien l'algorithme DMRG.

Dans cette section, nous nous contentons de donner l'idée centrale à la base de ces méthodes, que nous utiliserons de façon intensive dans cette thèse.

Diagonalisation Lanczos

Dans l'algorithme de Lanczos, l'idée est d'obtenir une matrice tridiagonale à partir de l'Hamiltonien H . Il existe en effet des algorithmes de diagonalisation standards pour les matrices tridiagonales qui sont beaucoup plus performants que ceux existants pour les matrices quelconques.

Le premier vecteur de la base Lanczos est un vecteur aléatoire $|\xi_0\rangle$. On décompose

ensuite le résultat $H|\xi_0\rangle$ en

$$H|\xi_0\rangle = a_0|\xi_0\rangle + b_1|\xi_1\rangle, \quad (1.47)$$

où $|\xi_1\rangle$ est choisi orthogonal à $|\xi_0\rangle$ et de phase telle que b_1 est réel. On applique ensuite H à $|\xi_1\rangle$ et l'on décompose le résultat comme suit :

$$H|\xi_1\rangle = b'_1|\xi_0\rangle + a_1|\xi_1\rangle + b_2|\xi_2\rangle, \quad (1.48)$$

où $|\xi_2\rangle$ est choisi orthogonal à $|\xi_0\rangle$ et à $|\xi_1\rangle$. L'hermiticité de H

$$\langle \xi_i | H | \xi_j \rangle = \langle \xi_j | H | \xi_i \rangle \quad (1.49)$$

implique que $b'_1 = b_1$. On applique à nouveau H à $|\xi_2\rangle$, et ainsi de suite. En fait, l'hermiticité (1.49) implique que l'on peut écrire l'étape i à l'aide de trois vecteurs seulement :

$$H|\xi_i\rangle = b_i|\xi_{i-1}\rangle + a_i|\xi_i\rangle + b_{i+1}|\xi_{i+1}\rangle. \quad (1.50)$$

Le processus d'itération est stoppé à $i = M$ et on impose $b_{M+1} = 0$. On obtient ainsi une matrice tridiagonale d'ordre M que l'on note H_M . Théoriquement si M vaut la dimension de l'espace de Hilbert, alors on a simplement procédé à un changement de base, et dans la nouvelle base H est tridiagonal. En pratique, les erreurs numériques s'accumulent à chaque itération et il est courant de considérer des valeurs de M valant plusieurs fois la taille de l'espace de Hilbert.

L'algorithme de Lanczos ne fait intervenir que des multiplications de vecteurs par la matrice à diagonaliser H . Cela en fait un algorithme particulièrement efficace pour traiter des matrices creuses (c'est-à-dire dont la plupart des éléments sont nuls). Comme de plus les extrémités du spectre de H_M convergent très rapidement vers les énergies propres de H correspondantes lorsque M augmente, l'algorithme de Lanczos est tout indiqué lorsque l'on est intéressé par la connaissance précise des états et énergies propres aux extrémités du spectre (comme le fondamental d'un système multi-particule par exemple). À l'heure actuelle, typiquement, la méthode de Lanczos permet d'étudier le fondamental de systèmes dont la dimension de l'espace de Hilbert est de l'ordre de 10^6 . Nous renvoyons à la référence [39] pour la mise en œuvre pratique et les divers raffinements de cet algorithme.

DMRG

L'algorithme DMRG⁵ [40, 41, 42, 43] est une technique de renormalisation, c'est-à-dire que le système est construit en assemblant des blocs plus petits. L'intérêt réside dans le fait que tous les états propres des blocs n'ont pas besoin d'être connus, l'algorithme permettant de ne garder que les états les plus pertinents pour la description du fondamental du système global.

DMRG permet d'obtenir la valeur moyenne (*the expectation value*) de n'importe quel opérateur O sur le fondamental $|\Psi_0\rangle$ du système, et donc en particulier on peut calculer l'énergie du fondamental $E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$.

La première étape de l'algorithme consiste à construire le système en faisant croître des blocs. On commence par une taille L_{\min} de bloc suffisamment petite, par exemple $L_{\min} = 3$ sites, pour pouvoir connaître tous leurs états. Pour ajouter des sites au bloc et le faire grandir, on crée un « environnement » pour le bloc en en faisant une simple copie. La situation initiale consiste en deux blocs (gauche et droite) identiques avec deux sites entre les deux :

$$\boxed{\text{G}} \circ \circ \boxed{\text{D}} .$$

Voici l'algorithme qui permet de faire croître les blocs constituant le système :

1. Connaissant les termes de couplage entre les sites et les blocs (de gauche et de droite), on construit la matrice correspondant à l'Hamiltonien du système global représenté ci-dessus.
2. Le fondamental $|\Psi_0\rangle$ du système est déterminé. Il peut s'écrire

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{i,j} |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_j\rangle \quad (1.51)$$

en fonction des états $\{|\alpha_i\rangle\}$ de la moitié gauche du système global (c'est-à-dire $\boxed{\text{G}} \circ$) et des états $\{|\beta_j\rangle\}$ de la moitié droite ($\circ \boxed{\text{D}}$).

3. À partir de la matrice densité $\rho = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$ du système global, on détermine la matrice densité réduite pour chaque moitié du système. Par exemple pour la moitié

⁵L'acronyme signifie *Density Matrix Renormalization Group*.

gauche, on a :

$$\rho^G = \sum_j \langle \beta_j | \rho | \beta_j \rangle = \sum_{i,i',j} \Psi_{i,j}^* \Psi_{i',j} |\alpha_i\rangle \langle \alpha_{i'}|. \quad (1.52)$$

4. La diagonalisation de ρ^G permet de construire des opérateurs de troncation qui ne vont retenir, dans l'espace des $\{|\alpha_i\rangle\}$, que les N_c états propres de ρ^G correspondant aux valeurs propres les plus grandes, c'est-à-dire participant le plus au fondamental $|\Psi_0\rangle$ du système global. On fait de même pour la partie droite.
5. À l'aide des opérateurs de troncation, on réalise l'étape de renormalisation

$$\boxed{G} \circ \Rightarrow \boxed{G}.$$

Et de même pour la partie droite.

6. Entre les deux blocs ainsi obtenus, on ajoute deux sites intermédiaires pour se retrouver dans la situation de l'étape 1.

L'algorithme de construction prend fin lorsque le système global atteint la taille L désirée. Un problème limite cependant la précision du résultat obtenu : les N_c états d'un bloc de taille L_b sont choisis de telle façon que leur recouvrement avec le fondamental du système de taille $2(L_b + 1)$ soit maximum. Or, comme $2(L_b + 1)$ peut être beaucoup plus petit que L , du moins au début du processus, les N_c états choisis ne sont en fait pas les meilleurs pour décrire le fondamental du système de taille L .

Il est cependant possible d'améliorer considérablement la précision des résultats en ayant recours à un second algorithme, dit de « balayage » (*sweep*).

Au terme de l'algorithme de construction, on a un système de L sites formé de deux blocs de $(L - 1)/2$ sites et de deux sites seuls. Le balayage consiste à continuer de faire croître un des blocs aux dépens de l'autre. Le bloc qui croît est obtenu par le processus décrit précédemment (troncation basée sur la matrice densité réduite), alors que pour le bloc qui décroît, on utilise les données obtenues précédemment pour un bloc de même taille. Lorsque le plus petit bloc atteint la taille L_{\min} , c'est lui qui se met à croître au dépens de l'autre bloc.

L'exécution de quelques balayages de ce genre permet d'obtenir de bien meilleurs résultats que l'algorithme de construction seul, parce qu'à chaque étape, l'environnement du bloc considéré devient plus réaliste.

Ainsi l'algorithme DMRG permet-il d'obtenir le fondamental d'un système avec à la fois une grande précision (bien sûr liée à la grandeur du nombre N_c) et une grande

efficacité (car on réalise la meilleure troncation). Du fait de cette efficacité, DMRG peut être considéré comme une méthode numérique quasi-exacte. La taille de l'espace de Hilbert des systèmes qui peuvent être étudiés peut atteindre 10^{88} (voir Chapitre 5).

En contrepartie c'est un algorithme qui n'est vraiment adapté qu'à des systèmes unidimensionnels dans lesquels les interactions ainsi que les possibilités de saut d'un site à l'autre sont à courte portée. En effet, le processus de croissance des blocs suppose que l'ajout d'un site perturbe peu le système. Des extensions à des systèmes à deux dimensions existent, mais leur efficacité est réduite par rapport au cas unidimensionnel, et la taille des espaces de Hilbert que l'on peut étudier est beaucoup, beaucoup plus petite dans ces cas-là (voir aussi le Chapitre 6).

1.4 Plan de la thèse

Dans cette thèse, nous étudions les effets des corrélations sur le transport dans des systèmes de basse dimensionalité. L'étude de systèmes relativement petits, décrits par des Hamiltoniens modèles, autorise l'utilisation de techniques numériques (quasi-)exactes, comme la diagonalisation Lanczos ou bien l'algorithme DMRG (voir la section précédente). Lorsque cela est possible, les calculs numériques sont soutenus par des calculs analytiques. Le but est de mettre en évidence des mécanismes généraux qui prennent place dans les systèmes modèles étudiés et qui peuvent être similaires à ceux qui apparaissent dans les systèmes réels.

Parmi les thèmes auxquels nous nous sommes intéressés dans cette thèse se trouve l'étude des effets combinés du désordre et de l'interaction dans les systèmes bidimensionnels. On a effectivement vu dans les sections 1.2.3 et 1.2.4 que ces effets étaient loin d'être compris de façon satisfaisante. Dans le Chapitre 3, nous utilisons notamment le lien existant entre la statistique spectrale et les propriétés de transport pour étudier un modèle de fermions sans spin à deux dimensions interagissant dans un potentiel désordonné.

Nous nous sommes également intéressé au problème du calcul de la conductance d'un nano-système en présence d'interactions. Pour cela, nous avons choisi d'utiliser la méthode de la boucle (décrite au Chapitre 4) qui permet d'obtenir sans approximation, même en présence d'interaction, la conductance en réponse linéaire à température nulle de nano-systèmes connectés à des réservoirs par des fils unidimensionnels. Nous avons

été amené à poursuivre le développement de la méthode, notamment lorsqu'il s'agissait d'obtenir la conductance à proximité de résonances.

Grâce à la méthode de la boucle, nous avons pu étudier le transport à travers une chaîne unidimensionnelle en interaction (Chapitre 5). Une des motivations, suggérée par les observations expérimentales discutées dans la section 1.2.5, était d'étudier la possibilité d'apparition d'un blocage de Coulomb malgré le bon couplage de la chaîne aux réservoirs. Notre étude numérique ainsi que des calculs analytiques ont permis de comprendre l'origine de ce blocage de Coulomb inhabituel.

Enfin, en guise d'ouverture vers des travaux ultérieurs, nous nous sommes attachés à généraliser la méthode de la boucle aux systèmes d'électrons avec spin (Chapitre 6).

Mais auparavant, il nous faut introduire les modèles étudiés ainsi que les concepts utilisés, tels que la statistique spectrale et les méthodes pour calculer la conductance. Cela est l'objet du Chapitre suivant.

Chapitre 2

Modèles et concepts utilisés

“Please excuse the crudity of this model, I didn’t have time to build it to scale or to paint it.”

— Dr. Emmett L. Brown, *Back to the future*.

Dans ce Chapitre, nous introduisons les modèles auquel nous allons nous intéresser dans cette thèse ainsi que les concepts utilisés pour les étudier, tels que la statistique spectrale ou la méthode de la boucle pour le calcul de la conductance. Nous terminons ce Chapitre par une revue sur l’étude de la disparition du blocage de Coulomb dans les boîtes quantiques ouvertes.

2.1 Désordre et interaction

Le premier sujet auquel nous souhaitons nous intéresser (Chapitre 3) est l’étude des effets combinés du désordre et de l’interaction dans les systèmes bidimensionnels. Notre motivation vient du fait que ces effets pourraient être à l’origine du comportement métallique observé à basse température dans ce genre de systèmes (voir section 1.2.3).

2.1.1 Le modèle

Nous considérons donc un système de N fermions sur un réseau bidimensionnel de L sur L sites. On note $M = L^2$ le nombre total de sites.

Malgré l'importance du rôle qu'il semble jouer dans les systèmes expérimentaux, nous ne tenons pas compte du spin. La raison en est que l'étude numérique devient sensiblement plus difficile si l'on prend ce degré de liberté en compte. Dans des études ultérieures, il est bien entendu fort souhaitable d'inclure le spin. Notre modèle n'est cependant pas irréaliste, dans le sens où les fermions sans spin que nous étudions peuvent être vus comme des électrons polarisés en spin. Il suffit pour réaliser cela qu'il y ait un fort champ magnétique dans le plan du système bidimensionnel, de façon à polariser les électrons sans affecter leur comportement orbital.

L'Hamiltonien du système s'écrit

$$H = H_A + H_U, \quad (2.1)$$

où H_A est l'Hamiltonien d'Anderson standard

$$H_A = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^+ c_j + c_j^+ c_i) + \sum_{i=1}^M v_i c_i^+ c_i, \quad (2.2)$$

où c_i^+ (c_i) crée (annihile) un électron sur le site i . Le premier terme de H_A permet aux électrons de sauter entre deux sites proches voisins $\langle i, j \rangle$ sur le réseau (terme de *hopping*). On prend $t_h = 1$ ce qui permet de fixer une unité d'énergie. Le second terme de H_A modélise un potentiel désordonné. Les v_i sont des variables aléatoires indépendantes qui sont distribuées uniformément dans l'intervalle $[-W/2; W/2]$. W est l'intensité du désordre.

L'Hamiltonien H_A peut être vu comme le résultat d'une discrétisation de l'espace pour un Hamiltonien décrivant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle d'une particule évoluant dans un potentiel aléatoire.

En vue d'éviter les effets de bords, en particulier pour les systèmes relativement petits que nous allons étudier, on choisit de travailler avec des conditions de bords périodiques, ce qui mène à une topologie toroïdale.

Le terme d'interaction H_U est choisi de la forme Coulombienne :

$$H_U = \frac{U}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^M \frac{c_j^+ c_i^+ c_i c_j}{d_{ij}}, \quad (2.3)$$

où d_{ij} est la plus petite distance sur la surface du tore entre les sites i et j et U est l'inten-

sité de l'interaction. Sous cette forme l'interaction est à longue portée. Il est également possible de limiter la portée de l'interaction aux sites proches voisins (voir également la référence [44] dans laquelle l'interaction à longue portée est modifiée).

L'Hamiltonien H modélise donc de la façon la plus simple possible un système bi-dimensionnel désordonné dans lequel les électrons interagissent. Il peut être considéré comme l'expression de l'Hamiltonien (1.29) dans un espace discrétisé. Bien sûr, pour être réaliste il faudrait prendre en compte beaucoup de caractéristiques supplémentaires (à commencer par le spin), mais en tant que modèle il permet déjà d'étudier qualitativement la physique des systèmes avec désordre et interaction.

Dans le Chapitre 3, nous étudions la statistique spectrale multi-particule du système décrit par l'Hamiltonien H et montrons que la combinaison du désordre et de l'interaction peut mener à des phénomènes de délocalisation alors que, pris séparément, désordre et interaction ont tous deux tendance à localiser les électrons.

2.1.2 Courte revue

Diverses études des effets combinés du désordre et de l'interaction se sont intéressés à des Hamiltoniens similaires à (2.1), à une ou deux dimensions, avec ou sans prise en compte du degré de liberté de spin.

Dans un modèle unidimensionnel prenant en compte le spin (modèle de Hubbard, voir section 6.1), des calculs analytiques prenant les interactions en compte de façon exacte via la bosonisation [45] ont montré que l'amplitude du courant permanent est augmenté par les interactions, dans le régime diffusif (le désordre est traité avec le groupe de renormalisation). La prise en compte du degré de liberté du spin semble cruciale pour ce résultat. Des études numériques exactes du même modèle à une [46] et deux [47] dimensions ont confirmé l'augmentation du courant permanent par les interactions. Un calcul analytique montre même qu'en régime de forte interaction le désordre peut avoir un effet délocalisant [46].

Le comportement métallique observé expérimentalement dans les gaz d'électrons bi-dimensionnels a également été investigué dans le cadre du modèle de Hubbard. En évaluant la formule de Kubo à l'aide d'une technique Monte-Carlo quantique pour de petits systèmes bidimensionnels (de 8 par 8 sites), il a été montré [48] que la prise en compte de l'interaction changeait le comportement de la conductivité en fonction de la température d'un comportement isolant à un comportement métallique. Malgré la sérieuse

limitation en taille (ainsi que le caractère approximatif de la méthode Monte-Carlo), cela semble montrer qu'une des causes possibles pour le comportement métallique observé expérimentalement peut être la combinaison des effets du désordre et de l'interaction.

Diverses études numériques (quasi-)exactes pour des systèmes unidimensionnels [49] et bidimensionnels [18] ont montré que l'interaction pouvait également avoir un effet délocalisant pour des électrons polarisés en spin (ou fermions sans spin), à condition que le désordre soit suffisamment fort. La compétition entre désordre et interaction induit en effet des réorganisations de charge [50] qui impliquent une délocalisation des électrons et donc une forte augmentation du courant permanent.

Des conclusions similaires ont été obtenues concernant la conductance. Des calculs numériques utilisant une méthode post-Hartree-Fock permettent d'évaluer la formule de Kubo [51] pour un système de fermions sans spin semblable à celui décrit par l'Hamiltonien (2.1). Alors que dans le régime diffusif, l'introduction des interactions ne fait que diminuer la conductance, une augmentation est trouvée dans le régime de fort désordre.

Enfin, une étude détaillée du fondamental d'un système bidimensionnel de fermions sans spin éventuellement désordonné [52, 53] montre l'existence d'une phase hybride entre l'isolant d'Anderson (lorsque le désordre domine) et le cristal de Wigner (lorsque c'est l'interaction qui domine) à deux dimensions initialement proposée dans la référence [18].

Ainsi, malgré l'accumulation de résultats obtenus à l'aide d'approximations diverses pour différents modèles, une compréhension complète des effets combinés du désordre et de l'interaction semble loin d'être atteinte. Les questions soulevées par l'expérience (et discutées dans le Chapitre 1) restent donc encore ouvertes.

Bien que le comportement diffère selon que l'on prend le degré de liberté de spin en compte ou non, les études que l'on vient de mentionner montrent qu'un comportement très riche est observé dans les deux cas. Cela montre l'intérêt d'étudier des systèmes de fermions sans spin.

Une voie possible pour augmenter la compréhension des phénomènes ayant lieu dans ces systèmes est de se limiter à des tailles suffisamment petites pour pouvoir traiter numériquement l'Hamiltonien (2.1) sans approximation. C'est ce que nous faisons dans le Chapitre 3, où nous étudions numériquement la statistique des niveaux.

2.1.3 La statistique spectrale

En l'absence d'interaction, la distribution des écarts entre niveaux à une particule a été étudiée et a été trouvée être un bon indicateur du caractère isolant ou métallique d'un système. En particulier, la statistique spectrale permet d'étudier la transition métal-isolant d'Anderson [54, 55].

On note Δ l'écart énergétique entre deux niveaux à une particule au niveau de Fermi. Du fait du caractère aléatoire du potentiel de désordre, cet écart dépend de l'échantillon considéré. Une étude statistique est donc toute indiquée. On note $P(s)$ la distribution des écarts normalisés $s = \Delta / \langle \Delta \rangle$ entre niveaux à une particule, où $\langle \dots \rangle$ dénote la moyenne d'ensemble sur toutes les configurations du désordre.

Pour les systèmes désordonnés, la forme de la distribution $P(s)$ dépend de l'intensité du désordre. En l'absence de désordre (billard balistique), $P(s)$ est universelle si le système est classiquement chaotique. Pour les systèmes intégrables (comme notre système de forme carrée), ce n'est pas le cas.

Dans le régime diffusif ($\ell \ll L \ll \xi$), la statistique des niveaux peut être déterminée par la Théorie de Matrices Aléatoires [56] (RMT, pour *Random Matrix Theory*). Dans la RMT, on suppose que l'Hamiltonien décrivant un système complexe est si compliqué que la seule information réellement pertinente pour la statistique des niveaux est la liste des symétries qu'il vérifie. Cette universalité permet à la RMT de traiter une grande variété de problèmes, comme par exemple le spectre des noyaux lourds, des billards quantiques et des systèmes désordonnés dans le régime diffusif. Concrètement, l'Hamiltonien est supposé avoir la même statistique qu'une matrice aléatoire ayant les mêmes symétries.

Dans notre cas, l'Hamiltonien (2.2) respecte la symétrie par renversement du temps ainsi que la symétrie par rotation de l'espace (isotropie).

Nous commençons par une matrice aléatoire \mathcal{A} de taille 2×2

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} a_1 & a_3 \\ a_3 & a_2 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Par commodité, on suppose que les éléments a_i suivent une distribution gaussienne. \mathcal{A} doit être hermitique et de plus la symétrie par renversement du temps vérifiée par notre système implique que les éléments de \mathcal{A} sont réels, d'où l'égalité des deux éléments hors-diagonaux. La symétrie de l'ensemble des matrices \mathcal{A} par rotation de l'espace, quant à

elle, s'écrit :

$$\langle \mathcal{A}'_{ij}{}^2 \rangle = \langle \mathcal{A}_{ij}{}^2 \rangle \quad (2.5)$$

avec

$$\mathcal{A}'_{ij} = \sum_{kl} \mathcal{O}_{ik} \mathcal{A}_{kl} \mathcal{O}_{lj}^{-1} \quad (2.6)$$

où \mathcal{O} est une matrice orthogonale. Cette symétrie impose une relation entre la largeur $\Omega_{1,2}$ de la distribution des éléments diagonaux a_1 et a_2 et celle Ω_3 de l'élément non-diagonal a_3 : $\Omega_{1,2}^2 = 2\Omega_3^2$. Par la suite, on pose $\Omega = \Omega_3$.

On a donc les distributions :

$$P(a_{1,2}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Omega} \exp\left(\frac{-a_{1,2}^2}{2\Omega^2}\right) \quad (2.7)$$

$$P'(a_3) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Omega} \exp\left(\frac{-a_3^2}{\Omega^2}\right) \quad (2.8)$$

où Ω peut-être choisi librement.

On peut maintenant calculer les valeurs propres de \mathcal{A} , puis leur écart :

$$s = \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4a_3^2} \quad (2.9)$$

dont on peut déterminer la distribution :

$$P(s) = \iiint da_1 da_2 da_3 P(a_1)P(a_2)P'(a_3) \delta\left(s - \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4a_3^2}\right). \quad (2.10)$$

Après avoir exprimé s en unité de sa moyenne (ce qui fait disparaître Ω), on obtient la statistique de Wigner-Dyson :

$$P_W(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \quad (2.11)$$

C'est alors que la théorie des matrices aléatoires se montre surprenante : la statistique de Wigner-Dyson, obtenue avec une simple matrice aléatoire 2×2 correspond presque parfaitement [56, pages 15 à 18] à la distribution des écarts de niveaux pour des matrices aléatoires beaucoup plus grandes.

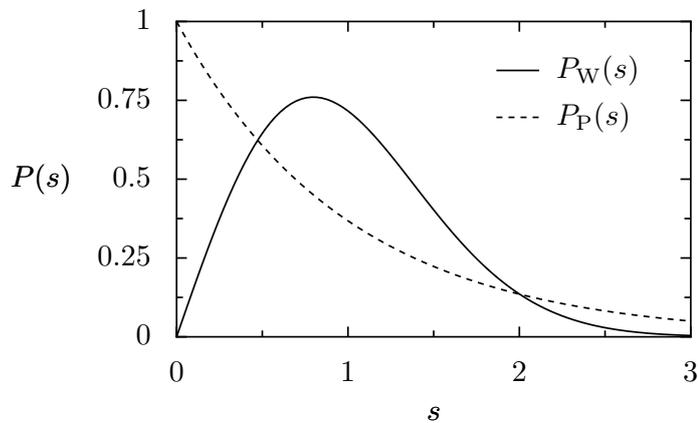


FIG. 2.1: Distributions des écarts entre niveaux à une particule dans la limite thermodynamique dans le cas d'un système diffusif ($P_W(s)$, Wigner-Dyson) et d'un système localisé ($P_P(s)$, Poisson).

Cette distribution, dont on peut voir le tracé sur la Figure 2.1, se retrouve dans les systèmes désordonnés dans le régime diffusif ainsi que dans des systèmes classiquement chaotiques. Elle doit son nom à Wigner qui étudiait le spectre de noyaux lourds et qui fit cette hypothèse (*the Wigner surmise*) pour la première fois.

On remarque que, dans le régime diffusif, la probabilité d'avoir un écart nul est nulle. Cela montre que les niveaux sont corrélés. On parle de répulsion des niveaux. Cela se comprend par le fait que, dans ce régime, les fonctions d'onde sont délocalisées. Or, dans le cas où tous les électrons « voient » le même paysage, les dégénérescences entre les états à une particule sont dues à des symétries. Comme le désordre brise toutes les symétries, il lève également toutes les dégénérescences.

Cela n'est pas le cas dans le régime localisé. Dans ce régime, les électrons sont piégés dans des parties *a priori* différentes du nano-système, et leurs énergies sont donc décorréelées. L'indépendance des niveaux d'énergies mène à la distribution de Poisson (voir Figure 2.1) :

$$P_P(s) = \exp(-s) \quad (2.12)$$

Il faut néanmoins qu'il y ait suffisamment de niveaux en jeu pour obtenir Poisson. En effet, si l'on ne prend en compte que deux nombres aléatoires (tirés uniformément), la statistique de leur écart est triangulaire. À partir d'une cinquantaine de nombres cependant, le tri permet une belle statistique poissonnienne.

Ainsi, l'étude de la distribution $P(s)$ permet-elle de caractériser la localisation des fonctions d'ondes, et donc la mobilité des électrons (en l'absence d'interaction). Bien qu'il s'agisse d'une propriété thermodynamique (c'est-à-dire à l'équilibre), la statistique spectrale donne ainsi, bien qu'indirectement, des informations sur les propriétés de transport (notamment la distinction entre métal et isolant) d'un système à une particule.

En revoyant son interprétation en terme de mobilité, il est également possible d'avoir recours à la statistique spectrale multi-particules pour étudier les systèmes avec interaction [57]. Dans le Chapitre 3, nous utilisons la statistique des niveaux multi-particules pour étudier en détail les effets combinés du désordre et de l'interaction dans de petits systèmes bidimensionnels décrits par l'Hamiltonien (2.1).

2.2 Déterminer la conductance

On a vu dans la section précédente que les propriétés thermodynamiques donnent déjà des indications précieuses sur les propriétés du transport, en permettant notamment de faire la distinction entre comportement métallique et isolant. Ces indications ne sont cependant qu'indirectes, et il reste particulièrement intéressant de pouvoir étudier directement la conductance d'un nano-système.

Le calcul de la conductance représente cependant un problème beaucoup plus difficile à résoudre, puisqu'il ne s'agit pas d'une propriété thermodynamique (c'est-à-dire à l'équilibre). On ne peut donc *a priori* pas l'obtenir à partir de l'étude de systèmes fermés, et le traitement de systèmes ouverts n'est pas aisé numériquement.

Dans cette section, nous introduisons un modèle qui permet d'étudier le transport à travers un nano-système relié à des réservoirs par des fils unidimensionnels. Nous nous intéressons ensuite brièvement aux différentes méthodes standards pour déterminer sa conductance avant de présenter celle que nous allons utiliser dans cette thèse : la méthode de la boucle.

2.2.1 Modèle d'un nano-système connecté à des fils unidimensionnels

Comme dans la section 2.1.1, on considère un modèle sur réseau, mais cette fois à une dimension.

Le nano-système, dont on écrira l'Hamiltonien $H_S = H_K + H_U$, consiste en une chaîne unidimensionnelle de L_S sites décrite par¹ :

$$H_K = -t_h \sum_{i=1}^{L_S-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.) \quad (2.13)$$

sur lesquelles des fermions sans spin² subissent une interaction entre proches voisins d'intensité U :

$$H_U = U \sum_{i=1}^{L_S-1} (\hat{n}_i - 1/2)(\hat{n}_{i+1} - 1/2) \quad (2.14)$$

où $\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i$. Tel qu'il est écrit, H_U inclut un potentiel de compensation (dû aux 1/2) qui assure la symétrie particule-trou dans le nano-système. Cela est souhaitable d'autant plus que l'on compte travailler à demi-remplissage dans les fils. Le potentiel de compensation peut être vu comme un arrière-plan d'ions positifs dont la présence évite que les électrons, à cause de l'interaction, ne désertent le nano-système.

Pour pouvoir calculer la conductance de ce nano-système, il faut décrire comment ce dernier est connecté aux réservoirs. On ajoute donc deux fils semi-infinis, de part et d'autre du nano-système, décrits

$$\text{à gauche (left) par } H_L = -t_h \sum_{i=-\infty}^{-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.) \quad (2.15)$$

$$\text{et à droite (right) par } H_R = -t_h \sum_{i=L_S+1}^{\infty} (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.). \quad (2.16)$$

Le fait qu'ils soient semi-infinis et totalement dépourvus d'interaction leur confère automatiquement leur rôle de réservoir : une particule quittant le nano-système ne risque pas d'y revenir de façon cohérente [58].

Enfin on décrit par

$$H_C = -t_L(c_0^\dagger c_1 + h.c.) - t_R(c_{L_S}^\dagger c_{L_S+1} + h.c.) \quad (2.17)$$

le couplage entre les fils et le nano-système. Dans le cadre de cette thèse, nous nous

¹L'indice K signifie *kinetic*, l'anglais pour cinétique.

²À nouveau, on peut interpréter les fermions sans spin comme étant des électrons polarisés par un fort champ magnétique. La généralisation du modèle avec spin est faite au Chapitre 6.

placerons toujours dans le cas où le nano-système est connecté aux fils par des contacts parfaits, c'est-à-dire $t_L = t_R = t_h$. Il est donc possible de regrouper tous les termes de *hopping* : H_C , H_L , H_R , et H_K en un seul terme. D'autre part, on fixe $t_h = 1$ pour se servir implicitement de t_h comme d'unité d'énergie.

Dans le but d'étudier le blocage de Coulomb, on ajoute enfin le potentiel d'une tension de grille V_g sur le nano-système, afin d'y attirer des électrons supplémentaires :

$$H_G = -V_g \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_i. \quad (2.18)$$

On choisit de se placer au demi-remplissage dans les fils. En l'absence de tension de grille, $V_g = 0$, le potentiel de compensation de l'interaction inclu dans (2.14) assure l'homogénéité du système global. Comme nous nous intéressons principalement à l'étude du blocage de Coulomb, nous reportons à une étude ultérieure l'effet du désordre.

Ainsi l'Hamiltonien

$$H = H_S + H_G + H_L + H_R + H_C \quad (2.19)$$

permet-il d'étudier le transport à travers une chaîne unidimensionnelle en interaction.

Le cas d'électrons en interaction à une dimension est très spécial, en ce sens que les électrons ne peuvent pas se contourner les uns les autres comme c'est le cas à deux ou trois dimensions. Cette spécificité rend aussi le problème plus aisé à résoudre. En particulier, à condition de supposer une relation de dispersion linéaire, les interactions peuvent être traitées analytiquement de façon exacte grâce à la technique de bosonisation. Cela correspond au formalisme des liquides de Luttinger [59].

Hormis les effets de discrétisation de l'espace (effets de réseau), le comportement de notre modèle (Hamiltonien (2.19)) peut être décrit par un liquide de Luttinger pour une interaction pas trop forte ($U \ll 1$). Pour $U > 1$, cependant, les énergies mises en jeu sont assez grandes pour que la relation de dispersion ne puisse plus être considérée linéaire. En ce sens notre approche numérique nous permet d'aller plus loin en intensité de l'interaction.

2.2.2 Méthodes standards pour étudier le transport quantique

Formule de Kubo

La formule de Kubo permet d'exprimer la conductance en réponse linéaire d'un système quelconque, y compris en présence d'interactions électron-électron.

Nous introduisons d'abord la théorie de la réponse linéaire [60]. Soit un système décrit par l'Hamiltonien H_0 que l'on perturbe avec un champ extérieur représenté par l'Hamiltonien H^{ex} . Le changement de la valeur moyenne d'une observable O sous l'effet de la perturbation peut être évalué au premier ordre de la perturbation :

$$\delta\langle\Psi_0|O|\Psi_0\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle\Psi_0|[O_{H_0}, H_{H_0}^{\text{ex}}]|\Psi_0\rangle \quad (2.20)$$

où $|\Psi_0\rangle$ est le fondamental du système non-perturbé et où l'indice H_0 signifie que les opérateurs sont écrits dans la représentation d'interaction par rapport à H_0 .

Le cas qui nous intéresse est celui où O est l'opérateur densité de courant électrique et où la perturbation est celle causée par un champ électrique. Pour que l'effet du champ électrique puisse bel et bien être considéré comme une perturbation, ce dernier ne peut pas être stationnaire (sinon une quantité infinie de charge est accumulée d'un côté du système). En pratique, on étudie le cas où le champ électrique est alternatif avec une fréquence ω . Dans ce cas, on obtient :

$$\langle\Psi_0|J(\vec{r}, t)|\Psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int dr' \theta(t-t') \frac{1}{\hbar\omega} \langle\Psi_0|[J_{H_0}(\vec{r}', t'), J_{H_0}(\vec{r}, t)]|\Psi_0\rangle E(\vec{r}', t') \quad (2.21)$$

où la fonction $\theta(t)$, nulle pour $t < 0$ et égale à un sinon, est là pour assurer la causalité. On peut donc poser la conductivité non-locale $\sigma(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ telle que :

$$\langle J(\vec{r}, t) \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int dr' \sigma(\vec{r}, t; \vec{r}', t') E(\vec{r}', t'). \quad (2.22)$$

On obtient ainsi ce que l'on appelle la formule de Kubo :

$$\sigma(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \theta(t-t') \frac{1}{\hbar\omega} \langle\Psi_0|[J_{H_0}(\vec{r}', t'), J_{H_0}(\vec{r}, t)]|\Psi_0\rangle. \quad (2.23)$$

L'avantage de la contribution en réponse linéaire est que la réponse à la perturbation

s'exprime en fonction des propriétés du système sans perturbation. Cela peut être lié au théorème fluctuation-dissipation (voir [61]).

L'évaluation de la formule de Kubo peut s'avérer difficile, étant donné qu'elle implique d'avoir toute l'information sur le système non-perturbé : l'écriture du corrélateur courant-courant dans la représentation d'interaction requiert en effet de connaître tous les états propres du système. Dans le cas où les interactions électron-électron sont présentes, c'est tout le problème à N corps qu'il faut résoudre. Hormis des cas particulièrement simples (comme un liquide de Luttinger par exemple), il est la plupart du temps nécessaire d'évaluer la formule numériquement en ayant recours à diverses approximations (mentionnons les techniques Monte-Carlo, souvent utilisées).

Une méthode consiste notamment à utiliser les fonctions d'onde DFT (voir section 1.3.2) pour évaluer la formule de Kubo. Bien que cette méthode semble donner des résultats corrects pour certains matériaux, il est à rappeler que les fonctions d'onde DFT, sans compter le fait qu'elles correspondent à une image à une particule, n'ont pas d'interprétation physique établie, contrairement à l'énergie ou à la densité électronique que l'on peut calculer avec. Pour des systèmes fortement corrélés, on s'attend donc à ce que les résultats DFT ne soient pas suffisamment fiables.

Le formalisme de Landauer

Une approche alternative à l'évaluation de la formule de Kubo consiste à déterminer une formule pour le courant électrique dans une situation définie. Cette approche [62], due à Landauer, est basée sur la notion de canaux de conductance.

Dans le problème d'un fil cohérent et homogène de longueur infinie, en l'absence d'interactions, on peut séparer l'équation de Schrödinger en une partie longitudinale et une partie transversale. Du fait du confinement, la partie transversale mène à des niveaux discrets que l'on appelle des canaux de conductance. Cela correspond à ce que l'on appelle des modes de propagation en électromagnétisme.

L'énergie de Fermi détermine le nombre de canaux ouverts (c'est-à-dire le nombre de modes peuplés). Si l'on réduit la dimension transversale du fil, l'écart énergétique entre les canaux augmente et le nombre de canaux ouverts diminue. La limite unidimensionnelle est atteinte lorsqu'un seul canal est ouvert (sinon on parle de quasi-1d).

Pour mesurer la conductance d'un nano-système, on connecte en général ce dernier

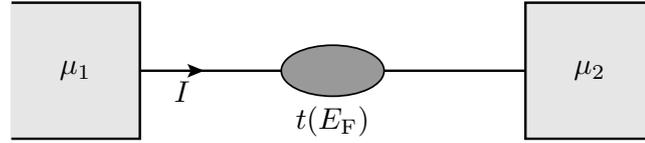


FIG. 2.2: Vue schématique de la situation considérée dans le formalisme de Landauer : un nano-système, dont l'amplitude de transmission $t(E_F)$ est la seule caractéristique importante pour la conductance, est relié à deux réservoirs de potentiels chimiques μ_1 et μ_2 par des fils idéaux. Une différence de potentiel $\mu_1 - \mu_2$ induit un courant I .

à deux réservoirs par des fils (voir Figure 2.2). Dans le formalisme de Landauer cette situation est idéalisée : les fils sont des conducteurs idéaux, avec un certain nombre de canaux ouverts et les contacts entre les fils et les réservoirs sont supposés sans réflexion. Cela signifie que tout électron se dirigeant vers un réservoir entrera automatiquement dans celui-ci. Le réservoir est supposé suffisamment grand pour être à l'équilibre thermodynamique.

Cette façon de modéliser les choses permet de bien séparer conceptuellement deux aspects du dispositif de mesure de la conductance : d'une part la connexion avec le nano-système, qui doit être faite de façon cohérente (à une échelle mésoscopique donc) et d'autre part la notion de connexion à un réservoir qui par définition est à l'équilibre thermodynamique, donc macroscopique et incohérent. Les contacts sans réflexion entre les fils et les réservoirs assurent qu'aucun électron venant du nano-système ne peut y revenir de façon cohérente.

Pour continuer, plaçons-nous dans le cas simple où les deux fils sont purement unidimensionnels (c'est-à-dire qu'un seul canal est ouvert).

Le nano-système étant traité de façon complètement cohérente, on peut décrire son effet sur le transport par l'amplitude de transmission $t(E)$ avec laquelle un électron d'énergie E venant d'un fil est transmis à l'autre fil. Le courant du réservoir 1 vers le réservoir 2 est donné par la charge e multipliée par le nombre d'électrons allant dans cette direction dont seule la fraction $|t(E)|^2$ traverse le nano-système. On a donc :

$$I_{1 \rightarrow 2} = e \int |t(E)|^2 v(E) \rho(E) f_1(E) dE \quad (2.24)$$

où $v(E)$, $\rho(E)$ et $f_1(E)$ sont la vitesse d'un électron d'énergie E , la densité d'états à cette énergie et le peuplement de cet état (distribution de Fermi), respectivement. Si

on note $N(E)$ le nombre d'états d'énergie inférieure à E , alors $\rho(E) = dN/dE$. Comme d'autre part $v(E) = dE/\hbar dk$, on obtient :

$$I_{1 \rightarrow 2} = \frac{e}{\hbar} \int |t(E)|^2 \frac{dN}{dk} f_1(E) dE \quad (2.25)$$

où dN/dk est simplement le nombre d'états par vecteur d'onde par unité de volume et vaut donc $1/2\pi$. Si de plus on se place à température nulle, on obtient :

$$I_{1 \rightarrow 2} = \frac{e}{\hbar} |t(E_F)|^2 \mu_1, \quad (2.26)$$

où μ_1 est le potentiel chimique dans le réservoir 1.

On peut dériver la même formule pour le courant venant du réservoir 2 et allant dans le réservoir 1, si bien que le courant total est donné par :

$$I = \frac{e}{\hbar} |t(E_F)|^2 (\mu_1 - \mu_2). \quad (2.27)$$

On obtient alors la formule de Landauer à deux terminaux pour la conductance à température nulle :

$$G = \frac{eI}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{e^2}{\hbar} |t(E_F)|^2. \quad (2.28)$$

Ainsi, selon la formule de Landauer, la *conductance* d'un nano-système entre deux réservoirs s'obtient à partir de la *transmission* du nano-système entre deux fils idéaux. Cela fournit un point de vue puissant pour l'étude du transport dans les systèmes mésoscopiques [62].

La formule (2.28) se généralise bien entendu au cas où les fils ont plusieurs canaux ouverts [63, 64], ainsi qu'au cas où le nano-système est relié à plus de deux réservoirs [65].

Dans les cas simples, le calcul des coefficients de transmission se fait à l'aide de la théorie de la diffusion. Le formalisme des fonctions de Green permet de traiter les cas plus compliqués [66].

Le formalisme de Landauer ne permet *a priori* pas de prendre en compte les interactions, du moins pas au-delà du liquide de Fermi. En présence de fortes corrélations dans le nano-système, l'image à une particule sur laquelle s'appuie la dérivation de la formule

de Landauer (par exemple l'équation (2.24)) n'est plus applicable.

Divers travaux ont tenté de développer un formalisme similaire à celui de Landauer incluant les interactions. Parmi ces travaux, mentionnons l'approche de Meir et Wingreen [67] qui, à l'aide du formalisme des fonctions de Green hors-équilibre de Keldysh, ont dérivé une formule donnant le courant en régime stationnaire à travers une région en interaction couplée à deux fils multi-canaux. Cette formule a ensuite été généralisée aux phénomènes dépendant du temps [68, 69].

La difficulté inhérente à l'utilisation de la formule de Meir et Wingreen est qu'elle nécessite l'évaluation de fonctions de Green multi-particules prenant en compte le couplage avec des fils semi-infinis. Hormis quelques cas simples, l'obtention de ces fonctions de Green est hors de portée analytiquement. D'autre part, le fait d'avoir à prendre en compte des fils semi-infinis rend leur calcul numérique peu commode.

Enfin, avant de nous intéresser aux courants permanents, notons que l'étude de la conductance des nano-systèmes est un domaine très actif de la physique mésoscopique. En plus des techniques brièvement présentées ci-dessus, mentionnons la proposition récente d'autres cadres théoriques prometteurs, basés sur TDDFT [70] ou sur une technique de *mode-matching* pour des modèles sur réseaux [71].

2.2.3 Courant permanent et conductivité : le lien de Kohn

Hormis quelques cas simples, les propositions pour calculer la conductance en présence d'interactions, comme la formule de Meir et Wingreen [67] ou l'évaluation de la formule de Kubo, sont difficilement solvables analytiquement et ne sont pas vraiment adaptées à une étude numérique. En effet, elles impliquent l'utilisation de fonctions de Green multi-particules prenant en compte la présence de réservoirs de taille infinie, qu'il est difficile d'obtenir analytiquement sans utiliser des approximations plus ou moins importantes. De plus, numériquement, on ne peut que considérer des systèmes finis.

Par contraste, le courant permanent peut être calculé beaucoup plus aisément, même en présence d'interactions, puisqu'il s'agit d'une quantité thermodynamique, qui ne requiert que la connaissance de l'état fondamental d'un système fermé.

L'idée de relier conductivité et courant permanent a été proposée il y a relativement longtemps. Kohn [72], puis Thouless [73], ont montré que la conductivité est liée à la sensibilité des états propres du système au changement des conditions de bord. D'une

part, la conductivité en fréquence, dont on peut séparer les parties réelle et imaginaire :

$$\sigma(\omega) = \sigma'(\omega) + i\sigma''(\omega), \quad (2.29)$$

donne la réponse d'un système à un champ électrique uniforme sinusoïdal de fréquence ω . D'autre part, la sensibilité des états propres du système à un changement de bord pour un anneau de circonférence L peut être caractérisée par la courbure de Kohn (également appelée raideur de charge, voir discussion autour de l'équation (4.9))

$$\mathcal{C} = L \frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2}. \quad (2.30)$$

On remarque que la quantité \mathcal{C} peut également servir à caractériser l'amplitude des courants permanents (voir Annexe B).

Kohn a montré que dans un anneau traversé par un flux la courbure \mathcal{C} est reliée à la partie imaginaire de la conductivité :

$$\mathcal{C} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \sigma''(\omega). \quad (2.31)$$

En utilisant les relations Kramers-Kronig qui existent entre $\sigma'(\omega)$ et $\sigma''(\omega)$, on obtient :

$$\sigma'(\omega) = \pi \mathcal{C} \delta(\omega) + \sigma'_{\text{reg}}(\omega), \quad (2.32)$$

où \mathcal{C} donne le poids du pic de Drude à $\omega = 0$ et où $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$ désigne la partie régulière de $\sigma'(\omega)$.

Ainsi la courbure \mathcal{C} , parfois également appelée le poids de Drude, peut elle être utilisée pour caractériser la conductivité à fréquence nulle d'un système. Ces idées ont été appliquées aux systèmes en interaction, où le poids de Drude peut servir de paramètre d'ordre à la transition métal-isolant de Mott-Hubbard [74].

2.2.4 La méthode de la boucle pour la conductance

La conductivité considérée par Kohn, s'il s'agit bien d'un rapport entre un champ électrique effectif créé par l'oscillation (à la fréquence ω) du flux φ traversant l'anneau et la densité de courant dans l'anneau, ne peut cependant pas être reliée à la conductance

d'un système connecté à des réservoirs.³ Le lien entre cette conductance (qui implique une dissipation d'énergie) et le courant permanent (qui est une propriété d'équilibre) dans un anneau est donc plus complexe que celui proposé par Kohn.

À partir de la formule de Akkermans et Montambaux [76], qui relie la conductance à la réponse d'un système désordonné (en régime diffusif) à un changement de conditions de bord, la conductance peut être écrite [77] comme la dérivée du courant permanent par rapport au flux multipliée par la compressibilité (la dérivée du nombre de particules par rapport au potentiel chimique). Cela montre que le courant permanent, bien qu'il mesure la difficulté avec laquelle un électron traverse le système de bout en bout, ne peut pas suffire pour caractériser la conductance : il faut aussi donner une mesure de la difficulté que peut avoir un électron à entrer et sortir du système. De fait, compressibilité et courant permanent se comportent différemment en fonction de l'interaction. Une étude numérique (confirmée par une évaluation de la formule de Kubo) pour de petits systèmes [77] montre que si le courant permanent est augmenté par les interactions, la conductance est diminuée.

Si ce résultat se confirme pour des systèmes plus grands, cela peut expliquer le désaccord entre théorie et expérience en ce qui concerne l'amplitude des courants permanents (voir section 1.2.4). En effet, d'une part l'augmentation des courants permanents par l'interaction signifie que la formule (1.27) sous-estime le courant permanent, d'autre part la diminution de la conductance par l'interaction implique que le libre-parcours moyen obtenu à partir de mesures de conductance et de (1.3) et utilisé dans (1.27) est également sous-estimé. La combinaison de ces deux comportements pourrait donc expliquer le fait que les prédictions théoriques du courant permanent sont un à deux ordre(s) de grandeur plus petites que les mesures expérimentales.

L'approche de [77] est soumise à certaines restrictions, la plus importante étant que les interactions ne peuvent pas être prises en compte au delà du liquide de Fermi. La méthode de la boucle⁴ est une autre façon d'utiliser le courant permanent pour obtenir la conductance, qui ne souffre pas de limitations au niveau de l'intensité des interactions. En revanche, elle est à l'heure actuelle limitée à des systèmes reliés aux réservoirs par des fils unidimensionnels.

L'idée de base de la méthode est d'obtenir le module $|t(E_F)|$ de l'amplitude de trans-

³Il se peut même que le poids de Drude soit négatif [75], ce qui ne peut bien sûr pas être le cas de la conductance.

⁴Le nom original *the embedding method* [78] se traduit littéralement par « la méthode de l'encastrement. »

mission au niveau de Fermi E_F d'un nano-système à partir du courant permanent circulant dans un anneau obtenu en fermant le système sur lui-même par l'intermédiaire d'un long fil idéal. Dans la limite de taille infinie, en l'absence d'interaction, le courant permanent ne dépend en effet que de $|t(E_F)|$, le fil jouant le rôle d'un réservoir. La méthode est également valable si les électrons interagissent entre eux dans le nano-système (mais pas dans le fil). Dans ce cas, la limite de taille infinie rétablit le caractère liquide de Fermi du système global (voir Chapitre 4) et on parle d'amplitude de transmission *effective*. On obtient ensuite la conductance à l'aide de la formule de Landauer (2.28).

L'idée de boucler le système étudié à l'aide d'un long fil auxiliaire (voir Figure 4.2), plutôt que directement sur lui-même, a été utilisée pour la première fois par Favand et Mila [79] pour caractériser le *tunneling* à travers des molécules uniques. Bien que le lien avec la conductance n'a pas été souligné, ce travail contient déjà les prémisses de la méthode de la boucle.

Sushkov a ensuite utilisé cette méthode [80, 81] pour étudier l'anomalie à 0.7 dans l'ouverture du premier canal de conductance dans les contacts ponctuels réalisés dans les semiconducteurs. L'interaction est traitée dans l'approximation d'Hartree-Fock et est moins forte (mais pas nulle) dans le fil auxiliaire.

Il est devenu ensuite rapidement clair que le fil utilisé doit être entièrement dépourvu d'interaction [82]. Dans le cas contraire, les corrélations du liquide de Luttinger suppriment la conductance. En effet, il a été montré par Kane et Fisher [83] (en évaluant la formule de Kubo) qu'au sein d'un liquide de Luttinger infiniment long, la transmission à travers un diffuseur ne dépend pas de la hauteur de la barrière, mais uniquement du signe de l'interaction. Si l'interaction est répulsive, la transmission est nulle, même pour une petite barrière, alors qu'elle est parfaite dès que l'interaction est attractive. Sushkov n'a pas rencontré ce problème parce que l'approximation Hartree-Fock ne permet pas d'obtenir les corrélations Luttinger.

La méthode a été formalisée et discutée en détail dans les références [78, 84] (voir aussi le Chapitre 4). En supposant que le système global redevient un liquide de Fermi dans la limite d'un fil très long, la validité de la méthode en présence d'interactions dans le nano-système a été démontrée analytiquement [84]. Dans la référence [78], le fait que le comportement liquide de Fermi est rétabli par un fil infini a été démontré numériquement.

La conductance de chaînes unidimensionnelles en interaction a pu être étudiée grâce à cette méthode [82, 85]. Des oscillations de la conductance en fonction de la parité du

nombre de sites constituant la chaîne en interaction ont été trouvées : pour un nombre de sites impair, la conductance vaut toujours le quantum de conductance e^2/h , alors qu'elle décroît avec U si le nombre de sites est pair. Ces résultats peuvent expliquer l'origine (voir aussi [86]) d'oscillations de parité observées expérimentalement dans les chaînes monoatomiques [87, 88].

Le rôle des contacts entre le nano-système et les fils a en particulier été étudié [82]. Ce n'est que dans la limite de contacts adiabatiques (avec un branchement progressif de l'interaction) que l'on retrouve le résultat [89, 90] selon lequel la conductance d'un liquide de Luttinger relié à des fils par des contacts sans réflexion vaut le quantum de conductance e^2/h .

La méthode a été utilisée pour étudier la conductance d'un anneau Aharonov-Bohm en interaction [91]. Les résultats (notamment l'observation d'une résonance Kondo-Fano) ont été confirmés par ceux d'une approche basée sur le groupe de renormalisation (NRG pour *Numerical Renormalization Group*).

Enfin, la taille sur laquelle le comportement de type liquide de Fermi est rétablie dans les fils a été récemment explorée en utilisant la méthode de la boucle pour deux nano-systèmes identiques en série [92].

Des travaux similaires mais non basés sur la méthode de la boucle ont été également proposés. La caractéristique courant-tension de chaînes de Hubbard couplées à des fils métalliques a été obtenue [93] dans le cadre du formalisme de Keldysh à partir de calculs numériques dans lesquels le système et une petite partie des fils est diagonalisé exactement. Les résultats obtenus, et notamment l'absence de dépendance de la conductance à la longueur de la chaîne, ne sont cependant pas en accord avec des arguments théoriques [94]. Selon ces arguments on devrait avoir une oscillations pair-impair tout comme dans les systèmes sans spin.

Dans le Chapitre 4 nous présentons en détail la méthode de la boucle. Nous avons été amené à bien comprendre le comportement de la méthode en présence de résonances. Cela nous a permis de pouvoir utiliser la méthode pour étudier la conductance de chaînes unidimensionnelles en interaction soumises à une tension de grille (Chapitre 5). Nous discutons la généralisation de la méthode aux systèmes avec spin dans le Chapitre 6.

2.3 Blocage de Coulomb faible

Afin de pouvoir bien placer dans le contexte les résultats que nous présentons dans le Chapitre 5, nous terminons le présent Chapitre par une revue de l'étude des boîtes de quantiques dites ouvertes (*open quantum dot*, en anglais).

Comme on l'a vu dans le Chapitre 1, le blocage de Coulomb se manifeste traditionnellement dans des boîtes quantiques couplées aux électrodes par des barrières tunnel. Un électron qui tunnelle dans la boîte quantique augmente la charge de la boîte de e , ce qui augmente l'énergie nécessaire pour ajouter une nouvelle particule de la quantité $E_C = e^2/C$. Pour des systèmes suffisamment petits, à basse température, l'énergie de charge E_C peut être plus grande que l'énergie thermique $k_B T$. Dans ce régime, à moins d'amener la boîte quantique à un point de dégénérescence en modifiant son potentiel chimique à l'aide d'une tension de grille, la conductance à travers la boîte est fortement réduite. Ce blocage dit de Coulomb a traditionnellement été observé avec des barrières tunnel de conductance G_B bien plus petite que le quantum de conductance $G_0 = e^2/h$. On appelle régime de blocage de Coulomb fort ($G_B \ll G_0$) cette situation.

Un argument simple [95] permet de dire que dans le cas où un grand nombre de canaux de la barrière est ouvert ($G_B \gg G_0$) le blocage de Coulomb disparaît. Il est même possible de définir un régime de blocage de Coulomb faible (*weak Coulomb blockade*) correspondant à $G_B \sim G_0$. En effet, on peut obtenir le temps τ caractéristique sur lequel la boîte quantique se décharge en considérant ce dernier comme un circuit- RC , soit $\tau = RC$. La résistance est simplement $R = 1/G_B$ et la capacité C s'obtient par l'énergie de charge $E_C = e^2/2C$. Selon la relation d'incertitude d'Heisenberg, l'indétermination de l'énergie est $\gtrsim \hbar/\tau$. Pour que le blocage soit effectif, E_C doit être plus grande que cette indétermination $E_C \gtrsim \hbar/\tau$, ce qui mène à $G_B \lesssim e^2/2\hbar$.

Si cette valeur est universelle, le comportement précis du système dépend de comment cette conductance est obtenue. Dans le cas d'un îlot métallique couplé aux réservoirs par des barrières tunnel, G_B peut être de l'ordre de G_0 grâce à un grand nombre de canaux faiblement transparents ; alors que dans des boîtes quantiques réalisées dans des semiconducteurs, où la boîte est reliée aux réservoirs par des contacts ponctuels, une conductance des accès G_B de l'ordre de G_0 est obtenue en augmentant la transparence d'un seul ou de quelques canaux. Il est aussi possible d'envisager le cas général où la barrière, qui peut alors être un simple conducteur diffusif, est simplement représentée par un certain nombre de canaux de transmission quelconque.

Dans cette section, on s'intéresse aux diverses études du régime de blocage de Coulomb faible qui ont été réalisées, prenant en compte ou non les fluctuations mésoscopiques (que l'on peut traduire schématiquement par un espacement moyen δ non-nul entre niveaux à une particule dans la boîte) ou la cohérence quantique.

2.3.1 Premiers cas étudiés

Régime d'effet Hall quantique

Historiquement, c'est dans le régime de l'effet Hall quantique que les effets de charge finie dans les boîtes dites « ouvertes, » c'est-à-dire pour lesquelles G_B n'est pas beaucoup plus petite que G_0 , ont d'abord été étudiés [96, 97]. Dans ce régime de champ magnétique intense, le courant est porté par des états de bord qui circulent sur le périmètre de la boîte quantique. Les états de bords appartenant au même niveau de Landau forment ce que l'on appelle un « canal de bord. »

Selon leur taille, les constriction séparant la boîte quantique des réservoirs laissent passer un certain nombre N_{trans} de canaux de bord. Lorsque $N_{\text{trans}} = 0$, on a la situation de blocage de Coulomb classique. Il a été trouvé cependant, théoriquement [97] et expérimentalement [96], que pour $N_{\text{trans}} \geq 1$ des oscillations de conductance persistent, qui ne peuvent pas être expliquées sans faire intervenir des effets de charge finie. Un effet tunnel des électrons à travers des états de bord localisés (qui ne s'étendent donc pas dans les réservoirs) peut être impliqué [96].

La conductance d'une boîte quantique a été calculée [98], toujours dans le régime de l'effet Hall quantique, mais avec une géométrie dans laquelle seule la conductance d'une des deux barrières est variée de presque zéro à G_0 , l'autre barrière restant dans le régime tunnel. La cohérence quantique est prise en compte. Selon ces résultats, des caractéristiques du blocage de Coulomb sont réduites mais ne disparaissent pas, même à transmission parfaite.

Dans les semiconducteurs : contacts ponctuels

En tirant parti du caractère unidimensionnel d'un contact point, diverses quantités ont été étudiées (comme la conductance, la charge et la capacité) pour une boîte quantique connectée par un [99] ou deux [100, 101, 102] (supposés indépendants) contact(s)

point(s) à un (des) réservoir(s). L'approche est essentiellement de partir d'un unique canal parfaitement ouvert, de traiter les interactions de façon exacte grâce à la bosonisation (d'où le côté unidimensionnel) et de traiter une petite réflexion ($G_B \lesssim G_0$) en perturbation. L'espacement moyen δ entre niveaux est pris à zéro. Les résultats obtenus semblent montrer que les effets de charge finie, encore présents lorsque les contacts introduisent une petite réflexion, disparaissent complètement lorsque la transmission du canal devient parfaite.

Ces approches ne tiennent pas compte de la cohérence quantique. En particulier, l'effet des électrons qui traversent la boîte quantique de façon cohérente ou bien qui sont rétro-diffusés à l'intérieur de la boîte, n'est pas considéré.

Dans des travaux ultérieurs [103, 104, 105] (et la revue [95]), les fluctuations mésoscopiques de boîtes quantiques (donc avec $\delta \neq 0$) couplées aux réservoirs (2DEGs) par des contacts ponctuels ont été étudiées en prenant en compte la cohérence. Ils considèrent une boîte faiblement désordonnée, dans le régime ergodique, qu'ils traitent par la théorie des matrices aléatoires (RMT pour *Random Matrix Theory*). Une interaction modérée $r_s \lesssim 1$ est introduite à travers le modèle d'énergie de charge constante (qui ignore les corrélations). Cela modélise une boîte quantique faiblement désordonnée (dans le régime diffusif) et avec une densité électronique suffisamment grande pour avoir un bon écrantage. Du fait des fluctuations mésoscopiques, tout effet de charge finie ne disparaît pas à transmission parfaite. Mais ces effets sont plus clairement visibles sur les fluctuations de la conductance que sur la conductance elle-même.

Dans les boîtes quantiques métalliques : barrières tunnel

Les systèmes métalliques ont également été très étudiés. Sans entrer dans les détails, mentionnons que des études de barrières tunnel seules [106, 107, 108, 109] ont montré qu'une barrière tunnel de conductance G_B montre du blocage de Coulomb en-dessous d'une température proportionnelle à $\exp(-G_B/2G_0)$.

Cela signifie donc que les effets de charge finie sont exponentiellement supprimés avec G_B , mais subsistent pour $G_B \geq G_0$. Cette conclusion contraste avec celles des études des semiconducteurs.

2.3.2 Cas général

Dans le cas général, on peut décrire les accès comme un ensemble de canaux plus ou moins transparents. Ce cas peut correspondre au cas des semiconducteurs (pour lequel on a N canaux avec une transmission parfaite et un canal avec une transmission variant entre zéro et un), à celui des barrières tunnel (pour lequel on a un grand nombre de canaux qui ont tous une transmission relativement proche de zéro), et même à celui d'un conducteur diffusif (fortement désordonné).

Nazarov [34] a montré, en calculant l'action effective décrivant un diffuseur quelconque, une relation de proportionnalité pour l'énergie de charge effective \tilde{E}_C (qui, par opposition à E_C , prend en compte le fait que la boîte quantique n'est pas isolée des réservoirs) :

$$\frac{\tilde{E}_C}{E_C} \propto \prod_n R_n^{1/2} \quad (2.33)$$

où R_n est le coefficient de réflexion du n -ième canal. Dans le cas d'un grand nombre de canaux faiblement transparents, l'énergie de charge est donc réduite exponentiellement :

$$\frac{\tilde{E}_C}{E_C} \propto \exp\left(\frac{-\pi G_B}{8G_0}\right). \quad (2.34)$$

La formule (2.33) permet aussi de conclure que si ne serait-ce qu'un canal est parfaitement transparent, alors l'énergie de charge s'annule. Cela résume et unifie ainsi les résultats mentionnés plus haut. On note que l'étude ne prend pas en compte la cohérence, ni les fluctuations mésoscopiques ($\delta = 0$).

Une des conclusions du travail de Nazarov est que la quantification de la charge peut subsister dans des boîtes quantiques connectées aux réservoirs par des conducteurs arbitraires, comme des fils métalliques désordonnés en lieu et place des barrières tunnel, pour peu que les accès aient toujours une conductance G_B petite devant G_0 . Cela a été observé expérimentalement [110] et pourrait être à l'origine du blocage de Coulomb observé dans les références [32, 33].

2.3.3 Hors-équilibre

Toujours sans tenir compte de la cohérence, le travail de Nazarov a été étendu au cas hors-équilibre avec une étude de l'effet de l'interaction Coulombienne sur la caractéristique courant-tension d'un diffuseur [111]. En ce qui concerne la réponse linéaire, à basse température, la conductance est supprimée par le facteur :

$$\beta = \frac{\sum_n T_n(1 - T_n)}{\sum_n T_n} \quad (2.35)$$

où T_n est la transmission du n -ième canal. Contrairement à \tilde{E}_C , β ne s'annule pas si un canal est complètement ouvert, mais seulement si *tous* les canaux sont complètement ouverts.

Des expériences relativement récentes, comme la construction de pompes quantiques [112] ou bien des mesures de la distribution hors-équilibre des électrons [113] motivent la construction de cadres théoriques de plus en plus poussés, prenant en compte à la fois les effets de diffusion cohérente dans la boîte quantique, de quantification de la charge et des interactions électron-électron pour des boîtes quantiques soumises à des potentiels dépendant du temps.

Büttiker et collaborateurs ont utilisé une approche RPA pour calculer la réponse linéaire à une tension alternative, avant de calculer les corrections quantiques et les fluctuations mésoscopiques à l'aide de la distribution du temps de Wigner du système sans interaction [114, 115].

Cette approche est valable pour un grand nombre de canaux ouverts et pour une tension alternative. Pour un petit nombre de canaux ouverts (situation des boîtes quantiques ouvertes), si la tension ne dépend pas du temps, le blocage de Coulomb ne peut être obtenu [103, 116] dans une approche standard de type Hartree-Fock ou RPA.

Des travaux récents [116, 117] sur des boîtes ouvertes incluent les phénomènes de rétro-diffusion cohérente à l'intérieur de la boîte quantique et étudient les effets des interactions sur la quantification de la charge dans des systèmes hors-équilibre et/ou dépendant du temps.

Dans [117], le travail de la référence [111] est généralisé pour prendre en compte les processus cohérents. L'étude du facteur β (2.35) qui caractérise le comportement de la caractéristique courant-tension et qui est jugé plus robuste que le blocage de Coulomb en réponse linéaire pour rendre compte des effets de charge finie, montre que pour une

boîte quantique polarisée en tension et avec un seul canal parfaitement transparent, les interactions (toujours prises en compte via l'énergie capacitive) ne donnent pas lieu à une correction à température nulle.

Ce résultat se retrouve également dans un développement en $1/N$, où N est le nombre total de canaux dans les contacts ponctuels reliant la boîte quantique aux électrodes [116, 118]. Dans ces travaux, la boîte est toujours traitée par la RMT et l'interaction via l'énergie capacitive. Les corrections dues aux interactions sont calculées notamment pour la localisation faible et les fluctuations universelles de conductance et sont trouvées être nulles à température nulle.

Cela peut se comprendre par le raisonnement simple suivant. La conductance est donnée par la valeur moyenne sur le désordre des carrés des éléments de matrices de la matrice de diffusion S de la boîte quantique. Dans le cadre de l'approche RMT, cela ne dépend que de la symétrie. Il est clair que si les interactions modifient S (et donc la conductance d'une boîte quantique particulière), elles ne changent pas la symétrie (et donc la conductance moyenne).

Cette absence d'effet de l'interaction est vérifiée dans une expérience sur des boîtes quantiques chaotiques relativement grandes [119] reliées à chaque réservoir par un seul canal parfaitement ouvert, pour lesquelles le formalisme est valable, et qui se trouvent être très bien décrit par la RMT (sans interaction).

Pour des boîtes quantiques plus petites, comme dans les références [32, 33], et celles qui ne manqueront pas d'être bientôt accessibles aux mesures avec l'avancement des techniques de fabrication et de caractérisation des échantillons, l'écrantage peut être bien moins bon et les interactions peuvent jouer un rôle bien plus important. Pour décrire ces systèmes, la description des interactions par un terme capacitif n'est pas suffisant. Dans le Chapitre 5, en utilisant la méthode de la boucle et en traitant les interactions de façon exacte, nous montrons effectivement qu'elles peuvent être à l'origine de blocage de Coulomb même en l'absence de barrières de potentiel.

Chapitre 3

Effets des interactions sur les états multi-particules

“A computer’s gotta do what a computer’s gotta do.”

— Holly, *Red Dwarf*.

On a vu dans la section 1.2.3 que le comportement métallique observé à basse température dans des systèmes bidimensionnels n’est pas prédit par des théories prenant en compte seulement le désordre ou seulement l’interaction. Il est en revanche possible que ce comportement métallique résulte de l’effet combiné du désordre et de l’interaction.

Le formalisme mathématique permettant de traiter les systèmes en interaction n’est cependant pas suffisamment développé pour pouvoir traiter à la fois le désordre et l’interaction de façon non-perturbative. De ce fait, le calcul numérique offre une alternative intéressante.

Dans ce Chapitre, on réalise une étude poussée de la statistique spectrale de petits réseaux bidimensionnels désordonnés. La technique de diagonalisation Lanczos nous permet de prendre en compte une interaction longue portée sans approximation.

La limite en taille imposée par le traitement numérique exact rend difficile de varier directement la densité électronique, comme dans les expériences discutées dans la section 1.2.3. Pour changer le paramètre d’interaction r_s , on varie à la place l’intensité U de l’interaction tout en gardant la taille L du système et le nombre N de particules

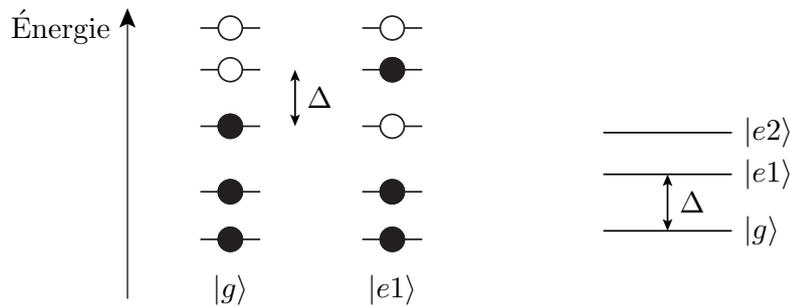


FIG. 3.1: En l'absence d'interaction, les états du spectre multi-particule (à droite) sont obtenus en remplissant les états du spectre à une particule de différentes façons. L'écart entre les deux premiers états multi-particules (dont l'occupation des niveaux à une particule est représentée à gauche) correspond à l'espacement entre les énergies à une particule à l'énergie de Fermi.

constant.

3.1 Introduction

Comme on l'a vu dans le Chapitre précédent, la distribution $P(s)$ des écarts s entre niveaux à une particule a été utilisée avec succès pour caractériser la transition métal-isolant d'Anderson, due au désordre [55]. Dans le régime diffusif, $P(s)$ correspond à la distribution de Wigner-Dyson, alors que le régime de l'isolant d'Anderson est caractérisé par une distribution de Poisson (Voir Figure 2.1).

La Figure 3.1 montre comment la distribution $P(s)$ que nous allons étudier est définie pour un système multi-particule. L'écart normalisé est $s = \Delta / \langle \Delta \rangle$, où $\Delta = E_1 - E_0$ est l'espacement entre les énergies du fondamental multi-particule et du premier état excité. On note par $\langle \dots \rangle$ la moyenne réalisée sur l'ensemble des configurations du désordre. Dans le cas sans interaction, Δ est donc égal à l'écart entre niveaux à une particule à l'énergie de Fermi. Dans cette limite, on peut donc utiliser l'interprétation connue pour les systèmes à une particule (voir Tableau 3.1).

Il est important de souligner le fait que pour pouvoir, en l'absence d'interaction, identifier la distribution $P(s)$ pour un système multi-particule à la statistique des niveaux à une particule discutée au Chapitre 2, il ne faut prendre en considération que l'énergie de première excitation du système multi-particule. En effet, la distribution de l'écart entre niveaux pour les excitations multi-particules suivantes, étudiée dans les références [120,

U	Désordre faible	Désordre fort
0	Wigner-Dyson	Poisson
∞	PWMS	PWMS
<i>Cross-over</i>	Monotone	Non-monotone

TAB. 3.1: Résumé du comportement de la distribution $P(s)$ pour différents régimes de l'interaction U et du désordre dans de petits systèmes bidimensionnels. PWMS signifie *Pinned Wigner Molecule Statistics* (voir texte). La transition (ou *cross-over*) entre les régimes de faible et forte interaction représente le principal résultat de ce Chapitre.

121], n'est pas directement reliée à la statistique du spectre à un corps. Elle est toujours proche de Poisson en l'absence d'interaction, indépendamment de l'intensité du désordre, et ainsi se comporte de façon très différente de la distribution $P(s)$ pour la première excitation multi-particule que nous étudions.

Dans la limite d'interaction infinie $U \rightarrow \infty$, la structure du fondamental est imposée par la répulsion Coulombienne, qui induit la formation d'un cristal de Wigner accroché par le désordre [16, 17]. Nous montrons dans la section 3.3 que la distribution correspondante $P_{U=\infty}(s)$, associée à la statistique d'une molécule de Wigner accrochée (ce qui donne *Pinned-Wigner-Molecule Statistics* en anglais, soit PWMS), n'est pas universelle pour des systèmes finis.

Pour un désordre faible, nous trouvons une dépendance de $P(s)$ en U qui est compatible avec des études précédentes : $P(s)$ change progressivement de la distribution de Wigner-Dyson à sa distribution dans la limite $U \rightarrow \infty$ (PWMS) [120, 122, 123]. Pour un désordre fort, en revanche, nous observons un comportement non-monotone : pour une interaction modérée, les corrélations spectrales sont augmentées.

Avec une méthode post-Hartree-Fock (*Configuration Interaction*, voir section 1.3.1), le cas à fort désordre a été étudié par Benenti *et al.* pour de plus grands systèmes [57]. Ils obtiennent, sous l'effet de l'interaction, une transition de $P(s)$ de la distribution de Poisson à celle de Wigner-Dyson. Notre observation d'une augmentation des corrélations spectrales par une interaction modérée dans le régime de fort désordre montre que ce comportement persiste lorsque les corrélations électroniques sont prises en comptes complètement.

Nous suivons dans ce Chapitre les développements de la référence [124]. Le comportement non-trivial de la statistique spectrale pour un désordre fort est discuté dans la section 3.3, après avoir présenté le modèle que nous étudions (section 3.2). Dans la section 3.4, nous présentons nos résultats pour le rapport de participation inverse du fondamental dans la base des états multi-particules sur-site, et nous montrons que l'augmentation des corrélations est reliée à un effet de délocalisation. Nos conclusions sont discutées dans la section 3.5, et un effet à petite taille, modifiant la forme de la distribution $P(s)$ est présenté dans l'Annexe A.

3.2 Modèle utilisé

Nous considérons un système de N fermions sans spin sur un réseau bidimensionnel de $L \times L$ sites. Dans la suite, $N = 4$ et $L = 6$. On note $M = L^2$ le nombre de sites.

On rappelle l'Hamiltonien du système introduit dans la section 2.1.1 : $H = H_A + H_U$, où H_A est l'Hamiltonien d'Anderson standard

$$H_A = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^+ c_j + c_j^+ c_i) + \sum_{i=1}^M v_i c_i^+ c_i. \quad (3.1)$$

On rappelle que $\langle i, j \rangle$ dénote une paire de sites proches voisins, que $t = 1$ et que les v_i sont des variables aléatoires indépendantes qui sont distribuées uniformément dans l'intervalle $[-W/2; W/2]$. W est l'intensité du désordre. On utilise des conditions de bords périodiques, ce qui mène à une topologie toroïdale. Le terme d'interaction est à longue portée :

$$H_U = \frac{U}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^M \frac{c_j^+ c_i^+ c_i c_j}{d_{ij}}, \quad (3.2)$$

où d_{ij} est la plus petite distance sur le tore entre les sites i et j et U est l'intensité de l'interaction.

Une routine développée par Simon et Wu [125] basée sur l'algorithme de Lanczos [39], permet d'obtenir avec précision le bas du spectre multi-particule, d'où l'énergie de la première excitation multi-particule est extraite, et ce pour un grand nombre de configurations (typiquement 3000) du désordre différentes. À partir de ces données, on calcule la distribution $P(s)$ ainsi que le rapport de participation inverse du fondamental

(voir section 3.4) pour différentes valeurs des paramètres U , W , L et N .

Pour $N = 4$ électrons sur $M = 36$ sites, la dimension de l'espace de Hilbert est $M!/(N!(M - N)!) \sim 59000$. L'algorithme Lanczos permet de diagonaliser des matrices bien plus grandes, mais dans notre cas nous avons des milliers de d'échantillons à considérer, pour chaque ensemble de paramètres. De plus la taille de l'espace de Hilbert augmente extrêmement vite avec N et M (elle vaut 635000 pour $N = 4$ et $M = 64$, et atteint presque deux millions pour $N = 6$ et $M = 36$), de sorte que l'étude numérique exacte est rapidement limitée en taille.

3.3 Répulsion des niveaux induite par l'interaction

Dans cette section, nous étudions en détail la distribution de probabilité $P(s)$ de l'énergie de la première excitation multi-particule, dont le comportement dans les différents régimes est rappelé dans le Tableau 3.1. On commence par passer en revue les formes de $P(s)$ dans différents cas limites.

En l'absence d'interaction, $P_{U=0}(s)$ correspond à la distribution de Wigner-Dyson $P_{WD}(s) = \frac{\pi}{2}s \exp(-\frac{\pi}{4}s^2)$ pour un système diffusif (métallique). Pour un système fortement désordonné (isolant d'Anderson), $P_{U=0}(s)$ tend vers la distribution de Poisson $P_P(s) = \exp(-s)$ dans la limite $L \rightarrow \infty$. Dans des systèmes finis, $P_{U=0}(s)$ diffère de Poisson même pour un désordre infini. Pour la taille que nous considérons ($M = 36$), cependant, la différence est très petite.

Dans la limite d'interaction forte ($U \rightarrow \infty$), l'énergie électrostatique domine et l'état multi-particule le plus bas en énergie correspond à une distribution périodique des électrons (cristal de Wigner) qui est piégé même par un désordre faible. Tous les cristaux de Wigner ont la même structure électronique, et donc la même énergie de Coulomb, mais diffèrent par leur position sur le réseau et donc par leur énergie de désordre.

Dans la limite de faible densité, et pour un grand système, le fondamental approche le cristal de Wigner standard (du continuum) de structure hexagonale. Le nombre de positions possibles sur le réseau est grand, et $P_{U=\infty}(s)$ tend vers Poisson. Pour des densités plus grandes, il faut prendre en compte les effets de commensurabilité entre le réseau et les distances inter-électroniques.

Si nous nous plaçons dans le cas simple de demi-remplissage, il n'y a que deux cristaux

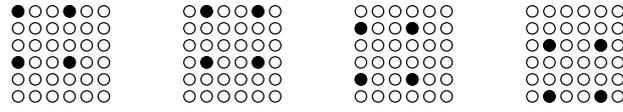


FIG. 3.2: Exemples de molécules de Wigner pour $N = 4$ particules sur un réseau de $L = 6$ par 6 sites.

de Wigner différents. Leur différence d'énergie

$$\Delta = E_1 - E_0 = \sum_{k=1}^N v_{i_k} - \sum_{k=1}^N v_{j_k}, \quad (3.3)$$

où les j_k décrivent les sites occupés par une particule dans la molécule de Wigner la plus basse en énergie (le fondamental) et les i_k décrivent les sites occupés dans la seconde molécule de Wigner (le premier état excité), est donc donnée par la différence entre deux sommes de nombres aléatoires *indépendants*. D'après le théorème de la limite centrale, la distribution

$$P_{U=\infty}(\Delta) = \left(\prod_{l=1}^M \int_{-W/2}^{W/2} \frac{dv_l}{W} \right) \delta(\Delta - \sum_k v_{i_k} + \sum_k v_{j_k}). \quad (3.4)$$

qui en résulte est Gaussienne. Comme seulement des valeurs positives de s sont considérées, la distribution $P_{U=\infty}(s)$ finale est appelée semi-Gauss.

Dans le cas que nous étudions, N et L sont tels que les 9 états multi-particules les plus bas en énergie à $U = \infty$ sont des cristaux de Wigner de forme carrée (voir Figure 3.2), que l'on appelle ici « molécules de Wigner, » qui diffèrent entre eux uniquement par leur position sur le réseau. Ces 9 cristaux doivent être triés par ordre d'énergie croissant et seul le premier écart Δ doit être considéré. Étant donné que pour le système que nous considérons nous n'avons que neuf configurations, $P_{U=\infty}(s)$ est intermédiaire entre semi-Gauss et Poisson, et prend une forme que nous pouvons déterminer numériquement avec une grande précision. Nous avons nommé $P_{U=\infty}(s)$ PWMS pour l'anglais *Pinned Wigner Molecule Statistics* (distribution d'une molécule de Wigner accrochée).

La Figure 3.3a montre la distribution $P(s)$ pour $W = 5$, pour trois valeurs de U . Pour ce désordre, la longueur de localisation des états à une particule (sans interaction) est plus grande que la taille du système, et donc le mouvement des particules à travers l'échantillon est diffusif. En conséquence, $P(s)$ suit la distribution de Wigner-Dyson à $U = 0$. Lorsque l'intensité des interactions augmente, nous trouvons que la répulsion des

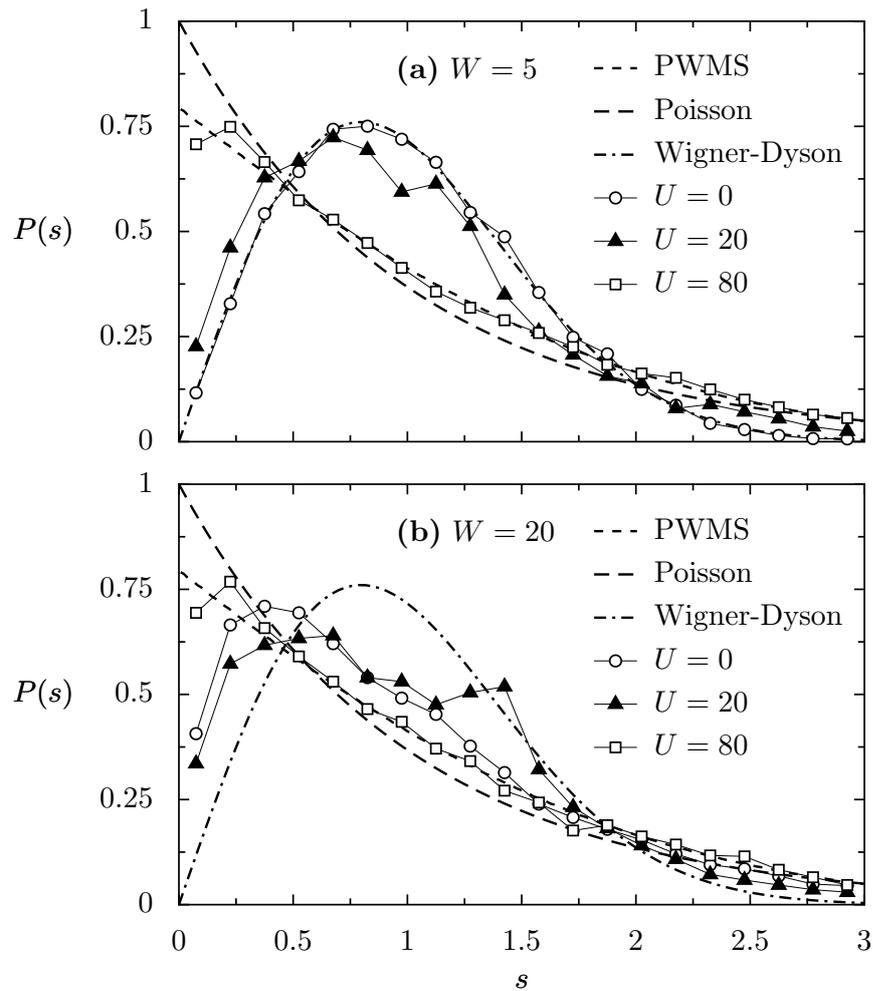


FIG. 3.3: Distribution de l'énergie de la première excitation multi-particule pour différentes valeurs de l'interaction U pour un désordre faible $W = 5$ (a) et pour un désordre fort $W = 20$ (b), pour 4 particules sur un réseau de 6 sur 6 sites. Chaque courbe est obtenue à partir de données pour 9000 configurations de désordre différentes.

niveaux décroît. En ce sens, ce résultat est cohérent avec ceux des références [120, 122, 123]. La différence est que dans la limite d'interaction infinie, $P(s)$ pour notre système de taille relativement petite est PWMS et non pas Poisson.

Ce comportement n'est pas surprenant : une interaction forte supprime le régime diffusif en induisant la formation d'un cristal de Wigner qui est accroché par le désordre. Ainsi, les corrélations spectrales disparaissent lorsque l'interaction augmente.

La Figure 3.3b montre nos résultats dans le cas de fort désordre ($W = 20$). Pour le petit système que nous considérons, la distribution $P(s)$ dans le cas sans interaction ne devient vraiment Poissonnienne que dans la limite de très fort désordre. Bien que $W = 20$ soit un désordre suffisamment fort pour qu'à $U = 0$ les états à une particule à l'énergie de Fermi soient localisés sur environ 3 sites, et donc pour que le système soit isolant, la distribution $P_{U=0}(s)$ est intermédiaire entre Poisson et Wigner-Dyson.

Le fait le plus important dans l'évolution de $P(s)$ à $W = 20$ en fonction de l'interaction U est qu'elle est non-monotone. Pour une interaction très forte, $P(s)$ tend bien sûr vers PWMS, pour lesquelles les corrélations spectrales sont minimum. Pour une interaction modérée, cependant, les corrélations spectrales sont plus importantes que dans le cas sans interaction (autrement dit, $P(s)$ est plus proche de Wigner-Dyson). C'est le résultat principal de ce Chapitre. L'augmentation des corrélations spectrales pourrait être un précurseur de la transition vers des corrélations universelles trouvées dans [57].

Le comportement non-monotone devient moins prononcé si on augmente le désordre encore davantage. On remarque que, lorsque l'interaction augmente, un pic apparaît dans la distribution $P(s)$. Ce pic est la manifestation d'un mécanisme augmentant les corrélations spectrales d'une façon non-universelle pour des systèmes petits. Nous discutons ce mécanisme en détail dans l'Annexe A.

Pour caractériser quantitativement le comportement non-monotone de $P(s)$, on peut regarder l'évolution de la variance de s avec U . On voit sur la Figure 3.4 que cette évolution dans le cas de désordre faible ($W = 5$) et fort ($W = 20$) est très différente. Pour $W = 5$, on a une évolution monotone vers des corrélations plus petites, alors que pour $W = 20$ la variance montre un minimum en fonction de U , minimum qui correspond à une augmentation des corrélations spectrales.

Avec une interaction à courte portée, nous avons trouvé des résultats similaires pour $P(s)$ à demi-remplissage. Loin du demi-remplissage, par contre, des configurations qui ne sont pas affectées par l'interaction sont connectées par des éléments de sauts. En

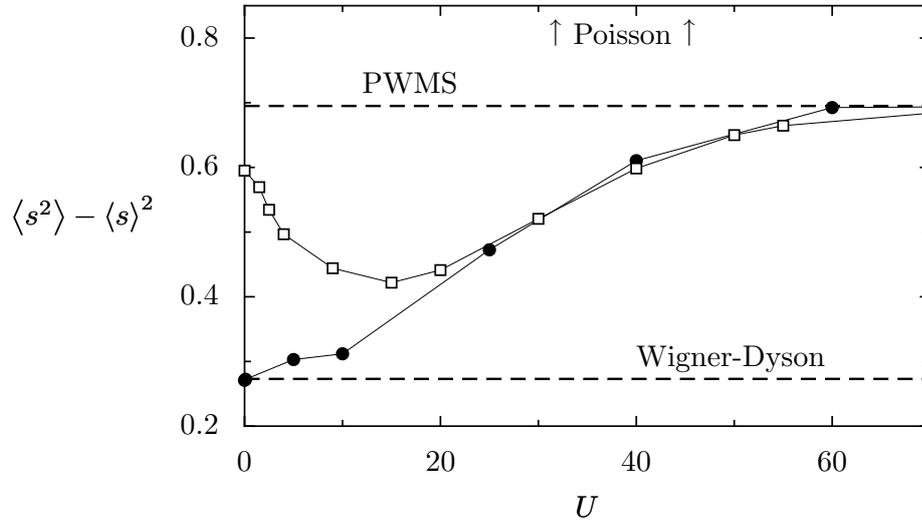


FIG. 3.4: La variance de s en fonction de U pour $W = 5$ (cercles) et pour $W = 20$ (carrés), pour 4 particules sur un réseau de 6 par 6 sites. Chaque point est calculé pour 3000 configurations de désordre. L'erreur statistique est plus petite que la taille des symboles. Pour la distribution de Poisson, $\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2 = 1$ (au-delà de l'échelle de l'axe vertical).

conséquence, des interactions à courte portée ne peuvent pas supprimer la mobilité des électrons. Dans ce cas, la variance (ou toute autre quantité caractérisant la distribution $P(s)$) sature et n'atteint pas la valeur PWMS à U grand.

3.4 Délocalisation dans la base des états sur site

Le fait que $P(s)$ approche la distribution de Wigner-Dyson en présence d'une interaction modérée peut être interprété comme la signature d'une délocalisation des électrons. Alors que le lien entre corrélations spectrales et localisation est clair pour la statistique spectrale à une particule (pour $U = 0$), il est moins clair dans le régime en interaction. Pour clarifier cette interprétation, nous avons étudié la localisation du fondamental

$$|g\rangle = \sum_n \Psi_n |n\rangle \quad (3.5)$$

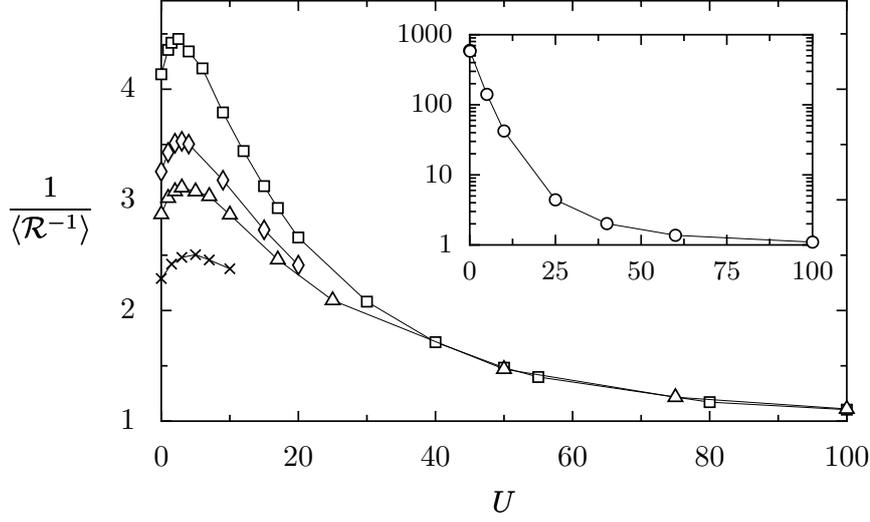


FIG. 3.5: Évolution de $1/\langle\mathcal{R}^{-1}\rangle$ en fonction de U pour $W = 5$ (cercles, dans l'encart), $W = 20$ (carrés), $W = 23$ (losanges), $W = 25$ (triangles) et $W = 30$ (croix). L'erreur statistique est plus petite que la taille des symboles.

dans la base des états multi-particules sur site $\{|n\rangle\}$, via son rapport de participation inverse

$$\mathcal{R}^{-1} = \sum_n |\Psi_n|^4. \quad (3.6)$$

Contrairement à $P(s)$, le rapport de participation inverse \mathcal{R}^{-1} dépend du choix de la base dans laquelle il est calculé. Pour pouvoir interpréter le rapport de participation inverse comme une mesure de la localisation des électrons, nous avons choisi pour $\{|n\rangle\}$ les déterminants de Slater

$$c_{i_1}^+ c_{i_2}^+ c_{i_3}^+ c_{i_4}^+ |0\rangle \quad (3.7)$$

qui correspondent aux $N = 4$ particules complètement localisées chacune sur un site du réseau. i_1, i_2, i_3 et i_4 désignent les sites occupés et $|0\rangle$ correspond au réseau vide.

Lorsque le fondamental $|g\rangle$ est donné par l'un de ces états de base $|m\rangle$, $\Psi_n = \delta_{n,m}$, et $\mathcal{R}^{-1} = 1$. Si, au contraire, $|g\rangle$ est une superposition de beaucoup d'éléments de $\{|n\rangle\}$, alors \mathcal{R}^{-1} est très petit devant l'unité. Comme la base est construite avec des électrons complètement localisés, \mathcal{R}^{-1} peut être interprété comme une mesure de la localisation des électrons dans l'état multi-particule $|g\rangle$.

La Figure 3.5 montre des résultats numériques pour l'inverse de la moyenne sur le désordre de \mathcal{R}^{-1} . Dans le cas d'un désordre faible ($W = 5$, dans l'encart), cette quantité diminue de façon monotone avec U , signifiant une localisation des électrons par l'interaction. La situation diffusive à $U = 0$ est perturbée par l'interaction qui introduit des diffusions supplémentaires, réduisant la mobilité et donc $1/\langle\mathcal{R}^{-1}\rangle$. Dans le régime d'interaction forte, il y a formation d'un cristal de Wigner, qui correspond à un état particulier de la base choisie et donc \mathcal{R}^{-1} tend vers un.

Dans le régime de fort désordre, le comportement est très différent. Pour une interaction modérée, $1/\langle\mathcal{R}^{-1}\rangle$ augmente avec U , ce qui signifie que l'interaction a un effet délocalisant.

On peut comprendre ce résultat avec le scénario suivant. Pour $U = 0$, on a des états à une particule localisés. Le désordre est suffisamment fort pour dicter la configuration des électrons. Pour une interaction modérée, l'effet des corrélations dépend de cette configuration précise, qui elle-même dépend de la configuration du désordre. Dans certains cas, la structure électronique imposée par le désordre est proche de celle adaptée à l'interaction (une molécule de Wigner), et donc l'interaction renforce la localisation. Dans la plupart des cas, cependant, la configuration électronique adaptée au désordre est différente de celle d'une molécule de Wigner. Ainsi, augmenter l'intensité de l'interaction induit des réorganisations de charge (comme proposé dans [49, 50] dans le contexte d'anneaux unidimensionnels et dans [18] pour de petits systèmes bidimensionnels) prenant place pour des valeurs U_c de l'interaction qui dépendent de la configuration du désordre. Lorsque $U \simeq U_c$, la compétition entre l'interaction et le désordre pour la structure du fondamental mène pour ce dernier à une superposition d'états, l'un adapté au désordre, l'autre adapté à l'interaction. Cela induit une délocalisation des électrons.

Comme U_c dépend beaucoup de la configuration particulière du désordre considérée, ces délocalisations sont lissées par la moyenne sur le désordre. De plus, on s'attend à ce que la valeur moyenne de U_c augmente et que sa distribution s'étale lorsque W augmente, ce qui est en accord avec le comportement observé sur la Figure 3.5.

Pour illustrer ces considérations, nous pouvons définir pour chaque échantillon l'augmentation

$$\delta = \mathcal{R}^{-1}(U) - \mathcal{R}_0^{-1} \quad (3.8)$$

de \mathcal{R}^{-1} par rapport à sa valeur sans interaction \mathcal{R}_0^{-1} . δ est donc une mesure du chan-

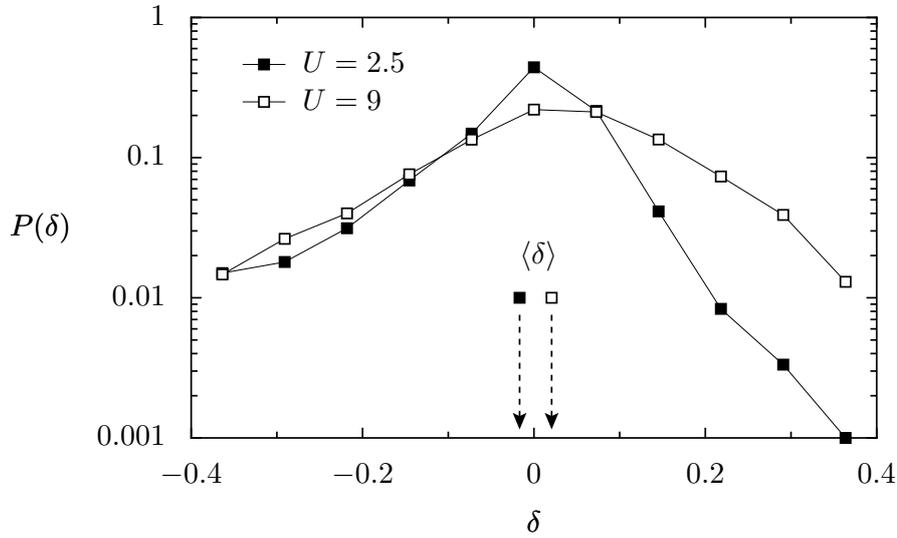


FIG. 3.6: Distribution de δ (équation (3.8)) pour un désordre d'intensité $W = 20$ et deux valeurs de l'interaction $U = 2.5$ (carrés pleins) et $U = 9$ (carrés vides) calculée à partir de 3000 configurations de désordre. Les moyennes sont indiqués sous les courbes. L'erreur statistique pour ces moyennes est plus petite que la taille des symboles.

gement de la localisation du système électronique induit par l'interaction. La Figure 3.6 montre la distribution de cette quantité pour un désordre de $W = 20$ pour deux valeurs différentes de U .

On peut voir que la valeur la plus probable de δ est proche de zéro. Néanmoins, pour $U = 2.5$, la partie négative de la distribution, qui correspond à de grandes délocalisations, est plus prononcée que la partie positive, qui correspond à des localisations. On obtient donc une moyenne négative pour δ . Cela n'est pas le cas lorsque l'interaction devient plus forte ($U = 9$). On en conclut que pour $W = 20$, il est plus probable que U_c soit plus proche de 2.5 que de 9.

Nos résultats concernant \mathcal{R} sont cohérents avec ceux de [18] pour une quantité liée (un rapport de participation calculé à partir de la densité électronique, pour être précis).

3.5 Conclusion du Chapitre 3

Dans ce Chapitre, nous avons étudié la statistique spectrale de fermions sans spin interagissant dans un système bidimensionnel désordonné, en utilisant la diagonalisation

exacte. Ce genre d'étude détaillée de petits systèmes permet d'acquérir une compréhension des mécanismes pouvant prendre place dans des systèmes réels. Ces études peuvent apporter une vision complémentaire des mécanismes impliqués dans les effets combinés du désordre et de l'interaction.

Nous avons trouvé que les corrélations dans la distribution de l'écart entre le fondamental multi-particule et le premier état excité sont augmentées par une interaction modérée lorsque le désordre est suffisamment fort pour localiser les fonctions d'onde à une particule. L'interprétation de cet effet comme la signature d'une délocalisation des électrons a été soutenue par l'étude du rapport de participation inverse pour le fondamental.

L'effet de délocalisation peut être compris comme la conséquence d'une compétition entre désordre et interaction pour la structure du fondamental, compétition qui prend place pour certaines valeurs de l'intensité de l'interaction dépendant de la configuration de désordre. Cette compétition entraîne des réorganisations de charge lorsque l'on augmente l'interaction : le système passe d'une configuration qui minimise l'énergie associée au désordre à une configuration plus adaptée à l'interaction.

Notre conclusion que les interactions peuvent augmenter la mobilité de fermions sans spin seulement dans le cas de fort désordre est en accord avec un calcul direct mais approximatif de la conductance [51]. Cela montre que la statistique spectrale peut être un bon indicateur pour caractériser le comportement d'un système multi-particule.

Il serait souhaitable d'inclure le degré de liberté de spin dans des études à venir. Des résultats concernant l'aimantation [126] et la magnéto-conductance [127] laisse imaginer un comportement relativement riche dans un tel système.

Chapitre 4

Conductance en présence d'interaction : la méthode de la boucle

“To infinity and beyond!”

— Buzz Lightyear, *Toy Story*.

Dans ce Chapitre, nous introduisons la méthode de la boucle [78] ainsi que la partie de son développement réalisée dans le cadre de cette thèse. Les résultats physiques originaux obtenus grâce à cette méthode feront l'objet des deux Chapitres suivants.

4.1 Des courants permanents à la conductance

La méthode de la boucle permet d'obtenir la conductance en réponse linéaire à température nulle d'un nano-système quelconque (pouvant être le siège d'interactions électron-électron) pourvu que ce dernier soit connecté aux réservoirs par un unique canal.

Selon les travaux de Meir et Wingreen [67] (voir section 2.2.2) la conductance d'un nano-système en interaction, à température nulle, peut toujours être décrite dans le cadre du formalisme de Landauer. Dans le cas d'un seul canal par contact (schématisé sur la Figure 4.1), la présence d'interactions dans le nano-système n'empêche pas la définition d'une amplitude de transmission à l'énergie de Fermi $t(E_F)$ effective, qui dépend des interactions, pour passer d'un côté du nano-système à l'autre. La conductance en réponse

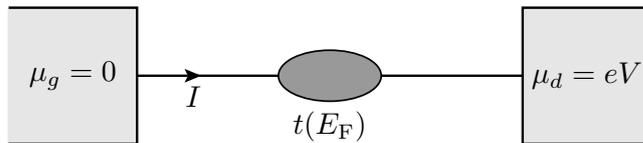


FIG. 4.1: Un nano-système relié à deux réservoirs par un seul canal. Les réservoirs sont à des potentiels chimiques différents, à l'origine d'un courant I . En réponse linéaire, on a $ge^2/h = \lim_{V \rightarrow 0} I/V$.

linéaire est alors simplement donnée par la formule de Landauer $g = |t(E_F)|^2$.

Obtenir $|t(E_F)|$ à partir de la formule de Meir et Wingreen est cependant une tâche ardue puisqu'elle fait intervenir des fonctions de Green multi-particules dont le calcul est hautement non-trivial étant donné qu'elles doivent être calculées en présence des réservoirs (souvent modélisés par des fils semi-infinis). Le calcul analytique n'est faisable qu'en perturbation ou pour des cas particuliers et un traitement numérique exact paraît difficile.

Dans la méthode de la boucle on détermine $|t(E_F)|$ indirectement à partir de calculs numériques de courants permanents dans un système composite constitué du nano-système fermé sur lui-même en une boucle à l'aide d'un unique canal sans interaction, comme schématisé dans la Figure 4.2.

Le grand avantage de la méthode est que le courant permanent est une propriété thermodynamique du système global, et est donc accessible numériquement pour des systèmes finis. En revanche, il est nécessaire de procéder à une extrapolation à taille infinie pour obtenir la conductance.

En effet, l'existence du lien entre courant permanent et conductance est basée sur deux faits importants qui sont tous les deux valables uniquement dans la limite d'une boucle infiniment grande :

- * d'une part, le courant permanent dans un anneau qui inclut un diffuseur à *un corps* ne dépend dans cette limite que du module $|t(E_F)|$ de $t(E_F)$,
- * d'autre part, c'est seulement dans la limite de taille infinie que les électrons dans un anneau incluant une partie (de taille finie) en interaction se comportent comme un liquide de Fermi.

Le premier fait est d'ordre technique, puisqu'il s'agit juste de pouvoir remonter au module $|t(E_F)|$ de l'amplitude de transmission à partir du courant permanent. Il se

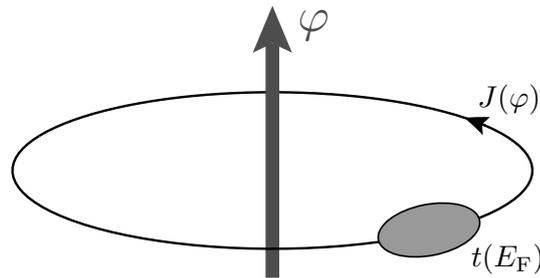


FIG. 4.2: Anneau contenant un diffuseur à un corps caractérisé par son amplitude de transmission à l'énergie de Fermi $t(E_F)$. Un courant permanent $J(\varphi)$ apparaît lorsqu'un flux magnétique φ traverse l'anneau.

trouve que dans la limite de taille infinie, ce dernier ne dépend que du premier (voir la section 4.1.1). Connaître le courant permanent dans cette limite suffit donc pour atteindre $|t(E_F)|$. C'est de cette nécessité de pouvoir remonter à $|t(E_F)|$ que provient également l'obligation d'avoir un seul canal par accès (voir discussion en section 4.3).

Le second point est plus crucial, puisqu'il s'agit d'une question de principe. L'amplitude de transmission étant une quantité à *un corps*, elle n'a pas de sens dans un système de taille finie où les interactions sont présentes. La formule de Meir et Wingreen suppose par exemple la présence de fils semi-infinis, jouant le rôle de réservoirs, de part et d'autre du nano-système en interaction. Dans notre cas, le fait d'avoir un système bouclé sur lui-même entièrement cohérent fait perdre au fil, même infini, son rôle de réservoir. Nous allons voir cependant dans la section 4.1.2 que pour un système de taille infinie l'amplitude de transmission retrouve son sens.

Pour ces raisons, la méthode de la boucle implique de faire une extrapolation bien contrôlée des résultats numériques, qui concernent forcément des systèmes de taille finie, afin de déduire le comportement à taille infinie. Les détails concernant cette extrapolation sont exposés dans la section 4.2.

4.1.1 Le cas sans interaction

En l'absence d'interaction, on peut avoir recours à une théorie à une particule pour décrire le système. Dans l'Annexe B, on calcule le courant permanent $J(\Phi)$ régnant dans un anneau traversé par un flux magnétique $\varphi = \Phi\hbar/e$, tel que schématisé sur la figure Figure 4.2. L'anneau est composé d'un nano-système quelconque, dont la seule quantité caractéristique qui intervienne dans les calculs est l'amplitude de transmission $t = |t|e^{i\alpha}$,

fermé sur lui-même par un unique canal ($|t|$ et α peuvent dépendre du vecteur d'onde k de l'électron incident).

Dans l'Annexe B, on est amené à calculer le courant permanent sous la forme d'un développement en puissance de $1/L$, L étant la taille de l'anneau (son périmètre pour être précis).

Pour la première contribution à $J(\Phi)$ [10, 128], si le système contient un nombre impair de particules, on obtient (équation (B.24)) :

$$J^{\text{impair}(1)}(\Phi) = -\frac{ev_F \arccos(|t(E_F)| \cos(\Phi))}{\pi L \sqrt{1 - |t(E_F)|^2 \cos^2(\Phi)}} t(E_F) \sin(\Phi). \quad (4.1)$$

On obtient un résultat très similaire pour le cas où le nombre de particules est pair (équation (B.26)) :

$$J^{\text{pair}(1)}(\Phi) = \frac{ev_F \arccos(|t(E_F)| \cos(\Phi - \pi))}{\pi L \sqrt{1 - |t(E_F)|^2 \cos^2(\Phi)}} t(E_F) \sin(\Phi). \quad (4.2)$$

On voit alors que l'on peut obtenir $|t(E_F)|$ à partir du premier terme du développement [80] :

$$|t(E_F)| = \frac{J^{(1)}(\pi/2)}{J^{0(1)}(\pi/2)}. \quad (4.3)$$

où l'index zéro en exposant signifie que l'on a remplacé le nano-système par un morceau de canal de même longueur¹ (ce qui donne $|t(E_F)| = 1$ et $J^{0(1)}(\pi/2) = ev_F/\pi L$).

On obtient donc la conductance à partir du courant permanent :

$$g = |t(E_F)|^2 = \lim_{L \rightarrow \infty} \left(\frac{J(\pi/2)}{J^0(\pi/2)} \right)^2. \quad (4.4)$$

Ainsi, connaître le comportement du courant permanent à taille infini (c'est-à-dire connaître $J^{(1)}$) *suffit* pour avoir la conductance. Qu'il soit *nécessaire* d'aller à taille infinie devient clair quand on examine les termes de second ordre (voir section 4.2) qui font intervenir entre autre la phase α et la dérivée $d|t|/dk$ en plus du module $|t(E_F)|$.

L'équation (4.4) est en quelque sorte l'équation-clé de la méthode. En pratique, on

¹C'est ce que signifie l'index zéro en exposant dans l'ensemble de ce Chapitre.

préfère travailler avec une autre quantité, la raideur de charge :

$$\mathcal{D} = (-1)^N \frac{L}{2} (E(\Phi = 0) - E(\Phi = \pi)), \quad (4.5)$$

où $E(\Phi)$ est l'énergie du fondamental multi-particule. Comme le courant permanent est donné par $J = -dE/d\varphi$, la raideur de charge peut être vue comme la valeur absolue de l'intégrale de $J(\Phi)$ entre zéro et π . L'avantage de cette quantité est qu'elle peut être obtenue numériquement sans avoir besoin des nombres complexes puisque $\Phi = \pi$ correspond simplement à des conditions de bords antipériodiques.

Contrairement au courant permanent, du fait de la présence du facteur L , la raideur de charge ne tend pas vers zéro quand la taille tend vers l'infini. Le premier terme non-nul est donc d'ordre zéro en $1/L$. Dans l'Annexe B on obtient (équation (B.40)) :

$$\mathcal{D}_\infty = \frac{\hbar v_F}{2} \arcsin(|t(k_F)|). \quad (4.6)$$

Le résultat est indépendant de la parité du nombre de particules et s'inverse très facilement pour donner la conductance [82] :

$$g = \sin^2 \left(\frac{\pi \mathcal{D}_\infty}{2 \mathcal{D}_\infty^0} \right). \quad (4.7)$$

Ici encore l'index zéro en exposant désigne le cas où le nano-système est remplacé par un simple fil sans interaction. En insérant $|t| = 1$ dans (4.6), on obtient :

$$\mathcal{D}_\infty^0 = \frac{\hbar v_F}{2} \frac{\pi}{2}. \quad (4.8)$$

\mathcal{D}_∞ doit être obtenu en extrapolant les résultats numériques, comme on le verra dans la section 4.2.

Les formules (4.7) et (4.4) ont également été redérivées dans la référence [84]. En supposant que le système global est un liquide de Fermi à taille infinie, comme cela semble être le cas (voir section suivante ainsi que [129]), le problème y est reformulé en terme de quasi-particules et la validité de la méthode de la boucle dans ce cas est démontré.

Remarque sur la terminologie : La raideur de charge est une quantité définie pour caractériser le courant permanent d'une façon intensive (le courant permanent tend vers zéro quand $L \rightarrow \infty$, pas la raideur de charge). Il est possible de définir une quantité

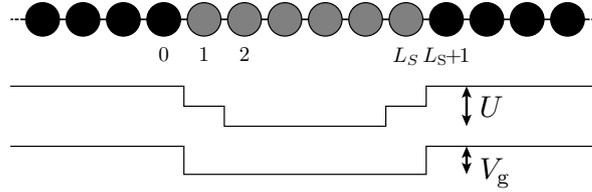


FIG. 4.3: Le nano-système, constitué d'une chaîne de L_S sites dans laquelle les électrons interagissent à courte portée avec une intensité U , couplé à deux fils semi-infinis. En-dessous, le potentiel de compensation prévient le dépeuplement du nano-système par l'interaction à demi-remplissage (voir texte). Enfin, un potentiel de grille V_g permet d'attirer des électrons et de varier la densité électronique du nano-système.

analogue (parfois appelée le poids de Drude, voir section 2.2.3) à partir de la courbure de l'énergie du fondamental à flux nul :

$$\mathcal{C} = L \frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2}_{\varphi=0}. \quad (4.9)$$

Ces deux quantités, \mathcal{C} et \mathcal{D} , sont qualitativement équivalentes pour des systèmes unidimensionnels. Il faut néanmoins garder en tête que par raideur de charge nous désignons dans cette thèse \mathcal{D} et non \mathcal{C} .

4.1.2 Application de la méthode en présence d'interactions

La question que nous souhaitons aborder maintenant est celle de la validité de la méthode de la boucle en présence d'interaction. Comme les électrons interagissent dans le nano-système, on peut se demander s'il est conceptuellement possible d'attribuer une amplitude de transmission $t(E_F)$ au nano-système. Pour de petits anneaux, la réponse est clairement négative.

En présence d'interaction, seul l'outil numérique nous permet de nous affranchir d'une quelconque approximation draconienne. Pour y avoir recours, nous allons utiliser le modèle introduit dans la section 2.2.1.

La Figure 4.3 schématise à la fois le nano-système que nous allons étudier et le dispositif dans lequel on veut en mesurer la conductance. Il s'agit d'un système unidimensionnel. On rappelle cependant que la méthode de la boucle nécessite que les fils, mais pas forcément le nano-système, soient purement unidimensionnels.

On rappelle l'Hamiltonien correspondant :

$$H = H_K + H_U + H_G, \quad (4.10)$$

avec

$$H_K = - \sum_{i=-\infty}^{\infty} (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.), \quad (4.11)$$

$$H_U = U \sum_{i=1}^{L_S-1} (\hat{n}_i - 1/2)(\hat{n}_{i+1} - 1/2), \quad (4.12)$$

$$H_G = -V_g \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_i. \quad (4.13)$$

L'Hamiltonien H_U contient, en plus du potentiel à deux corps d'interaction, un potentiel à un corps (dû aux termes $1/2$) qui assure la neutralité de charge dans le cas de demi-remplissage (et donc la symétrie particule-trou dans le nano-système). Il peut être vu comme un arrière-plan de charges positives dont la présence évite que les électrons, sous l'effet des interactions, ne désertent le nano-système. Ce potentiel est dessiné sous le schéma du système dans la Figure 4.3. Il est caractérisé par des marches à $U/2$ pour les sites aux extrémités du nano-système. Ces marches sont dues au fait qu'un électron placé sur un de ces deux sites ne peut interagir qu'avec un seul de ses deux proches voisins.

Ce système, étant ouvert, n'est pas adapté au calcul numérique. Ce que nous pouvons faire en revanche, c'est calculer le courant permanent dans la boucle de la Figure 4.4, puisqu'il s'agit d'un système fermé.

Ce calcul est fait grâce à un programme écrit par P. Schmitteckert [42]. Le code est basé sur l'algorithme DMRG qui est particulièrement efficace à une dimension (voir section 1.3.3). Il s'agit d'une technique de renormalisation permettant de faire la meilleure troncature de l'espace de Hilbert possible à chaque étape de la construction du système. Les N_c états gardés dans les parties du système à chaque étape correspondent à ceux qui ont le poids le plus important dans la matrice-densité réduite correspondant à l'état fondamental du système composé. On peut ainsi obtenir le fondamental d'un système avec à la fois une grande précision (bien sûr liée à la grandeur du nombre N_c) et une grande efficacité (car on réalise la meilleure troncature). Pour les systèmes les plus grands que nous ayons considérés (de l'ordre de $L = 300$ sites), nous avons gardé jusqu'à $N_c = 1000$ états.

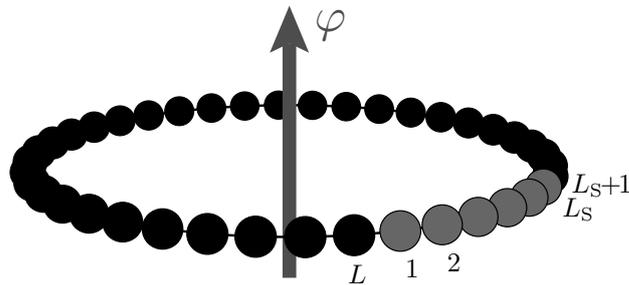


FIG. 4.4: Le nano-système fermé en une boucle par une chaîne de $L_L = L - L_S$ sites sans interaction. Le courant permanent $J(\varphi)$ peut être calculé numériquement, même en présence d'interactions entre proches voisins sur les sites 1 à L_S .

La question qui nous intéresse dans cette section peut maintenant être formulée de la façon suivante : est-ce que, dans la limite d'un fil de taille infinie, le système en interaction schématisé sur la Figure 4.4 se comporte de la même façon que le système à un corps de la Figure 4.2 ?

Pour montrer que c'est le cas, R. A. Molina *et al.* ont utilisé l'implémentation à valeurs complexes du code de P. Schmitteckert pour calculer [78] numériquement le courant permanent $J(\Phi)$ dans la boucle de la Figure 4.4 incluant le nano-système en interaction. Les symboles sur la Figure 4.5 correspondent au résultat de l'extrapolation

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{J(\Phi)}{J^0(\pi/2)} \quad (4.14)$$

faite avec les données numériques. Les lignes correspondent à un « fit » de ces points par la formule (4.1) ou (4.2) divisée par $J^{0(1)}(\pi/2)$ en utilisant $|t(E_F)|$ comme paramètre ajustable.

Le fait que l'ajustement soit parfait signifie que les deux systèmes (Figure 4.2 et Figure 4.4) se comportent de la même façon dans la limite de taille infinie, et qu'il est donc possible de remplacer un nano-système en interaction par un diffuseur à *un* corps avec une amplitude de transmission effective.

Avec ce test [78] la méthode de la boucle se trouve validée en présence d'interactions. Cette vérification est complétée par des arguments analytiques basés sur l'hypothèse que le système est un liquide de Fermi [84]. Dans la suite, on utilisera donc l'implémentation à valeurs réelles du code de P. Schmitteckert et on déterminera la conductance directement à partir de l'équation (4.7).

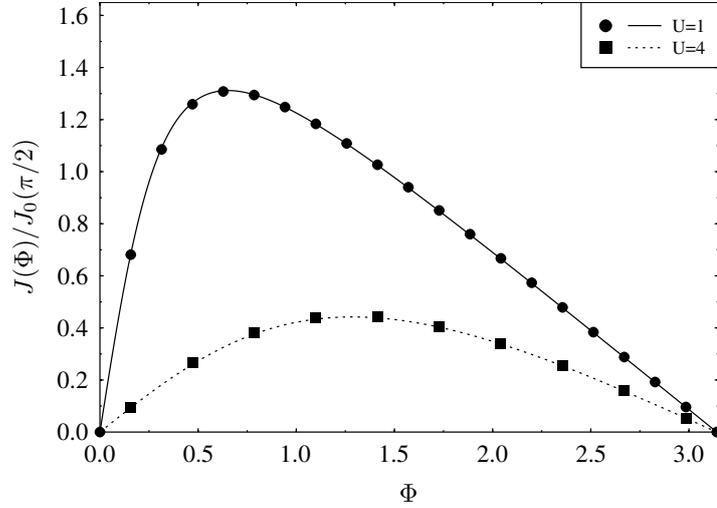


FIG. 4.5: Le courant permanent en fonction du flux dans la limite d'un anneau de taille infinie. Les points sont les résultats numériques obtenus pour un nano-système de $L_S = 6$ sites avec une interaction d'intensité $U = 1$ et 4 , sans tension de grille ($V_g = 0$). Les courbes correspondent à la prédiction théorique pour un diffuseur sans interaction d'amplitude de transmission $|t|=0.938$ (trait plein) et $|t|=0.425$ (trait pointillé). Graphe extrait de la référence [78].

4.2 L'extrapolation à taille infinie

4.2.1 Premiers contacts

Les résultats numériques concernent obligatoirement des systèmes finis. Pour trouver \mathcal{D}_∞ , on porte les valeurs de \mathcal{D} pour des tailles L finies en fonction de $1/L$, puis on extrapole le comportement de la courbe. La valeur \mathcal{D}_∞ est donnée par là où la courbe croise l'axe des ordonnées.

La Figure 4.6 montre une extrapolation dans un cas simple. On choisit les unités de façon à ce que $t_h = 1$ et $\hbar = 1$. De ce fait, on a $v_F = 2$ et $\mathcal{D}_\infty^0 = \pi/2$. L'équation (4.7) devient simplement :

$$g = \sin^2(\mathcal{D}_\infty). \quad (4.15)$$

Pour faire l'extrapolation, on utilise en règle générale les 4 derniers points (ceux qui

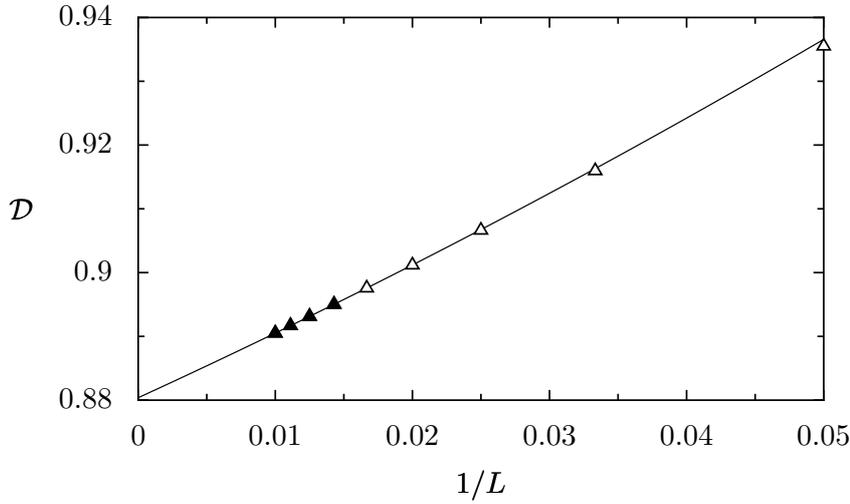


FIG. 4.6: Un exemple d'extrapolation de la raideur de charge dans un cas simple. $U = 2, V_g = 0, L_S = 6$. Les symboles sont les résultats numériques. La courbe, décrite par l'équation $\mathcal{D} = 0.880 + 0.99/L + 2.8/L^2$, correspond au meilleur ajustement de la parabole (4.16) aux points correspondant aux triangles pleins.

correspondent aux plus grandes tailles) que l'on « fit » avec la parabole :

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_\infty + \frac{A}{L} + \frac{B}{L^2} \quad (4.16)$$

où les paramètres ajustables sont \mathcal{D}_∞ , A et B . Au vu de la Figure 4.6 il ne fait aucun doute que l'extrapolation est de bonne qualité et la valeur trouvée $\mathcal{D}_\infty = 0.88$ nous donne la conductance $g = 0.59$.

Les points correspondant aux plus grandes tailles sont ceux pour lesquels le comportement asymptotique (4.16) est le plus valable (voir Annexe B). Le fait de limiter le processus d'ajustement à quatre points permet, en regardant comment les points non-inclus par le processus de fit sont proches ou pas de la parabole (4.16), d'évaluer qualitativement la qualité du fit (voir discussion plus bas).

Remarque : R. A. Molina *et al.* [78] utilisent un fit linéaire sur une échelle semi-logarithmique :

$$\log \mathcal{D} = \log \mathcal{D}_\infty + \frac{C}{L}. \quad (4.17)$$

Ce qui donne si on développe :

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_\infty + \frac{C\mathcal{D}_\infty}{L} + \frac{C^2\mathcal{D}_\infty}{2L^2} + \dots \quad (4.18)$$

Comparé à l'équation (4.16), les termes sont plus nombreux mais ne sont pas indépendants. En particulier (4.17) implique que $A/\mathcal{D}_\infty = 2B/A$, ce qui n'a pas de raison d'être vrai. Le fit (4.17) est valable lorsque le troisième terme du développement est négligeable (c'est-à-dire $B/L^2 \ll A/L$) comme c'est le cas dans l'exemple de la Figure 4.6. Dans des cas plus difficiles, R. A. Molina *et al.* [78] utilisent un fit parabolique en échelle semi-logarithmique, ce qui est quasiment équivalent au fit parabolique (4.16) que nous utilisons.

En dehors du cas le plus aisé, le fait d'avoir trois termes indépendants dans (4.16) permet de quantifier un peu la qualité de l'extrapolation. Dans le cas de l'exemple de la Figure 4.6, les quatre points pris en compte dans le processus de fit correspondent à des tailles L allant de 70 à 100 sites. Si on prend la taille moyenne ($L_0 = 85$), on peut calculer les différents termes du développement : $A/L_0 = 0.012$ et $B/L_0^2 = 0.0004$, et les comparer à $\mathcal{D}_\infty = 0.88$. Dans ce cas on peut qualifier l'extrapolation d'excellente puisque $\mathcal{D}_\infty \gg A/L_0 \gg B/L_0^2$.

Dans des circonstances plus difficiles (notamment près des résonances de transmission, comme nous allons le voir) il peut ne pas être aisé numériquement d'avoir des résultats à des tailles suffisamment grandes pour avoir une extrapolation d'aussi bonne qualité. Il est alors utile de développer une certaine intuition concernant la qualité de l'extrapolation et sa fiabilité, et ceci en sus d'une compréhension plus théorique des origines des difficultés posées à l'extrapolation (voir section 4.2.2). Nous donnons ici les règles empiriques que nous avons été amené à définir et que nous avons utilisées dans les calculs menant aux Chapitres suivants.

Il faut comparer \mathcal{D}_∞ , A/L_0 et B/L_0^2 pour un L_0 représentatif des points ayant participé au fit (comme nous l'avons fait pour l'exemple).

- * Si $\mathcal{D}_\infty \gg A/L_0 \gg B/L_0^2$, comme dans l'exemple, alors on est dans le cas idéal où un fit linéaire est déjà suffisant.
- * Dans certains cas, A/L_0 peut être du même ordre que B/L_0^2 , voire même plus petit. Si les deux sont néanmoins très petits devant \mathcal{D}_∞ , alors le fit choisi n'a pas d'importance. Il est même possible de prendre pour \mathcal{D}_∞ la valeur de \mathcal{D} pour le plus grand système calculé.
- * \mathcal{D}_∞ peut être du même ordre que A/L_0 , cela peut juste vouloir dire que la pente

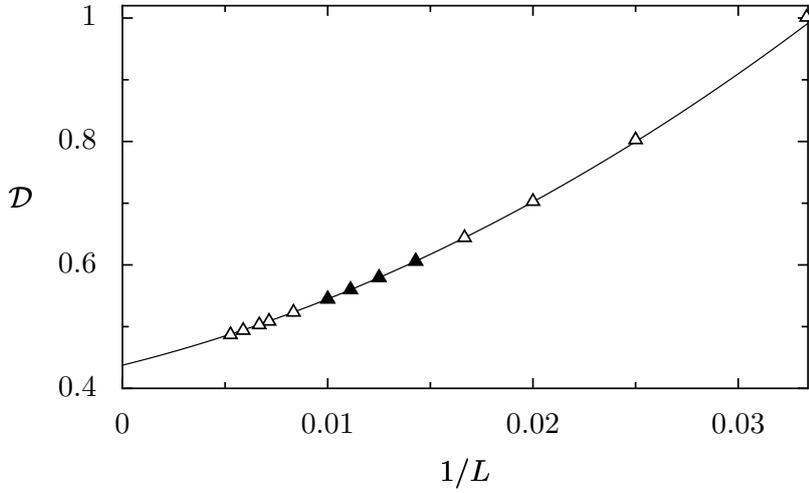


FIG. 4.7: Un exemple d'extrapolation de la raideur de charge dans un cas un peu plus difficile que celui de la Figure 4.6 : $U = 2, V_g = 3, L_S = 6$. Les symboles sont les résultats numériques. La courbe, décrite par l'équation $\mathcal{D} = 0.438 + 8.2/L + 251/L^2$, correspond au « fit » des points correspondant aux triangles pleins par la parabole (4.16).

avec laquelle \mathcal{D}_∞ est approché est forte, mais n'implique pas que l'extrapolation soit incorrecte. Si A/L_0 n'est par exemple que deux fois plus petit que \mathcal{D}_∞ , il faut bien vérifier que $B/L_0^2 \ll A/L_0$, sinon l'extrapolation est douteuse. Si c'est le cas, un fit linéaire est déjà suffisant.

- * Un fit pour lequel on aurait $\mathcal{D}_\infty L_0/A \simeq AL_0/B \simeq 4$ peut être considéré comme acceptable. Dans ce cas, on n'a pas $B/L_0^2 \ll A/L_0$ et donc le fit linéaire ne suffirait pas. Mais la décroissance constante de l'importance des termes donne bon espoir que le fit parabolique est suffisant.

Pour illustrer ce dernier point, regardons l'extrapolation de la Figure 4.7. Le fit fait pour des tailles de 70 à 100 sites ($L_0 = 85$) donne $\mathcal{D}_\infty = 0.438$, $A/L_0 = 0.097$ et $B/L_0^2 = 0.035$. Si on va plus loin en taille, \mathcal{D}_∞ oscille entre 0.433 et 0.436 selon le choix des points participant au fit. Cela donne une idée de l'incertitude introduite par l'extrapolation. On peut noter que le point correspondant au système le plus grand ($L = 190$, le point le plus à gauche sur la Figure 4.7) est $\mathcal{D} = 0.487$. Le résultat de l'extrapolation, même faite avec les points correspondants aux tailles $L = 70$ à 100 (triangles pleins sur la Figure 4.7), est bien meilleur.

4.2.2 D'où peuvent venir les difficultés

Pour justifier notre méthode et bien comprendre ce qui peut rendre l'extrapolation problématique, nous allons regarder un peu plus en détail, du point de vue théorique, le comportement de la raideur de charge. Dans cette discussion, on travaille avec une théorie à un corps. On suppose en effet que l'on regarde le comportement dans la limite de taille suffisamment grande pour que le comportement liquide de Fermi soit restauré dans le système global et que l'on puisse parler d'amplitude de transmission effective, même en présence d'interactions dans le nano-système.

Dans l'Annexe B on calcule les trois premiers termes du développement de la raideur de charge. Voici le résultat du calcul (équations (B.39) à (B.42)) :

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_\infty + \mathcal{D}^{(1)} + \mathcal{D}^{(2)} \quad (4.19)$$

$$\mathcal{D}_\infty = \frac{\hbar v_F}{2} \arcsin(|t(k_F)|) \quad (4.20)$$

$$\mathcal{D}^{(1)} = -\frac{1}{2L} \frac{d}{dk} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \delta\alpha \arcsin(|t|) \right)_{k=k_F} \quad (4.21)$$

$$\mathcal{D}^{(2)} = \frac{1}{4L^2} \frac{d^2}{dk^2} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arcsin(|t|) \left[\frac{1}{3} \arcsin^2(|t|) + \delta\alpha^2 - \frac{\pi^2}{4} \right] \right)_{k=k_F} \quad (4.22)$$

où $\delta\alpha = \alpha - kL_S$ (on rappelle que $t(k) = |t(k)|e^{i\alpha(k)}$).

Les équations (4.21) et (4.22) nous renseignent sur comment \mathcal{D}_∞ est approché à grande taille. Comme elles font intervenir les dérivées $d|t|/dk$ et $d\delta\alpha/dk$, on voit de suite que le développement peut poser problème à proximité de résonances, où ces dérivées peuvent être très grandes.

Pour fixer les idées, prenons le cas où le module de l'amplitude de transmission a la forme d'une lorentzienne de largeur caractérisée par Γ :

$$t = \frac{1}{1 - ik/\Gamma}. \quad (4.23)$$

La Figure 4.8 montre le module carré $|t|^2$ et la phase $\delta\alpha(k)$ correspondants.

On peut injecter (4.23) dans les équations (4.21) et (4.22) pour calculer les coefficients du développement (4.19). On obtient alors

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_\infty + \frac{a}{\Gamma L} + \frac{b}{(\Gamma L)^2} \quad (4.24)$$

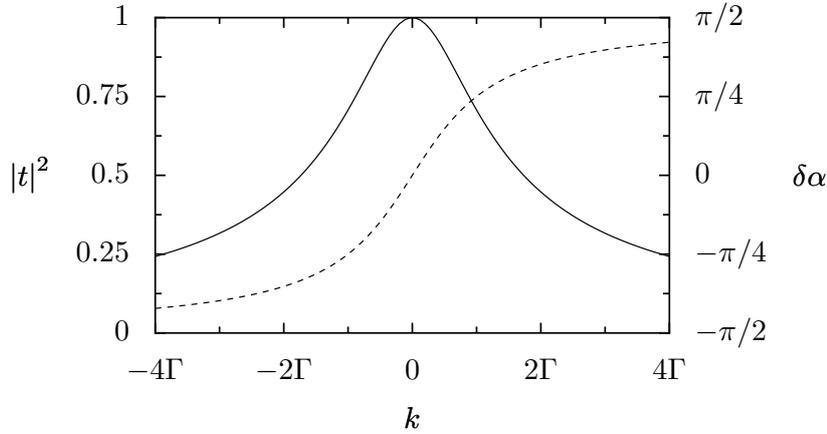


FIG. 4.8: Le module carré $|t|^2$ (trait plein, échelle de gauche) et la phase $\delta\alpha$ (trait pointillé, échelle de droite) en fonction de k lorsque l'amplitude de transmission est décrite par (4.23).

où les coefficients a et b dépendent de k_F et de Γ . La valeur de a et b évolue donc selon la position du vecteur d'onde de Fermi par rapport à la résonance. On peut calculer numériquement la valeur maximum que ces coefficients peuvent prendre en fonction de k_F . Ces valeurs maximales dépendent encore de la largeur Γ , mais quand cette dernière tend vers zéro, le calcul numérique montre que a et b tendent rapidement vers 0.2 et 1.5, respectivement.

Ayant vérifié que ces coefficients ne sont pas pathologiquement grands, on peut conclure que pour que le développement soit valide, il faut considérer des systèmes d'une taille plus grande que l'inverse de la largeur de la résonance :

$$L > \frac{1}{\Gamma}. \quad (4.25)$$

D'autre part, il est important de noter que le développement est fait à E_F fixé. Si dans la procédure numérique le niveau de Fermi dans le fil n'est pas bien défini et change avec L_L , alors le développement (4.19) perd sa signification.

Le premier facteur qui limite la définition de E_F est l'espacement fini entre les niveaux, qui est de l'ordre de $1/L$. À ce sujet on peut dire que $1/L$ agit un peu comme une température, dans le sens où il conditionne la résolution en énergie avec laquelle on peut espérer sonder le nano-système. On peut néanmoins éviter complètement ce problème en se plaçant à demi-remplissage avec L pair. Dans ce cas, si on a un système homogène ($V_g = 0$), il y a toujours un niveau à une particule qui est à l'énergie de Fermi ($E_F = 0$)

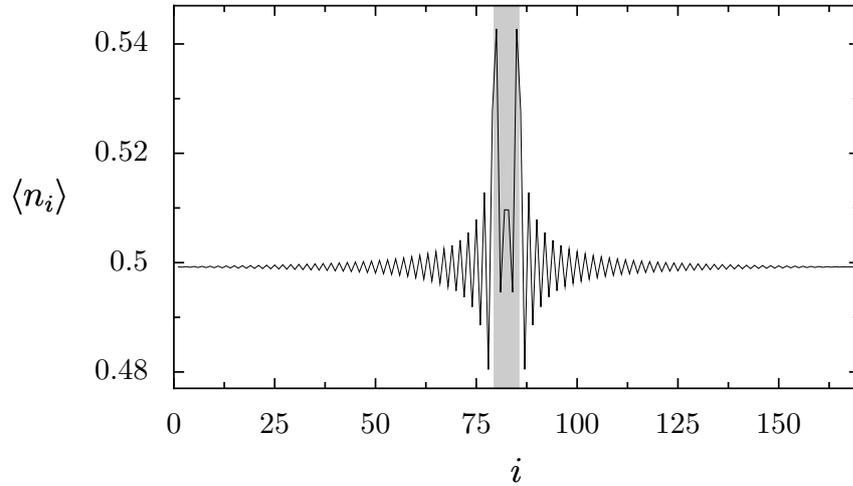


FIG. 4.9: Valeur moyenne de la densité électronique dans un anneau de 170 sites. Les $L_S = 6$ sites du nano-système ont été déplacés au milieu de la figure et sont dénotés par la région grisée. À l'extérieur, dans le fil de chaque côté, s'étendent des oscillations de Friedel.

grâce à la symétrie particule-trou.

Le problème majeur dans l'extrapolation survient en réalité dans les systèmes dont la répartition de la densité électronique n'est pas homogène ($V_g \neq 0$) puisque cela induit, comme nous allons le voir dans la section suivante, que le niveau de Fermi dans le fil dépend de L .

4.2.3 En densité inhomogène

Numériquement, nous avons accès à la valeur moyenne $\langle n_i \rangle$ sur le fondamental de l'opérateur densité électronique $n_i = c_i^\dagger c_i$ au site i . On définit le nombre moyen d'électrons dans le nano-système par

$$N = \sum_{i=1}^{i=L_S} \langle n_i \rangle. \quad (4.26)$$

La Figure 4.9 montre la répartition moyenne des électrons dans un anneau de 170 sites ($L_S = 6$, $V_g = 3$, $U = 10$, avec 85 particules). Pour ces paramètres, le nano-système attire une charge $\delta N = N - L_S/2 = 0.094$ supplémentaire. Le nano-système devient donc chargé et les électrons dans les fils se réorganisent pour écranter cette charge, donnant lieu à des oscillations de Friedel de part et d'autre du nano-système.

On constate que la valeur à laquelle se stabilise la densité loin du nano-système est inférieure à 0.5, puisque le fil a perdu δN électrons. Ce changement devient négligeable et le remplissage du fil tend vers 0.5 lorsque l'on augmente la taille de l'anneau. Cela signifie que le niveau de Fermi E_F dans le fil, directement lié à son remplissage, varie avec L . On peut noter $k_F(L)$ la valeur du vecteur d'onde de Fermi dans le fil (relié à E_F par la relation de dispersion $E = -2t_h \cos(k)$) pour un système de taille L . Dans le cas de demi-remplissage global, $k_F(L)$ tend vers $\pi/2$ lorsque L tend vers l'infini.

Comme le niveau de Fermi varie avec la taille L , le potentiel chimique du fil change et en conséquence le nombre moyen N d'électrons attirés dans le nano-système varie avec L . Ce n'est que pour une taille infinie que N atteint une valeur, que l'on note N_∞ , qui ne dépend plus de la taille du fil. On voit ainsi que N_∞ , tout comme \mathcal{D}_∞ , doit s'obtenir par une extrapolation (dont nous verrons des exemples sur la Figure 4.11).

Nous allons maintenant montrer comment le fait que le niveau de Fermi dans le fil dépend de la taille affecte l'extrapolation autour d'une résonance relativement étroite, avant de montrer comment on peut améliorer la méthode en corrigeant le remplissage du fil. La Figure 4.10 montre la résonance que nous allons considérer. L'origine physique de cette résonance et ses propriétés sont discutées au Chapitre 5. Ici, nous nous intéressons à la façon dont ce résultat a été techniquement obtenu, c'est-à-dire aux extrapolations autour et sur la résonance.

Comme k_F dépend de L , le développement (4.19) écrit pour un vecteur d'onde $k_F(L_0)$ pour une certaine taille L_0 ne peut décrire l'évolution de la fonction $\mathcal{D}(L)$ calculée numériquement que sur une certaine plage de longueurs autour de L_0 . Au fur et à mesure que la taille L_0 considérée augmente et que $k_F(L_0)$ tend vers $\pi/2$, les coefficients du développement décrivant $\mathcal{D}(L)$ changent jusqu'à atteindre leur valeur asymptotique pour une taille infinie. On note $\mathcal{D}_\infty^{L_0}(V_g)$ le premier coefficient de ce développement. On peut comprendre $\mathcal{D}_\infty^{L_0}(V_g)$ comme étant la valeur vers laquelle *semble* tendre \mathcal{D} à taille infinie lorsque l'on regarde le comportement de la fonction $\mathcal{D}(L)$ pour des tailles proches de L_0 .

Nous définissons ensuite la tension de grille effective V_g^* par $\mathcal{D}_\infty^{L_0}(V_g) = \mathcal{D}_\infty(V_g^*)$. L'idée derrière cette définition est la suivante : pour une taille finie, $N \neq N_\infty$ car le potentiel chimique du fil dépend de L . Or, la façon dont les électrons sont diffusés par le nano-système (et donc la valeur de \mathcal{D}) dépend fortement du nombre N d'électrons dans celui-ci. Donc finalement, la situation vue par les électrons au niveau de Fermi dans un système fini de taille L_0 (dans lequel $N \neq N_\infty$) est équivalente à celle d'un système

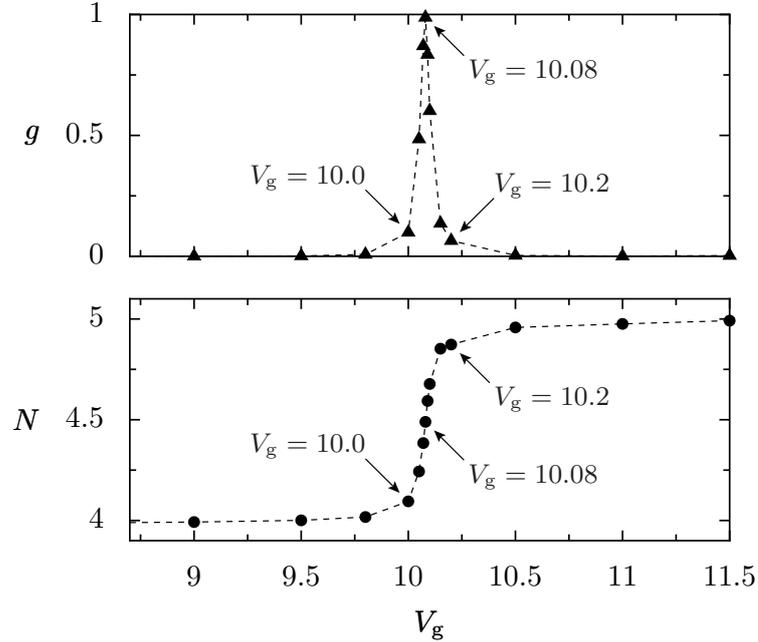


FIG. 4.10: Conductance $g = \sin^2(\mathcal{D}_\infty)$ et nombre moyen de particules N dans le nano-système en fonction de la tension de grille V_g pour $L_S = 6$ et $U = 10$. (ces résultats se retrouvent dans la Figure 5.1 du Chapitre 5)

infini dans lequel la tension de grille est ajustée à la valeur V_g^* nécessaire pour attirer exactement N électrons. On insiste sur le fait que V_g^* dépend de L_0 et qu'en particulier on a $\lim_{L_0 \rightarrow \infty} V_g^* = V_g$, où V_g est la tension de grille pour laquelle l'extrapolation est réalisée.

On voit ainsi que l'homogénéité du système complique le processus d'extrapolation. La gravité de la situation dépend en réalité de la rapidité de l'évolution du couple $(\mathcal{D}_\infty, N_\infty)$ en fonction de V_g . S'il évolue peu (de sorte que $\mathcal{D}_\infty(V_g^*) \sim \mathcal{D}_\infty(V_g)$), alors le fait que E_F ne soit pas parfaitement défini n'est pas très important. À proximité d'une résonance pointue, en revanche, la situation peut devenir plus compliquée.

Pour prendre un exemple, plaçons-nous à gauche de la résonance de la Figure 4.10, en $V_g = 10.0$. Pour une taille finie, la tension de grille effective V_g^* est plus petite que V_g , puisque le nano-système prend environ un électron au fil. À V_g^* correspondent des valeurs légèrement plus petites pour \mathcal{D}_∞ et N_∞ . Pour procéder à l'extrapolation, il faut donc considérer des systèmes d'une taille suffisamment grande pour que les coefficients \mathcal{D}_∞ , A et B du fit (4.16) ne changent plus (ou peu) lorsqu'on augmente L . On peut voir sur la Figure 4.11a que cela mène à une extrapolation plus difficile que dans le cas de la Figure 4.7.

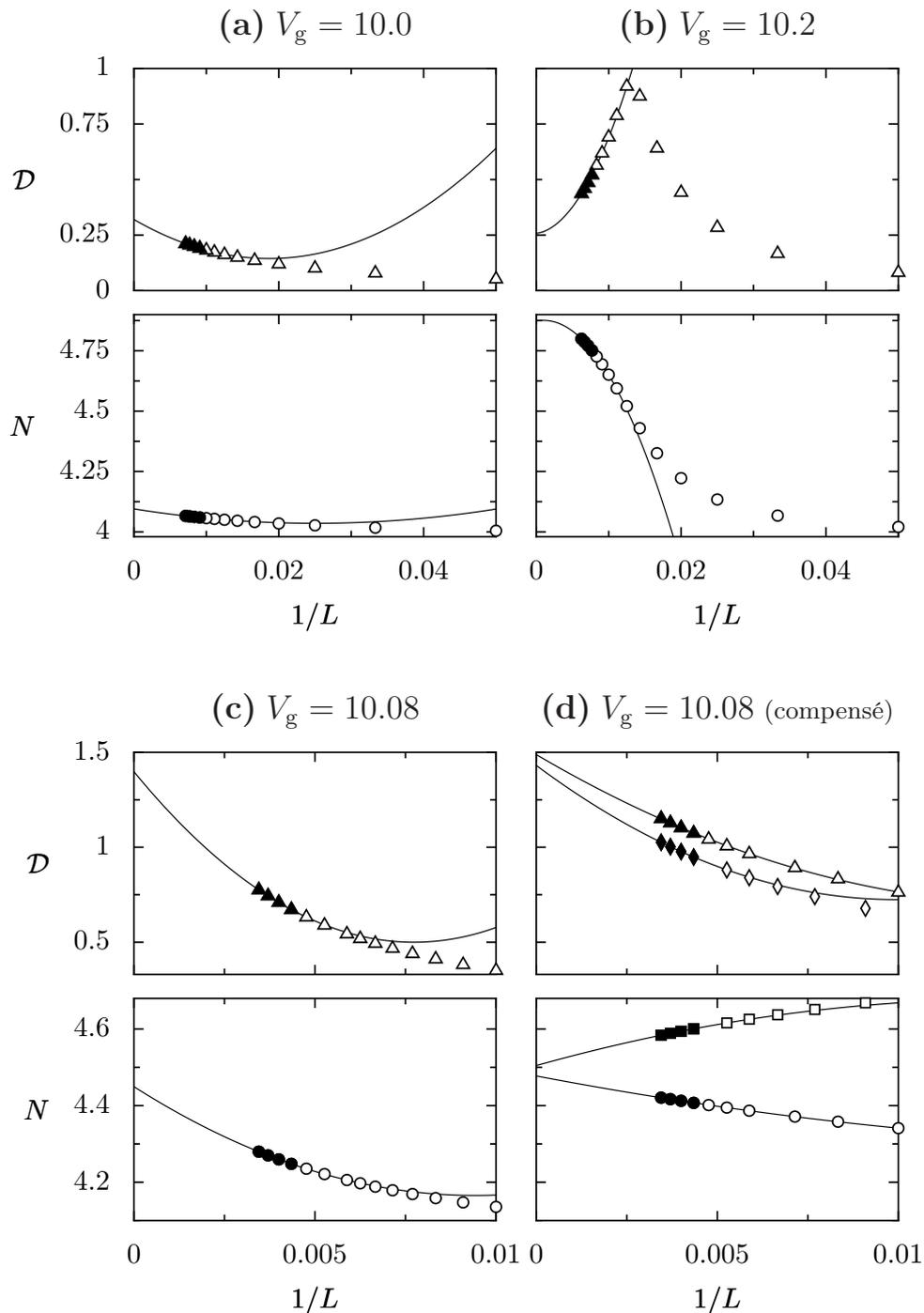


FIG. 4.11: Extrapolations (lignes pleines) et résultats numériques (symboles) pour la raideur de charge \mathcal{D} et le nombre N de particules dans le nano-système (a) à gauche, (b) à droite et (c) sur la résonance de la Figure 4.10. Seuls les symboles pleins sont pris en compte dans le processus de fit. Les extrapolations sur la résonance sont améliorées si on compense le remplissage (d) en ajoutant une (triangles et cercles) ou deux (losanges et carrés) particules au système global.

Si nous nous plaçons à droite de la résonance, en $V_g = 10.2$ par exemple, les choses sont pires encore. On peut voir en effet sur la Figure 4.11b qu'un comportement non-monotone apparaît en fonction de L . L'origine de ce comportement repose dans le fait que pour des tailles pas trop grandes, V_g^* se trouve inférieur à la tension de grille à la résonance (qui est proche de 10.08). Ainsi, lorsque L augmente, $\mathcal{D}_\infty(V_g^*)$ décrit plus ou moins l'ensemble de la résonance avant d'atteindre sa valeur limite pour $V_g = 10.2$. Par exemple, si l'on regarde $\mathcal{D}(1/L)$ aux alentours de $1/L_0 = 0.02$, \mathcal{D} semble tendre vers une valeur élevée à taille infinie. Dans l'image que nous utilisons, cela signifie que $V_g^*(L_0 = 1/0.02)$ vaut environ 10.08. Ce n'est que pour des valeurs de L_0 bien plus grandes que l'on peut voir que \mathcal{D}_∞ est en réalité relativement petit.

Ce comportement non-monotone peut être vraiment problématique puisqu'il engendre un risque que le résultat de l'extrapolation soit faux. Par exemple, alors que l'extrapolation à résonance ($V_g = 10.08$) de la Figure 4.11c semble raisonnable, celle, réalisée pourtant dans les mêmes conditions, pour un point se situant juste après la résonance ($V_g = 10.085$) donne une valeur pour \mathcal{D}_∞ qui est plus grande que $\pi/2$, ce qui est physiquement inacceptable. Si l'on n'a pas numériquement accès à des systèmes de tailles suffisamment grandes, il peut ainsi être particulièrement difficile de localiser avec précision une résonance et de mesurer sa hauteur.

On peut améliorer les choses en compensant le remplissage du fil. Cela peut se faire en ajoutant ΔN électrons au système global (bien sûr, ΔN doit être entier). Dans notre exemple, on prend $\Delta N = 1$ pour des valeurs de V_g inférieures à la tension de grille à résonance, et $\Delta N = 2$ pour des valeurs supérieures.

Grâce à cette correction du remplissage, le niveau de Fermi atteint plus facilement sa valeur asymptotique, et l'extrapolation s'en trouve de meilleure qualité. On peut comparer la situation avec et sans compensation en regardant les graphes (c) et (d) de la Figure 4.11. On voit sur le premier graphe de (d) que la parabole obtenue pour $\Delta N = 1$ passe par davantage de points que celle sur le premier graphe de (c), ce qui signifie que l'extrapolation est plus fiable.

Pour $\Delta N = 2$, donc lorsque l'on est à droite de la résonance, c'est cette fois un surplus d'électrons que le nano-système laisse au fil. Pour un système fini on a donc V_g^* supérieur à V_g . Comme on peut le voir sur la Figure 4.11d, cela change le côté duquel la résonance est approchée. C'est particulièrement flagrant pour l'extrapolation de N . Le fait de pouvoir choisir de quel côté la valeur V_g souhaitée est approchée par V_g^* lorsque L_0 augmente permet de s'affranchir du comportement non-monotone. Avec

$\Delta N = 2$, on peut ainsi par exemple faire l'extrapolation pour la valeur de tension de grille $V_g = 10.085$ dans de bonnes conditions, et obtenir un résultat quantitativement correct sans considérer des systèmes de tailles plus grandes.

Le couple de graphes (d) de la Figure 4.11, plus que le couple (c), permet de conclure que $V_g = 10.08$ est très proche de la tension de grille à résonance. Le fait que l'extrapolation de \mathcal{D}_∞ semble un peu moins bonne pour $\Delta N = 2$ que pour $\Delta N = 1$, ainsi que le fait que la moyenne des deux extrapolations de N_∞ est inférieure à 4.5 suggère que l'on est encore légèrement à gauche de la résonance. Pour ce qui est des valeurs de \mathcal{D}_∞ et N_∞ retenues pour $V_g = 10.08$, on prend la moyenne des deux extrapolations de la figure d.

De cette façon, la méthode de la boucle est capable de déterminer relativement efficacement et avec une précision relativement bonne l'amplitude de transmission d'un nano-système comportant des résonances pas trop pointues.

4.2.4 Remarque sur la pente de l'extrapolation

Pour clore cette section sur l'extrapolation, nous discutons brièvement la pente de l'extrapolation dans le cas particulier d'interaction très forte pour L_S pair.

On peut obtenir la pente de la courbe $\mathcal{D}(1/L)$ dans la limite $L \rightarrow \infty$ à partir de l'équation (B.41) de l'Annexe B. En gardant à l'esprit que dans notre modèle, pour $k_F = \pi/2$, on a $d\epsilon/dk_{k_F} = 2$ et que la seconde dérivée est nulle, et en supposant que lorsque $U \gg 1$, $|t| \ll 1$, on peut écrire la pente

$$-\left(\frac{d\delta\alpha}{dk} + \delta\alpha \frac{1}{|t|} \frac{d|t|}{dk}\right)_{k=k_F}. \quad (4.27)$$

Or la règle de somme de Friedel [130, 131] permet de relier la phase α au nombre de particules dans le nano-système, qui se trouve être fixé par l'isolant de Mott à $L_S/2$. On a donc $\alpha(k) = \pi L_S/2$ qui ne dépend pas de k , et on obtient

$$\delta\alpha(k) = \left(\frac{\pi}{2} - k\right) L_S, \quad (4.28)$$

ce qui donne simplement L_S pour la pente de l'extrapolation.

Or des résultats numériques pour $L_S = 2$ et $L_S = 4$ semblent converger vers une pente

différente, qui pourrait être $L_S - 1$ (les valeurs très petites de \mathcal{D} et l'incertitude numérique ne permettent pas d'être concluant). Ce désaccord a été remarqué initialement par R. A. Molina et collaborateurs.

L'explication de ce désaccord repose probablement dans le fait qu'une partie des électrons déplacés par le nano-système se trouve dans les fils sous forme d'oscillations de Friedel. Pour $k_F = \pi/2$, le demi-remplissage est assuré partout et l'ensemble du système est homogène. Mais pour $k \neq \pi/2$, même si l'interaction infinie impose $L_S/2$ particules dans le nano-système, il apparaît en plus une charge dans les fils sous forme d'oscillation de Friedel. L'apparition de cette charge s'accompagne d'une contribution à la dérivée $d\delta\alpha/dk$, qui a pour effet de diminuer la pente. Bien qu'il soit difficile d'être quantitatif, nous pensons que ceci est à l'origine du désaccord observé.

4.3 Conclusion du Chapitre 4

Nous avons dans ce Chapitre décrit en détail la méthode de la boucle qui, à partir de données obtenues à l'aide de l'algorithme DMRG, permet de déterminer la conductance d'un système en interaction en prenant en compte toutes les corrélations. Pour conclure, nous discutons brièvement les limitations de la méthode.

Tout d'abord, la conductance obtenue l'est en réponse linéaire et dans la limite de température nulle. Prendre en compte les effets d'une température finie est souhaitable mais jusqu'à maintenant pas à l'ordre du jour. En revanche, une approche développée récemment et basée sur un algorithme DMRG dépendant du temps [132], permet d'obtenir la conductance non-linéaire et donc de tracer la caractéristique courant-tension.

Hormis ces limitations de régime, la contrainte la plus sérieuse de la méthode est que les fils connectant le nano-système aux réservoirs doivent être purement unidimensionnels (c'est-à-dire ne comporter qu'un seul canal ouvert). Ceci est nécessaire en vu de pouvoir remonter au module de l'amplitude de transmission, connaissant seulement le courant permanent.

Dans le cas multi-canaux, une proposition récente [133] (pour des systèmes sans interaction) suggère de calculer numériquement des courants permanents pour diverses configurations dans lesquelles seuls deux canaux du nano-système sont reliés l'un à l'autre par un fil sans interaction, tous les autres canaux étant laissés ouverts. L'idée est d'obtenir suffisamment d'information pour remonter aux différentes amplitudes de transmission.

Cependant, les relations donnant le courant permanent en fonction des coefficients de la matrice de diffusion du nano-système pour les différentes configurations semblent difficile à inverser, et pour l'instant l'application de la méthode de la boucle semble être limitée à des nano-systèmes couplés aux fils par un seul canal.

Une des implications de cette contrainte de canal unique est qu'il faut considérer des systèmes d'électrons sans spin, puisqu'autrement il y a au minimum deux canaux : un pour chaque direction de spin. Néanmoins, le cas de un canal avec spin est plus simple que celui de deux canaux sans spin, et une hypothèse simplificatrice permet d'étendre la méthode de la boucle à ces systèmes, comme nous le verrons dans le Chapitre 6.

Chapitre 5

Blocage de Coulomb sans barrières de potentiel

“You can check out anytime you like, but you can never leave.”

— Don Henley, *Hotel California* (The Eagles)

5.1 Introduction

Dans ce Chapitre, on utilise la méthode de la boucle, décrite dans le Chapitre précédent, pour étudier l’effet des corrélations électroniques sur la conductance à travers un nano-système dont la densité électronique peut être modulée et qui est parfaitement couplé aux fils.

Comme nous avons vu dans le Chapitre 1, un ingrédient crucial pour le blocage de Coulomb est la présence d’interactions Coulombiennes entre les électrons. L’énergie de charge doit être bien plus grande que l’énergie $k_B T$ associée à l’agitation thermique ou que celle eV associée à la tension V appliquée. Depuis le début de la physique du blocage de Coulomb, il a été naturel de considérer des boîtes quantiques presque isolées. Une façon pratique d’obtenir une telle situation est de les connecter avec des barrières tunnel. Différentes études ont été ensuite entreprises (voir Chapitre 2) pour étudier comment les oscillations caractéristiques du blocage de Coulomb disparaissent quand la boîte quantique devient mieux couplée aux réservoirs.

Nazarov a notamment montré que la quantification de la charge peut subsister dans des boîtes quantiques connectées aux réservoirs par des conducteurs arbitraires [34], comme des fils métalliques désordonnés en lieu et place des barrières tunnel, pour peu que les accès aient toujours une conductance G_B petite devant G_0 . Si en revanche ne serait-ce qu'un canal est parfaitement transparent, l'énergie de charge effective s'annule et aucun effet de charge finie ne peut être observé même à température nulle.

Dans ce contexte, il est crucial de faire la différence entre transmission parfaite et contact parfait. En effet, tout comme la conductance d'une boîte quantique, la transmission d'un accès (une barrière tunnel, un contact point, un fil métallique désordonnée) est une quantité qui doit être mesurée entre deux réservoirs. Dès lors que l'accès est placé entre un réservoir et une boîte quantique, la transmission de cet accès, fut-elle parfaite, peut ne plus être une quantité pertinente, puisqu'un électron traversant l'accès peut être rétro-diffusé de façon cohérente à l'intérieur de la boîte quantique.

Dans des travaux récents [116, 117] la cohérence et les possibilités de rétro-diffusion au sein de la boîte ont été prises en compte correctement. Le résultat principal est que la correction due aux interactions à la conductance moyenne dans le cas de contacts idéaux (c'est-à-dire quand tous les canaux sont soit complètement ouverts soit complètement fermés) est nulle. Cette conclusion semble en accord avec les résultats d'une expérience menée sur de relativement grandes boîtes chaotiques [119].

La tendance expérimentale actuelle est aux échantillons de plus en plus petits. Or les interactions électroniques sont plus importantes dans les systèmes à dimensionalité réduite (voir section 1.2) et de petite taille. Récemment, du blocage de Coulomb a été observé avec de très petits MOSFETs dans lesquels il n'y a pas de barrières tunnel construites délibérément [32, 33]. Dans ces échantillons, il est probable que le blocage de Coulomb soit dû soit à des accès désordonnés, soit à l'apparition de barrières de potentiel électrostatiques avec la tension de grille. Néanmoins, ce genre d'observation rend intéressante la question de savoir si de mauvais contacts sont vraiment nécessaires pour obtenir du blocage de Coulomb. Pour la taille des boîtes quantiques étudiées, on s'attend en effet à ce que les interactions jouent un rôle crucial. La question qui se pose est donc : le blocage de Coulomb peut-il avoir lieu avec des contacts parfaits, et donc provenir seulement des corrélations électroniques ?

Pour répondre à cette question, il est nécessaire d'aller au-delà du traitement usuel de l'interaction dans la boîte, basé dans la plupart des travaux menés jusqu'à présent sur une énergie de charge constante.

Des modèles microscopiques de chaînes attachées à des fils semi-infinis ont été étudiés très récemment [132, 134, 135]. Pour des contacts bons (mais pas parfaits), il ressort que des caractéristiques du blocage de Coulomb sont renforcés par les interactions. Dans la limite d'un très fort couplage entre nano-système et fils, une étude numérique et des arguments analytiques [136] montrent que, même en l'absence d'interaction, un chargement discret (qui est une des caractéristiques du blocage de Coulomb) du nano-système peut avoir lieu, avec un nombre d'états liés qui dépend du nombre de canaux ouverts. Cependant, la limite de fort couplage semble difficile à obtenir expérimentalement, étant donné qu'elle nécessite d'avoir plusieurs niveaux quasi-dégénérés afin d'avoir un espacement moyen effectif très petit.

Dans ce Chapitre on présente une étude d'un modèle microscopique pour une boîte quantique (ou nano-système) dans laquelle les électrons interagissent fortement. On utilise la méthode de la boucle afin de prendre en compte toutes les corrélations dues à l'interaction électron-électron. Cette étude montre que le blocage de Coulomb peut apparaître même en présence de contacts parfaits, ce qui peut avoir des applications importantes en nano-électronique.

Le développement de ce Chapitre suit essentiellement celui de la référence [137]. Les résultats numériques sont tout d'abord présentés dans la section 5.2. Ces derniers montrent comment le blocage de Coulomb apparaît au fur et à mesure que l'intensité de l'interaction augmente, même en l'absence de barrières de potentiel dans les accès. Les caractéristiques des pics et des vallées sont ensuite analysées en détail dans la section 5.3 à l'aide d'une approche en perturbation à faible transmission, valable à interaction forte. Dans la section 5.4, on explore l'effet du lissage des contacts, afin de tester la robustesse du résultat exposé précédemment pour des systèmes plus réalistes. Enfin, dans la dernière section, les résultats sont résumés et leurs implications, ainsi que les possibles extensions du modèle utilisé pour se rapprocher des dispositifs expérimentaux actuels, sont discutés.

5.2 Oscillations de conductance en fonction de la tension de grille

On étudie le système schématisé sur la Figure 4.3 dont on rappelle l'Hamiltonien :

$$H = H_K + H_U + H_G. \quad (5.1)$$

Le système est constitué d'une chaîne unidimensionnelle infinie

$$H_K = - \sum_{i=-\infty}^{\infty} (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.) \quad (5.2)$$

au milieu de laquelle une région longue de L_S sites est le siège d'une interaction (d'intensité U) entre proches voisins

$$H_U = U \sum_{i=1}^{L_S-1} (\hat{n}_i - 1/2)(\hat{n}_{i+1} - 1/2) \quad (5.3)$$

et où une tension de grille V_g permet d'attirer des électrons

$$H_G = -V_g \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_i. \quad (5.4)$$

La Figure 5.1 montre l'évolution de la conductance sans dimension g , ainsi que du nombre moyen N de particules à l'intérieur du nano-système (de $L_S = 6$ sites), en fonction de la tension de grille V_g , pour différentes valeurs de l'interaction U . Les symboles correspondent aux résultats obtenus avec la méthode de la boucle (Chapitre 4). Les extrapolations, pour être satisfaisantes, ont parfois requis le calcul de la raideur de charge pour des anneaux d'une taille allant jusqu'à 300 sites au total (ce qui représente un espace de Hilbert d'environ 10^{89} dimensions). Pour des systèmes si grands, on a retenu jusqu'à $N_c = 1000$ états dans le processus DMRG.

Le cas sans interaction ($U = 0$, Figure 5.1a) correspond simplement à une chaîne de particules libres avec un puits de potentiel de longueur L_S et de profondeur V_g . La dépendance de la conductance en V_g peut se comprendre à l'aide d'une simple théorie à un corps. Dans l'Annexe C, on calcule en détail l'amplitude de transmission $t(E_F) = |t|e^{i\alpha}$.

Lorsque $V_g \leq 2$ et pour $E_F = 0$, on obtient pour la conductance (équation (C.13)) :

$$|t(k_F)|^2 = \left(\cos^2(k_g L_S) + \frac{\sin^2(k_g L_S)}{\sin^2(k_g)} \right)^{-1} \quad (5.5)$$

où on a défini le vecteur d'onde $k_g = \arccos\left(-\frac{V_g}{2}\right)$. La conductance obtenue par la méthode de la boucle à partir des calculs DMRG est en parfait accord avec cette formule.

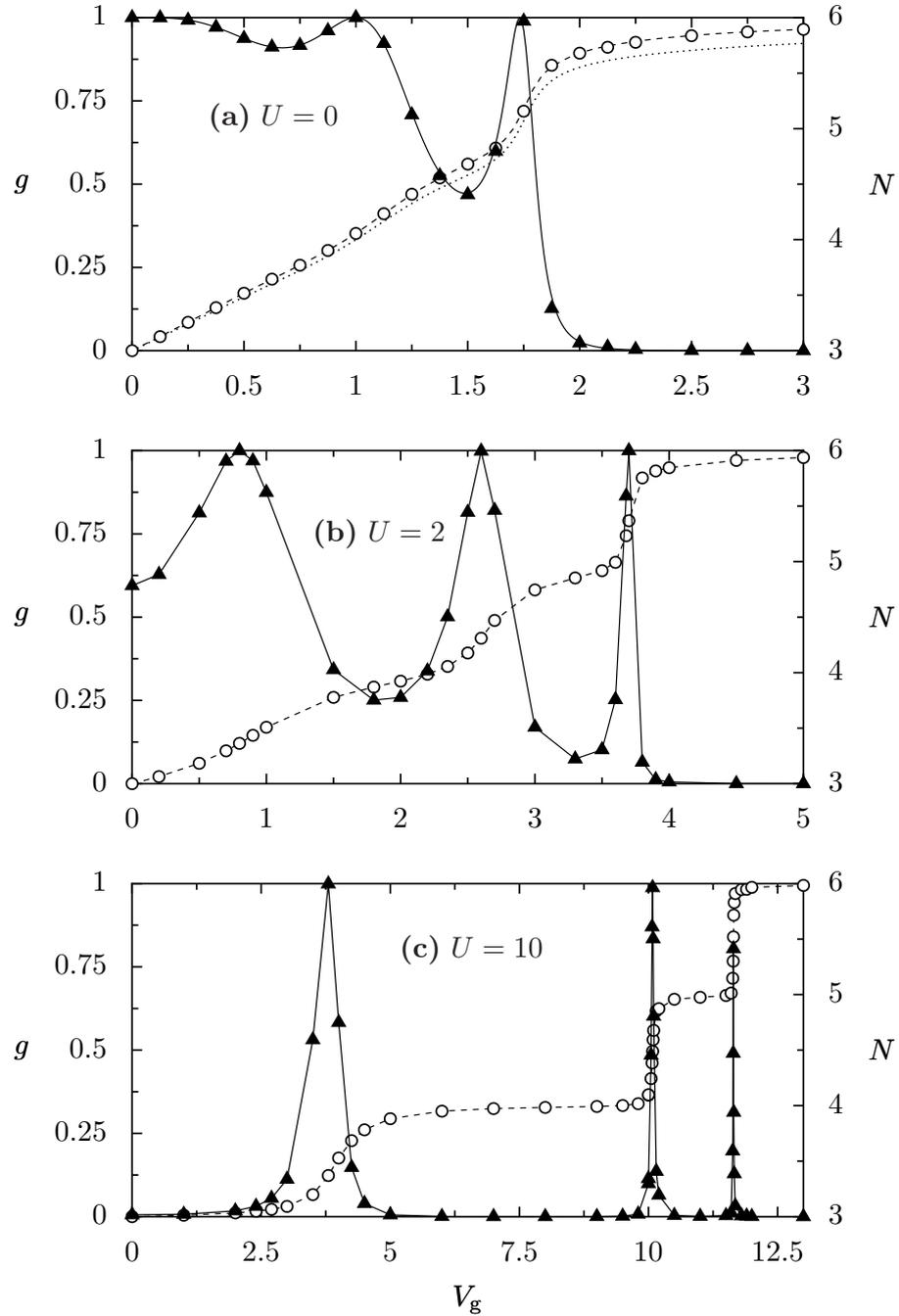


FIG. 5.1: Conductance sans dimension g (triangles) et nombre moyen de particules dans le nano-système (de $L_S = 6$ sites) N (cercles) obtenus numériquement par la méthode de la boucle (voir Chapitre 4), en fonction de la tension de grille V_g **(a)** en l'absence d'interaction, **(b)** pour $U = 2$ et **(c)** pour $U = 10$. Dans le cas $U = 0$ **(a)**, g peut être calculé analytiquement (trait plein, (5.5)). La règle de somme de Friedel (ligne pointillée, (5.6) et (5.7)) donne N approximativement. Un calcul numérique à un corps (tirets) confirme les points DMRG. Dans **(b)** et **(c)** les lignes relient simplement les symboles.

D'autre part, la phase

$$\alpha(k_F) = \arctan \left(\frac{\sin(k_g L_S)}{\sin(k_g) \cos(k_g L_S)} \right) + \frac{\pi}{2} L_S \quad (5.6)$$

associée à l'amplitude de transmission, obtenue à partir de l'équation (C.14), peut être reliée au nombre moyen de particules occupant le nano-système N par la règle de somme de Friedel [130, 131]

$$N_d = \alpha/\pi, \quad (5.7)$$

où N_d est le nombre de particules *déplacées* par le nano-système. N_d ne donne le nombre N de particules à *l'intérieur* du nano-système que dans le cas d'un système de densité électronique homogène. Cela explique l'apparition d'une déviation entre le résultat des équations (5.6) et (5.7) (ligne pointillée dans la Figure 5.1a) et les points numériques lorsque l'on augmente la tension de grille V_g . Dans ce cas, une partie de la charge déplacée par le nano-système se trouve dans les fils, sous la forme d'oscillations dites de Friedel (voir section 4.2.3). Pour palier à ce problème, nous avons calculé N numériquement à partir de l'Hamiltonien à un corps (Figure 5.1a, tirets) pour trouver un accord parfait avec les points DMRG.

Dans l'Annexe C, on effectue une vérification encore plus fine du fonctionnement correct du programme DMRG ainsi que de la méthode de la boucle en vérifiant que les équations obtenues dans l'Annexe B donnent le comportement correct dans la limite de grande taille, pour des résultats à tailles finies. L'ensemble de ces vérifications, effectuées pour $U = 0$, constituent un test important pour la méthode numérique, puisque l'absence d'interaction ne constitue pas une situation spéciale pour l'algorithme DMRG.

Ayant vérifié que l'on comprenait bien le comportement du système sans interaction, on peut maintenant brancher l'interaction. Quand on augmente l'intensité de cette dernière, on voit apparaître clairement une structure de pics dans la courbe de conductance en fonction de V_g . L'interaction électron-électron supprime la conductance entre les pics et les pics deviennent de plus en plus étroits. Cette tendance se devine déjà pour l'interaction modérée $U = 2$ (Figure 5.1b) et devient tout à fait claire à interaction forte $U = 10$ (Figure 5.1c).

Pour des contacts symétriques, dans un problème à un corps, la conductance à résonance atteint l'unité [2]. Ici, il semble que cela soit le cas dans notre problème fortement corrélé. La quantité limitée de données numériques, ainsi que l'incertitude provenant

de l'extrapolation, ne nous permet cependant pas d'être formel sur ce point (voir Figure 5.1c).

L'apparition de pics bien définis dans la courbe $g(V_g)$ s'accompagne de la formation de marches dans la courbe $N(V_g)$ du nombre moyen de particules dans le nano-système. Les plateaux apparaissent à des valeurs entières de N et les marches coïncident avec la position des pics de conductance.

Bien que le nano-système est parfaitement connecté aux fils, ces structures dans $g(V_g)$ et $N(V_g)$ sont clairement dues au phénomène de blocage de Coulomb. Dans les vallées le nombre d'électrons dans le nano-système est fixé et la conductance bloquée. Ce n'est qu'aux résonances, lorsqu'un point de dégénérescence est atteint, que le nombre N peut fluctuer, permettant aux électrons de traverser le nano-système. Cela montre que le nano-système devient, d'une manière *effective*, découplé des fils, sous l'effet de l'interaction. Le mécanisme sous-jacent est discuté dans les sections qui suivent. En particulier, on montre dans la section 5.3.3 que lorsque l'interaction est suffisamment forte, la position des pics peut être prédite avec précision à partir des énergies du nano-système isolé pour différentes valeurs de N .

Des conclusions similaires ont été tirées d'études numériques d'une chaîne de 7 sites, mais connectée aux fils par un élément de matrice de saut réduit. [135, 132]. Dans ce cas, une évaluation de la formule de Kubo à l'aide de DMRG et une étude DMRG de la dynamique en temps réel ont été réalisées et montrent un renforcement des caractéristiques du blocage de Coulomb lorsque l'interaction augmente. Inclure le degré de liberté du spin mène à l'apparition de plateaux de conductance dans le régime Kondo. Une étude numérique du groupe de renormalisation (NRG pour *Numerical Renormalization Group*) d'une chaîne de Hubbard de quatre sites avec une interaction modérée et des éléments de couplage avec les fils réduits [138], montre que les plateaux Kondo s'émousent lorsque le couplage aux fils est augmenté.

Étant donné que l'Hamiltonien entier est symétrique si on remplace les particules par des trous tout en changeant le signe de la tension de grille, les résultats pour des tensions de grille négatives peuvent être obtenues directement à partir des données de la Figure 5.1. La conductance est symétrique, $g(-V_g) = g(V_g)$ et le nombre de particules s'obtient par $N(-V_g) = L_S - N(V_g)$. Ainsi, pour $L_S = 6$ sites, on a un total de 6 pics de conductance, avec N augmentant de 0 à 6 par pas de 1. Pour des systèmes plus grands, on s'attend donc à des résultats qualitativement similaires avec L_S pics et L_S marches. Dans le cas où L_S est un nombre impair, on a un nombre impair de pics et la

symétrie impose la présence d'un d'entre eux en $V_g = 0$. Cela explique les oscillations en fonction de la parité de L_S dans la conductance d'une chaîne en interaction sans tension de grille [82] discutées en détails dans la référence [86]. Les oscillations de conductance avec la longueur de la région corrélée sont une caractéristique très générale des chaînes en interaction. Un calcul perturbatif en interaction [94] suggère leur présence également dans les chaînes de Hubbard. Elles peuvent également être reliées à des oscillations de même type observées expérimentalement dans des chaînes monoatomiques [87].

5.3 Approche perturbative à interaction forte

5.3.1 Introduction du formalisme

Pour comprendre la physique des résultats que l'on a obtenu, nous pouvons faire une étude analytique du modèle, essentiellement dans le régime d'interaction forte.

Le comportement observé sur la Figure 5.1, et discuté dans la section précédente, suggère que le nano-système devient découplé des fils lorsque l'intensité de l'interaction électron-électron augmente. Nous allons montrer que c'est effectivement le cas. Pour ce faire, nous traitons la conductance à travers le système à l'aide de la règle d'or de Fermi. C'est une approche valable lorsque le couplage effectif entre le nano-système et les fils est petit.

Le point de départ est le nano-système isolé des fils. Le couplage entre le nano-système et les fils est ensuite traité comme une perturbation. On définit l'Hamiltonien de couplage :

$$H_C = -(c_0^\dagger c_1 + h.c.) - (c_{L_S}^\dagger c_{L_S+1} + h.c.). \quad (5.8)$$

Nous allons maintenant évaluer la contribution à la conductance de notre système à l'ordre le plus bas en H_C . Si les éléments de matrice de H_C impliqués sont petits (devant U , voir plus loin), la conductance sera dominée par ce terme.

La conductance résulte de la transmission des électrons à travers le système. On commence donc avec la règle d'or de Fermi pour le taux de transition

$$\gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{f,i}|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (5.9)$$

d'une particule à travers le nano-système. L'état initial

$$|i\rangle = |k^{\text{gauche}}\rangle \otimes |0(N)\rangle \quad (5.10)$$

est un produit tensoriel d'états construits à partir d'états propres du nano-système isolé et des fils semi-infinis isolés. Ici, nous prenons pour le nano-système son fondamental à N particules dénoté par $|0(N)\rangle$ et une particule supplémentaire (au-dessus de la mer de Fermi) avec un vecteur d'onde k dans le fil de gauche, que l'on note $|k^{\text{gauche}}\rangle$. Dans l'état final

$$|f\rangle = |0(N)\rangle \otimes |k^{\text{droite}}\rangle \quad (5.11)$$

la particule supplémentaire se retrouve du côté droit, laissant le nano-système dans son fondamental à N particules. L'élément de transition effectif est du second ordre en H_C et peut être écrit

$$M_{f,i} = \sum_{\alpha} \frac{\langle i|H_C|\alpha\rangle\langle\alpha|H_C|f\rangle}{E_i - E_{\alpha}}. \quad (5.12)$$

La somme décrit tous les états intermédiaires $|\alpha\rangle$ correspondant aux états de la chaîne avec $N + 1$ particules dans le nano-système et la mer de Fermi dans les fils ou bien aux états de la chaîne avec $N - 1$ particules dans le nano-système et une particule au-dessus de la mer de Fermi dans chaque fil.

Pour obtenir le courant, il faut sommer le taux de transition (5.9) sur les états initiaux et finaux et multiplier par la charge e . Pour les états initiaux, on somme sur les états inclus dans un petit intervalle d'énergie au-dessus de l'énergie de Fermi, correspondant à une tension V :

$$I = \int_{E_F}^{E_F+eV} \rho(E_i)dE_i \int \rho(E_f)dE_f e\gamma_{i\rightarrow f}, \quad (5.13)$$

où $\rho(E)$ est la densité d'états dans les fils. En supposant V infinitésimale, on obtient la conductance :

$$g = \frac{I}{V} \frac{h}{e^2} = 4\pi^2 \rho(E_F)^2 |M_{f,i}|^2. \quad (5.14)$$

L'approche est justifiée lorsque le couplage effectif, donné par les éléments de matrice dans l'équation (5.12) est petit. C'est le cas lorsque U est grand et que le dénominateur

est grand, même si les contacts sont parfait et que H_C n'est pas spécialement petit. De plus, les éléments de matrice de H_C peuvent être réduits par l'interaction, puisque celle-ci induit une modification de la forme des fonctions d'onde dans le nano-système.

5.3.2 Conductance en régime de forte interaction

Dans la limite d'interaction forte, $U \gg 1, V_g$, l'état fondamental du nano-système isolé pour un nombre L_S pair de sites avec demi-remplissage ($N = L_S/2$) est donné par une onde de densité de charge (ou isolant de Mott, où les particules occupent un site sur deux). Dans ce cas, nous pouvons évaluer $M_{f,i}$, et ainsi obtenir la conductance (5.14) dans la vallée de conductance correspondante.

Dans cette section, nous traitons non seulement le couplage entre le nano-système et les fils, mais aussi tous les termes de saut de l'Hamiltonien H_K , comme une perturbation du reste de l'Hamiltonien de la chaîne $H_0 = H_U + H_G$. Cela correspond à un développement en $1/U$ et suit l'esprit des développements à grand U du courant permanent présentés dans la référence [139].

En l'absence de H_K , les deux réalisations de l'isolant de Mott avec les particules sur les sites pairs $|\psi_0^p\rangle = c_2^\dagger c_4^\dagger \dots c_{L_S}^\dagger |0\rangle$ et sur les sites impairs $|\psi_0^i\rangle = c_1^\dagger c_3^\dagger \dots c_{L_S-1}^\dagger |0\rangle$ sont dégénérés. Ils deviennent couplés à l'ordre N en H_K . La dégénérescence est donc levée même si $1/U$ est infinitésimale, et le fondamental est donné par la superposition symétrique (le couplage effectif est $-(1/U)^{L_S/2}$)

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_0^p\rangle + |\psi_0^i\rangle). \quad (5.15)$$

Dans les fils, H_K crée des ondes planes comme états propres, avec la condition de bords que, à cause du gap de l'isolant de Mott (de l'ordre de U), leur fonction d'onde s'annule (comme $1/U$) sur le premier site en interaction. Pour des fils de taille L de chaque côté du nano-système, cela donne les états à une particule d'énergie $\epsilon_k = -2 \cos(k)$ et de fonctions d'onde $\langle i|k^{\text{gauche}}\rangle = \sqrt{2/L} \sin(k(1-i))$ du côté gauche ($i < 1$) et $\langle i|k^{\text{droite}}\rangle = \sqrt{2/L} \sin(k(i-L_S))$ du côté droit ($i > L_S$) de la région en interaction.

Le transport à température nulle à travers la région en interaction de la chaîne requiert que les particules soient transmises de façon élastique. Par conséquent, nous cherchons les processus d'ordre le plus bas en $1/U$ qui relient l'état initial $|i\rangle = |k^{\text{gauche}}\rangle \otimes |\psi_0\rangle$ à l'état final $|f\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |k^{\text{droite}}\rangle$. Ces processus sont ceux dans lesquels la composante

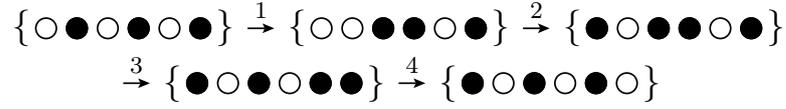


FIG. 5.2: Exemple de séquence de $L_S/2 + 1 = 4$ sauts qui relie les deux composantes du fondamental (5.15) du nano-système isolé. Les cercles pleins représentent les sites occupés par un électron. Dans cet exemple, une particule entre du fil gauche dans le second saut et une autre sort dans le fil droite dans le dernier saut.

$|\psi_0^p\rangle$ du fondamental (5.15) du nano-système est reliée à la composante $|\psi_0^i\rangle$ par des séquences de $N + 1$ sauts (d'une particule) successifs. Dans un tel processus, chacune des N particules dans le nano-système saute sur le site suivant, et donc celle qui était initialement sur le site L_S quitte la région pour le fil de droite. De plus, une particule du fil de gauche entre dans le nano-système sur le premier site. Un exemple de ce type de séquence est schématisé sur la Figure 5.2.

Ces processus dominant le transport à travers une chaîne en interaction sont similaires à ceux qui décrivent le *co-tunneling* à travers des assemblages de boîtes quantiques [95].

Ainsi, les premières contributions à l'élément de matrice effectif $M_{f,i}$ sont d'ordre $N + 1$ en H_K . On obtient

$$M_{f,i} = \sum_{S=\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}} \frac{\langle i | H_K | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H_K | \alpha_2 \rangle \dots \langle \alpha_N | H_K | f \rangle}{(E_i - E_{\alpha_1})(E_i - E_{\alpha_2}) \dots (E_i - E_{\alpha_N})}, \quad (5.16)$$

où $S = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$ sont les séquences de N états propres de H_0 reliant $|i\rangle$ à $|f\rangle$ par $N + 1$ sauts (d'une particule) successifs. Pour toutes les $(N + 1)!$ différentes permutations de l'ordre des sauts, le numérateur est donné par $(-1)^{N+1} \sin^2(k) / L$. Le dénominateur fait intervenir U et V_g et dépend de la séquence considérée. Pour de petits (et pairs) L_S nous avons explicitement dérivé la formule

$$M_{f,i} = -\frac{1}{L} \sin^2(k) \left(\frac{U}{V_g^2 - U^2/4} \right)^{L_S/2} \quad (5.17)$$

et nous en avons confirmé la validité pour de plus grandes valeurs de L_S en calculant la somme sur les séquences numériquement. Avec (5.14) et la densité d'états dans les fils

unidimensionnels $\rho = L/(2\pi \sin(k))$ on obtient

$$g = \left(\frac{U}{V_g^2 - U^2/4} \right)^{L_S} \quad (5.18)$$

pour la contribution principale à la conductance dans la limite de très forte interaction U en milieu de bande, c'est-à-dire avec $E_F = 0$ et $k_F = \pi/2$. Cette formule montre que le blocage de Coulomb apparaît pour une interaction suffisamment forte. La suppression de la conductance dans la vallée due au comportement de l'isolant de Mott suit une loi de décroissance qui est polynomiale en U et exponentielle en L_S . Le résultat de l'équation (5.18) est une généralisation du résultat dérivé pour $V_g = 0$ dans la référence [78]. La conductance dans la vallée autour de $V_g = 0$ dans la Figure 5.1c est bien décrite par l'équation (5.18) et l'accord augmente lorsque l'interaction devient plus forte.

La décroissance polynomiale en interaction dans l'équation (5.18) de la conductance de vallée est obtenue analytiquement et confirmée par de la numérique très précise dans notre cas de fermions sans spin. Dans le cas d'une chaîne de Hubbard, une décroissance exponentielle a été trouvée [140] à partir de données NRG pour des valeurs relativement modérées de l'interaction. Cependant, notre approche analytique peut être appliquée au cas d'une chaîne de Hubbard, avec à la clé toujours une dépendance en loi de puissance de la conductance à travers la région en interaction. Cette loi de puissance est une conséquence du modèle de réseau. La décroissance exponentielle mentionnée dans [140] peut être une dépendance apparente dans un régime d'interaction intermédiaire.

Avec le même modèle, mais en l'absence de tension de grille, il a été précédemment trouvé [82] que le lissage des contacts, c'est-à-dire le branchement progressif de l'interaction entre les fils et le nano-système, réduit la suppression due à l'interaction de la conductance qui existe pour des valeurs paires de L_S . Pour des contacts parfaitement adiabatiques, on retrouve le résultat analytique [89, 90], selon lequel la conductance d'un liquide de Luttinger placé entre deux fils parfaits ne dépend pas de l'interaction. Dans notre cas avec tension de grille, cela signifie que le lissage des contacts réduirait la profondeur de la vallée de conductance à $V_g = 0$. Cependant, comme on le voit dans la section 5.4, des résultats numériques montrent que le lissage ne supprime pas forcément les autres vallées.

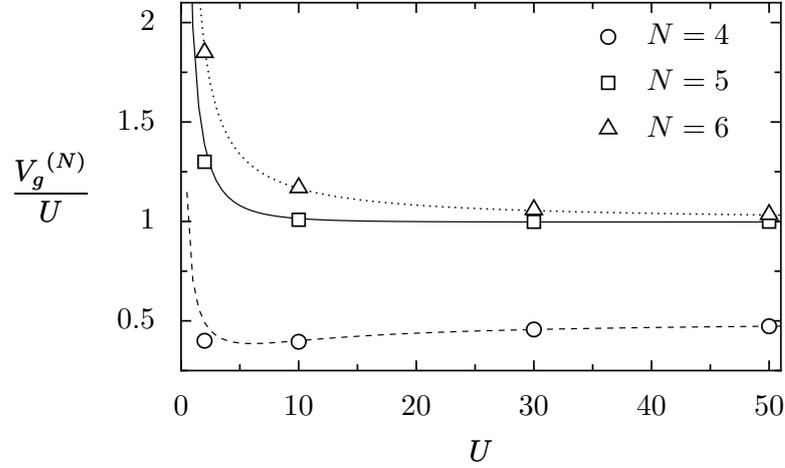


FIG. 5.3: Positions $V_g^{(N)}/U$ des pics obtenues à partir des données numériques présentées sur la Figure 5.1 en fonction de l'interaction U (symboles). Les lignes donnent les prédictions $\tilde{V}_g^{(N)}/U$ pour le nano-système (équation (5.19)).

5.3.3 Positions et formes des pics

À partir des données présentées dans la Figure 5.1, les positions $V_g^{(N)}$ des résonances peuvent être définies comme la valeur de la tension de grille pour laquelle on a en moyenne $N - 1/2$ particules dans le nano-système. Ces positions $V_g^{(N)}$, divisées par U , sont montrées sur la Figure 5.3 (symboles) en fonction de l'interaction U , en même temps que les positions

$$\tilde{V}_g^{(N)}(U) = E_0(N, U) - E_0(N - 1, U), \quad (5.19)$$

qui sont obtenues à partir des énergies du fondamental multi-particule $E_0(N, U)$ du nano-système isolé contenant N particules (lignes). On peut voir que déjà pour $U = 10$, les positions des résonances sont très proches des positions prédites par l'équation (5.19). C'est une confirmation supplémentaire du fait que le nano-système devient effectivement découplé des fils.

Nous pouvons également étudier l'évolution de la largeur des pics en fonction de l'interaction. Sur la Figure 5.1 celle-ci semble diminuer lorsque U augmente.

La largeur Γ_N d'un pic est donnée par la valeur de l'élément de matrice de H_C dans le numérateur de (5.12). Comme la résonance à $V_g^{(N)}$ est donné par la dégénérescence des fondamentaux à N et $N - 1$ particules, nous restreignons notre discussion à la contribution provenant de la transition entre ces deux fondamentaux. Pour une discussion

d'ordre qualitative, nous pouvons caractériser la largeur du pic en utilisant l'élément de matrice

$$-\langle k_{\text{F}}^{\text{gauche}} | \otimes \langle 0(N-1) | c_0^\dagger c_1 | 0(N) \rangle, \quad (5.20)$$

qui contient l'amplitude

$$\mathcal{C}_N = \langle 0(N-1) | c_1 | 0(N) \rangle. \quad (5.21)$$

La principale contribution à Γ_N est proportionnelle à $|\mathcal{C}_N|^2$. Cet élément de matrice dépend des fonctions d'onde multi-particules, et est donc fortement influencé par les interactions. Pour des valeurs générales de N , il peut être hautement non-trivial de déterminer le fondamental du nano-système isolé. Il y a, cependant, des valeurs particulières de N pour lesquelles nous pouvons étudier \mathcal{C}_N analytiquement.

Une de ces valeurs particulières est, dans le cas de L_S pair, $N = L_S/2 + 1$, qui correspond au pic de gauche dans la Figure 5.1. Dans la limite d'interaction forte, l'état $|0(L_S/2)\rangle$ est une superposition de deux ondes de densité de charge, comme présenté dans l'équation (5.15). Pour $L_S = 6$, en notant schématiquement les états du nano-système en l'absence de H_K avec la même signification que dans la Figure 5.2, on a :

$$|0(N=3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\circ\bullet\circ\bullet\circ\bullet\rangle + |\bullet\circ\bullet\circ\bullet\circ\rangle). \quad (5.22)$$

La particule supplémentaire dans $|0(L_S/2 + 1)\rangle$ est un défaut (avec une énergie U) de l'isolant de Mott qui peut se propager librement, et peut être décrit par une théorie à une particule effective. En l'absence d'énergie cinétique H_K , l'état $|0(L_S/2 + 1)\rangle$ est une superposition des $L_S/2$ états dégénérés de la forme $c_1^\dagger c_3^\dagger \dots c_{2i-1}^\dagger c_{2i}^\dagger \dots c_{L_S}^\dagger |0\rangle$. En présence de H_K , le poids des différentes composantes est obtenu en résolvant le problème équivalent d'une particule libre sur $L_S/2$ sites. Pour l'exemple de $L_S = 6$, on peut écrire :

$$|0(N=4)\rangle = \sum_{i=1}^3 \sqrt{\frac{2}{L_S/2 + 1}} \sin\left(\frac{\pi}{L_S/2 + 1} i\right) |i\rangle, \quad (5.23)$$

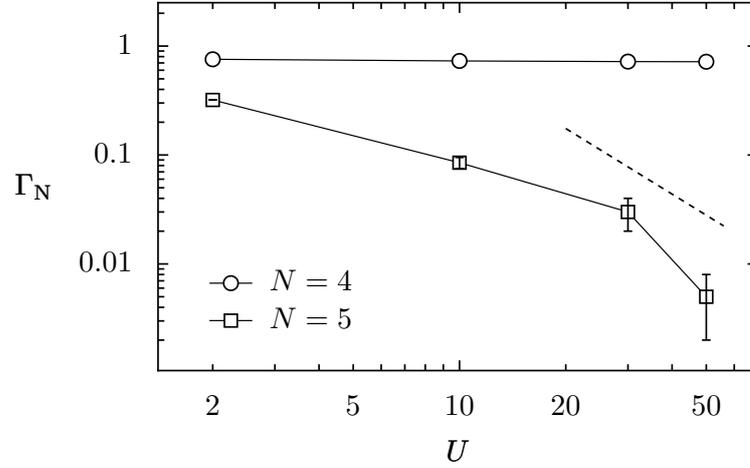


FIG. 5.4: Largeur Γ_N des pics en fonction de U , obtenue en fittant les données numériques $N(V_g)$ avec une tangente hyperbolique. Les barres d'erreurs sont données par l'incertitude de ce fit. Pour $N = 4$ elles sont plus petites que la taille du symbole. La droite (tirets) représente la loi de puissance asymptotique $1/U^2$.

avec les états :

$$|i = 1\rangle = |\bullet \bullet \circ \bullet \circ \bullet\rangle, \quad (5.24)$$

$$|i = 2\rangle = |\bullet \circ \bullet \bullet \circ \bullet\rangle, \quad (5.25)$$

$$|i = 3\rangle = |\bullet \circ \bullet \circ \bullet \bullet\rangle. \quad (5.26)$$

Quelque soit L_S , seul le poids du premier état (c'est-à-dire pour $i = 1$) entre en considération pour $\mathcal{C}_{L_S/2+1}$, et on obtient

$$\mathcal{C}_{L_S/2+1} = \frac{1}{\sqrt{L_S/2 + 1}} \sin\left(\frac{\pi}{L_S/2 + 1}\right). \quad (5.27)$$

Dans cette limite d'interaction forte, la contribution d'ordre le plus bas à $\mathcal{C}_{L_S/2+1}$ est ainsi indépendante de U (la valeur limite est atteinte déjà pour $U \gtrsim 2$ comme on peut le voir sur la Figure 5.4), mais décroît comme $L_S^{-3/2}$ avec la longueur du nano-système lorsque L_S est grand, suggérant une décroissance de la largeur du pic en L_S^{-3} .

Il n'est pas sans intérêt de comparer ce comportement à grand L_S avec celui obtenu avec une évaluation de l'élément de matrice sans interaction, que l'on peut calculer malgré le fait qu'à $U = 0$ le nano-système n'est pas découplé des fils. Dans ce cas sans interaction, les états propres sont donnés par des particules libres sur L_S sites. $\mathcal{C}_{L_S/2+1}$ est

donc obtenu avec la valeur sur le premier site de la fonction d'onde du $(L_S/2 + 1)$ -ième plus bas état à une particule. On obtient ainsi une dépendance en taille de l'élément de matrice en $L_S^{-1/2}$ seulement. On peut donc conclure que l'interaction joue un rôle important pour rendre la résonance plus étroite.

Un autre cas dans lequel on peut faire des calculs analytiques relativement facilement est celui du dernier pic, lorsque $N = L_S$. Dans ce cas, l'état $|0(L_S)\rangle$ correspond simplement au nano-système rempli. Dans l'exemple de $L_S = 6$ on a donc simplement :

$$|0(N = 6)\rangle = |\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\bullet\rangle \quad (5.28)$$

L'état $|0(L_S - 1)\rangle$ correspond à un unique trou (équivalent à un unique électron, par symétrie) dans un puits de potentiel qui présente des marches de $U/2$ sur les bords (comme on peut le voir sur la Figure 4.3). Il est évident que lorsque U augmente, la particule va préférer ne pas trop aller sur les sites du bord, à cause de la marche de potentiel. L'état fondamental de ce système à un corps peut être obtenu avec l'ansatz d'une fonction d'onde paire :

$$|0(L_S - 1)\rangle = \left(Bc_1^\dagger + A \sum_{i=2}^{L_S-1} \cos(k(i - (L_S + 1)/2)) c_i^\dagger + Bc_{L_S}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (5.29)$$

La normalisation permet d'obtenir B qui donne immédiatement :

$$\mathcal{C}_{L_S} = \frac{\cos\left(\frac{L_S-1}{2}k\right)}{\sqrt{\sum_{n=1}^{L_S} \cos^2\left(\left(n - \frac{L_S+1}{2}\right)k\right)}}, \quad (5.30)$$

où k est la plus petite valeur positive qui satisfait la condition

$$\cos\left(\frac{L_S + 1}{2}k\right) = \frac{-U}{2} \cos\left(\frac{L_S - 1}{2}k\right). \quad (5.31)$$

Dans ce cas, on peut voir que \mathcal{C} dépend de U via k . Dans la limite d'interaction forte, (5.31) peut être satisfaite seulement si $\cos\left(\frac{L_S-1}{2}k\right) \sim U^{-1}$. Cela implique que le numérateur de (5.30) décroît proportionnellement à U^{-1} et donc que la largeur de pic Γ_N décroît comme U^{-2} . Cet exemple de réduction de la largeur du pic par l'interaction est illustrée sur la Figure 5.4 pour $N = 5$. Pour $N = 6$, les largeurs sont les plus petites et la quantité de données recueillies ne nous permet pas de les mesurer avec une précision acceptable.

Nous terminons cette section avec une discussion de la symétrie des pics. Comme on peut voir sur la Figure 5.1c, les pics de conductance n'ont pas la forme de Lorentziennes symétriques. Cela est le plus évident avec le premier pic et peut être expliqué par une asymétrie dans le couplage des états multi-particules avec les états qui ont une particule de plus ou de moins. Pour comprendre cela, nous allons considérer la représentation de l'élément de matrice $M_{f,i}$ comme une simple somme sur les états propres $|\alpha\rangle$ du nano-système isolé, comme dans l'équation (5.12).

Hors résonances, le nombre N de particules dans le nano-système, et donc les états initial (5.10) et final (5.11), est bien défini et on peut utiliser l'équation (5.14) pour évaluer la conductance. Très proche du pic de conductance, cependant, la transmission devient grande et l'approche de la règle d'or de Fermi n'est plus valable. Pour comprendre l'asymétrie des pics, nous considérons donc des valeurs de tension de grille qui sont dans le voisinage d'une résonance $V_g^{(N)}$ (et loin des autres résonances), mais suffisamment loin du centre du pic pour que la conductance soit petite. De cette façon, la conductance dans la queue des pics provient essentiellement de transitions entre les états du nano-système à $N - 1$ et à N particules et peut encore être traitée en utilisant (5.12) et (5.14).

La principale contribution à la somme (5.12) n'est pas la même selon que la tension de grille considérée est au-dessus ou en-dessous de la valeur à résonance $V_g^{(N)}$. Pour des valeurs de tension de grille en-dessous de la résonance, les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$ sont des états à $N - 1$ particules, et la plus importante contribution à $M_{f,i}$ vient de la somme sur les états $|\alpha\rangle$ avec N particules dans le nano-système. Les termes avec $N - 2$ particules dans les états $|\alpha\rangle$ sont supprimés par le dénominateur d'énergie beaucoup plus grand dans (5.12). Pour une tension de grille légèrement au-dessus de $V_g^{(N)}$, les états initial et final sont des états à N particules et la principale contribution à la somme vient des états intermédiaires avec $N - 1$ particules. Étant donné que le spectre d'excitation multi-particule du nano-système isolé peut dépendre dramatiquement de N , la somme peut donner des résultats très différents de chaque côté des pics, ce qui explique leur asymétrie.

Nous illustrons ce mécanisme pour l'exemple du premier pic de la Figure 5.1c, correspondant à la transition entre le demi-remplissage, $N - 1 = L_S/2 = 3$, et $N = 4$. Du côté gauche du pic, la somme est dominée par les états intermédiaires du nano-système à 4 particules. Alors que l'évaluation de la conductance du côté droit du pic est dominée par les états du nano-système à 3 particules. Le spectre d'excitation multi-particule dans le cas $N = 3$ est caractérisé par le gap de Mott de l'ordre de U . En moyenne le dénominateur est donc beaucoup plus grand et la valeur de $M_{f,i}$ est plus petite à droite du pic

qu'à gauche, ce qui explique l'asymétrie que l'on voit sur la Figure 5.1c.

5.4 Lissage des contacts

Le système que nous avons étudié jusqu'à maintenant peut modéliser entre autres une chaîne mono-atomique, dans laquelle les corrélations entre électrons sont importantes du fait de la dimensionalité réduite, reliée à des réservoirs dans lesquels l'écrantage est supposé efficace et les corrélations négligeables. Dans la réalité, le passage des réservoirs à la chaîne mono-atomique se fait progressivement (la taille des électrodes va en diminuant jusqu'au contact avec la chaîne). Pour plus de réalisme, il faut donc un branchement progressif de l'intensité de l'interaction aux entrées du nano-système.

Dans la section 5.3.2, nous avons mentionné le fait qu'en l'absence de tension de grille, le lissage des contacts diminue considérablement l'effet de suppression de la conductance par les interactions [82]. La question se pose donc de savoir si le blocage de Coulomb disparaît avec des contacts lisses.

L'Hamiltonien d'interaction est remplacé par

$$H_U = \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_i(\hat{n}_i - 1/2)(\hat{n}_{i+1} - 1/2), \quad (5.32)$$

où U_i désigne l'énergie d'interaction entre le site i et le site $i + 1$. L'interaction passe de zéro à la valeur U sur L_C sites. La situation abrupte correspond donc à $L_C = 0$. Pour le profil avec lequel U_i augmente avec i , nous avons choisi celui d'une tangente hyperbolique (voir l'exemple de $L_C = 4$ sur la Figure 5.5). Le choix de valeurs paires de L_C permet d'assurer une longueur effective L_S du système constante. Le nano-système est considéré être délimité par le centre des contacts et la tension de grille ne s'applique que sur ces L_S sites. La symétrie gauche-droite est conservée.

Les résultats obtenus sont présentés sur les Figures 5.6a (pour $L_C = 2$) et b (pour $L_C = 4$). En accord avec les résultats de Molina *et al.* [82] obtenus en l'absence de tension de grille, on constate que la première vallée de conductance disparaît, et ce d'autant plus que le lissage est fort. En revanche, les autres vallées restent bien définies et donc le blocage de Coulomb persiste.

Remarque : Sur la Figure 5.6a, on constate que la première résonance est absente ($L_C = 2$). Cet effet intéressant provient de la façon dont on a lissé l'interaction et est

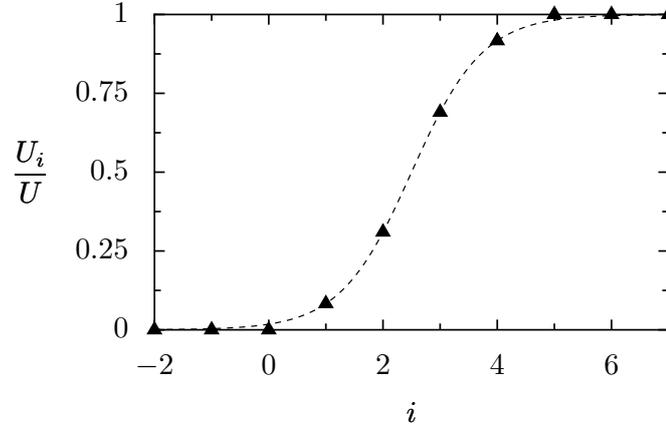


FIG. 5.5: L'intensité de l'interaction entre le site i et le site $i + 1$ passe de zéro (pour $i \leq 0$) à U sur L_C sites, pour lesquels un profil de tangente hyperbolique est utilisé (ligne pointillé).

particulier aux valeurs de L_C telles que $L_C/2$ est impair. Pour $L_C = 2$, il y a un site de chaque côté du nano-système qui est en interaction mais ne voit pas la tension de grille. De ce fait, lorsque l'interaction est suffisamment forte, le premier électron attiré par la tension de grille l'est simplement à partir de ces deux sites (deux sites demi-remplis = un électron) et cela ne fait intervenir aucun échange avec les fils, si on définit ceux-ci comme les sites à l'extérieur de la zone en interaction, et donc aucune conductance à travers le nano-système n'est possible. Nous avons vérifié que la résonance réapparaît pour une interaction moins forte, donnant un comportement qualitativement similaire à celui pour $L_C = 4$.

On peut également explorer l'effet du lissage du potentiel de tension de grille. Dans ce cas, on obtient des résultats qualitativement très similaires à ceux avec des contacts abrupts, discutés en détail dans les sections précédentes.

Enfin, on peut lisser interaction et tension de grille en même temps. Dans ce cas, on peut voir sur les Figures 5.6c ($L_C=2$) et d ($L_C=4$) que les pics ont tendance à s'élargir et que les vallées de blocage de Coulomb ont tendance à disparaître, en commençant par la première vallée. Pour $L_C = 4$ le dernier pic reste encore bien défini.

Cela donne une idée du mécanisme de notre blocage de Coulomb. Dans le cas où le potentiel de tension de grille n'est pas lissé, les contacts abrupts sont à l'origine de résonances (pour lesquelles la conductance atteint l'unité) similaires à celles d'un Fabry-Pérot, que l'on peut voir sur la Figure 5.1a. Quand l'intensité de l'interaction augmente, ces résonances sont séparées et des vallées de blocage de Coulomb ($g \simeq 0$) apparaissent

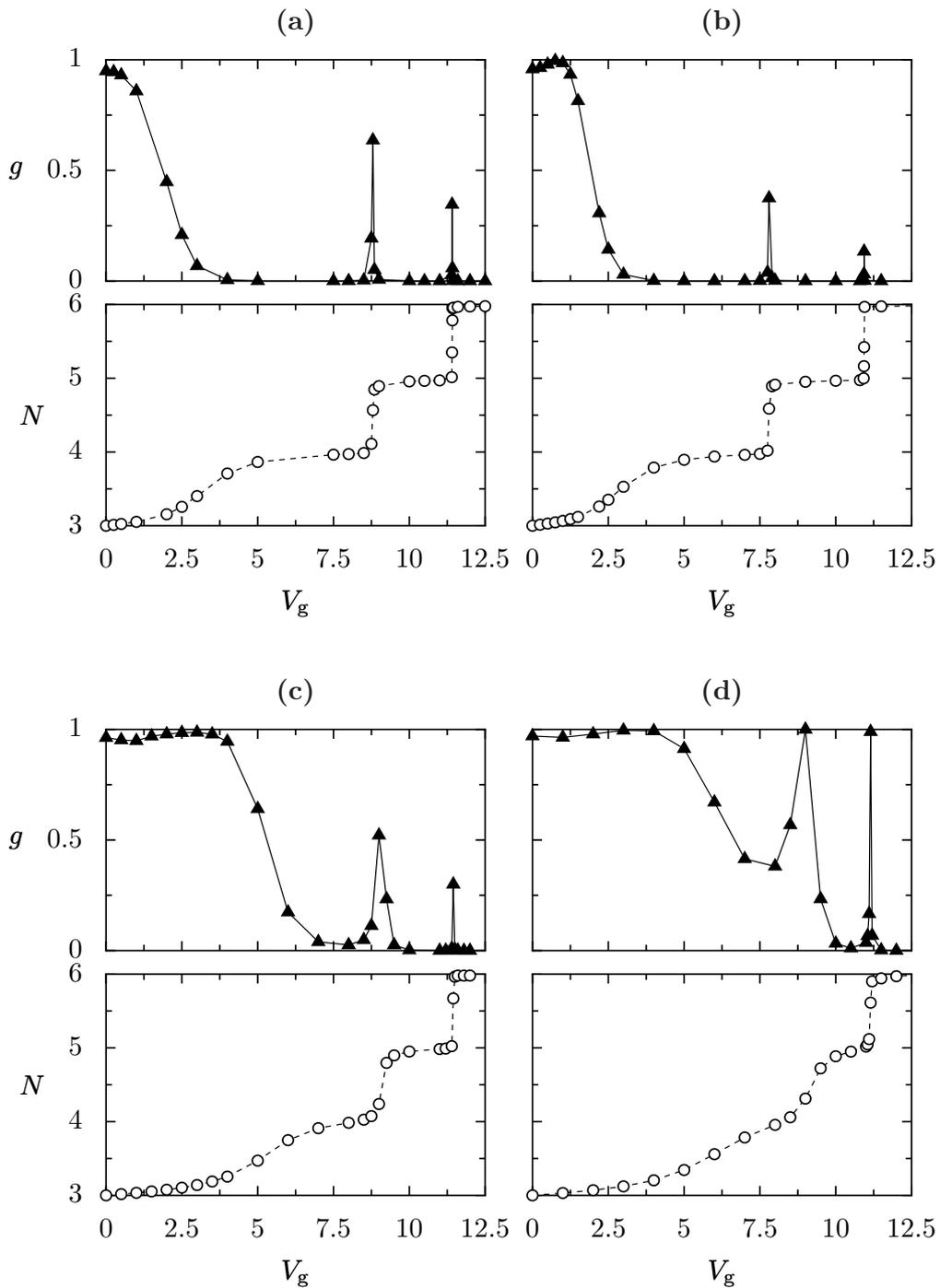


FIG. 5.6: Conductance g de et nombre moyen de particules N dans le nano-système de $L_S = 6$ sites à $U = 10$ en fonction de V_g pour différentes situations de lissage des contacts. Dans les graphes (a) ($L_C=2$) et (b) ($L_C=4$) seul le profil de l'interaction est lissé, alors que dans les graphes (c) ($L_C=2$) et (d) ($L_C=4$) l'interaction et le potentiel de la grille sont tous deux lissés. La quantité limitée de données recueillies ne nous permet pas toujours de voir le sommet des pics les plus étroits, que l'on s'attend à voir monter à un.

entre elles.

Ce mécanisme implique la présence de contacts relativement abrupts, soit pour le potentiel de tension de grille, soit pour l'interaction (et *a fortiori* pour les deux), avec la remarque que si l'interaction est lissée, la première vallée disparaît. Si par contre interaction et potentiel de tension de grille sont tout deux lissés, alors plus rien n'est là pour donner lieu à des résonances, et le comportement blocage de Coulomb disparaît au fur et à mesure que le lissage devient meilleur.

Dans l'expérience, il est évident qu'interaction et potentiel de tension de grille sont forcément lisses. La question de savoir sur quelles échelles typiques ils le sont est bien entendu d'une importance cruciale. Cela dépend beaucoup du type d'expérience envisagé. S'il est possible de réaliser une expérience dans laquelle les échelles de longueur sur lesquelles les deux quantités sont lissées soient très différentes l'une de l'autre, le blocage de Coulomb pourrait être observé.

Dans notre modèle, si nous pouvons facilement faire varier indépendamment l'une de l'autre tension de grille et intensité de l'interaction, les choses sont plus difficiles expérimentalement. En effet, l'importance des interactions inter-électroniques dans un nano-système peut être affectée de trois façons différentes. Tout d'abord, la dimensionnalité réduite du nano-système a pour effet de rendre les interactions plus importantes, et ainsi la façon dont on dessine les contacts influence l'échelle sur laquelle l'interaction est branchée lorsqu'on passe d'une électrode au nano-système. D'autre part, l'intensité des interactions est liée à la densité électronique : plus la densité est basse, plus les interactions sont importantes. La densité peut être contrôlée expérimentalement par la tension de grille. Enfin, un troisième effet sur l'intensité de l'interaction électron-électron est lié à la présence même de la grille métallique : l'interaction des électrons du nano-système avec leurs charges images au sein de la grille a tendance à écranter l'interaction électron-électron, ce qui diminue l'intensité effective des interactions. L'influence d'une ou plusieurs grille(s) peut ainsi avoir différents effets sur l'importance des interactions ainsi que la longueur de lissage de celles-ci et du potentiel de grille. La réalisation de divers dispositifs est envisagée [141].

5.5 Conclusion du Chapitre 5

Nous avons montré que la physique du blocage de Coulomb peut apparaître dans un système en interaction couplé aux fils par des contacts parfaits. Intuitivement, on peut comprendre ce blocage avec le raisonnement suivant. Comme les contacts sont parfaits au niveau une particule, ils ne constituent pas d'obstacle pour un électron se dirigeant vers le nano-système. Virtuellement, tout électron se dirigeant vers le nano-système entre donc dans celui-ci. Cependant, l'énergie de charge E_C due à l'interaction entre le nouvel électron et les électrons à l'intérieur du nano-système peut être grande et l'électron supplémentaire ne pourra rester (dans le cadre d'un processus virtuel) qu'un temps \hbar/E_C dans le nano-système avant d'en ressortir. L'événement dans lequel c'est un autre électron à l'autre bout du nano-système qui ressort dans l'autre fil est très peu probable car il implique une réorganisation de charge coûteuse (en énergie) à l'intérieur du nano-système. Le même type de discussion peut s'appliquer à un électron cherchant à quitter le nano-système.

Pour illustrer ce comportement particulier, nous avons étudié la dépendance en tension de grille de la conductance à travers une chaîne unidimensionnelle dans laquelle des fermions sans spin sont fortement corrélés. Nous avons utilisé la méthode de la boucle pour obtenir la conductance g et le nombre moyen N de particules dans le nano-système (voir Chapitre 4). Cette approche prend en compte toutes les corrélations électroniques. Malgré l'absence de barrières de potentiels séparant la chaîne en interaction des fils, les résultats numériques dans le régime de forte interaction montrent sans ambiguïté des caractéristiques du blocage de Coulomb dans le transport à travers des boîtes quantiques. Des pics apparaissent dans la dépendance en tension de grille de g , accompagnés par des marches dans $N(V_g)$. Ces structures deviennent plus prononcées, et la conductance dans les vallées plus supprimée, lorsque l'interaction augmente.

Ainsi, malgré les contacts parfaits, les interactions mènent à un découplage effectif de la chaîne corrélée et des fils. On peut donc considérer la partie en interaction de la chaîne comme une boîte quantique. Pour interpréter ces résultats, nous avons présenté une étude analytique du modèle. Nous expliquons l'apparition des vallées, et donc l'apparition du blocage de Coulomb lui-même, pour la vallée centrale (c'est-à-dire dans le voisinage d'une tension de grille nulle) à partir d'un calcul perturbatif de la conductance dans le régime de forte interaction. Nous avons montré qu'à forte interaction la position des pics peut être déduite des énergies propres du nano-système isolé, confirmant ainsi que le nano-système devient, de façon effective, découplé des fils. Enfin, nous avons expliqué

la diminution de la largeur des pics avec l'interaction, tout comme l'asymétrie de leur forme, en analysant l'élément de matrice de couplage effectif pour les transitions dominantes.

En étudiant l'effet du lissage des contacts, il apparaît que des contacts relativement abrupts (soit dans le branchement de l'interaction, soit dans celui du potentiel de tension de grille, soit *a fortiori* dans les deux) sont nécessaires pour observer le blocage de Coulomb. Pour observer cet effet expérimentalement, il faudrait donc prendre en compte cette contrainte dans la conception du système.

La tendance actuelle de développement de MOSFETs plus petits [32, 33] va probablement mener à des régimes dans lesquels les concepts et idées théoriques développés ici devraient être appliqués. Il serait intéressant de développer davantage notre modèle pour réduire l'éloignement avec ces expériences. Étudier l'effet de température finie, de portée d'interaction plus grande, et du spin de l'électron, sont envisagés, tout comme aller au-delà du cas unidimensionnel. La méthode récemment développée pour obtenir la conductance non-linéaire à partir d'un DMRG dépendant du temps [132] pourrait être appliquée à notre modèle. Il serait intéressant d'étudier la suppression du blocage de Coulomb avec la tension source-drain.

Chapitre 6

Conductance d'une chaîne de Hubbard

*“Whoa, let's not jump to conclusions!
I'm just saying there's room for improvement.”*

— Calvin (Bill Watterson)

Dans les Chapitres précédents, nous avons étudié des modèles de fermions sans spin. On a vu que cela correspondait à la situation où les électrons sont polarisés par un champ magnétique (dans le plan pour un système à deux dimensions). La motivation pour étudier de tels systèmes, hormis le fait que la réduction du nombre de degrés de liberté rend l'étude numérique considérablement plus aisée, est qu'ils démontrent déjà, malgré leur simplicité apparente, un comportement particulièrement riche en fonction des différents paramètres des modèles.

Pour augmenter le réalisme des systèmes décrits, cependant, il est hautement souhaitable de prendre en compte le spin. Dans ce Chapitre nous discutons les questions soulevées par l'inclusion de ce degré de liberté dans la méthode de la boucle. Le projet numérique correspondant gagne en ampleur mais nos résultats montrent que la méthode reste valable.

6.1 Hamiltonien

Le problème qui nous intéresse est toujours celui du calcul de la conductance d'un système en interaction couplé à des fils. Nous généralisons donc simplement l'Hamiltonien

nien (2.19) pour prendre en compte le degré de liberté du spin. Le nano-système est maintenant décrit par le modèle de Hubbard. Le degré de liberté de spin permet à deux électrons d'occuper le même site (s'ils sont de spin opposés). L'interaction entre proches voisins est donc remplacée par une interaction sur site.

Comme dans le cas dépourvu de spin, on choisit de se placer dans le cas d'un nano-système parfaitement couplé au fils. On décompose l'Hamiltonien en trois termes :

$$H = H_K + H_U + H_G. \quad (6.1)$$

La partie cinétique décrit une chaîne infinie à deux canaux (un pour chaque direction de spin) :

$$H_K = -t_h \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=-\infty}^{\infty} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + h.c.). \quad (6.2)$$

Comme précédemment, on prend l'amplitude de saut $t_h = 1$ pour unité d'énergie.

Le nano-système se distingue des fils par la présence d'une interaction de type Hubbard sur L_S sites :

$$H_U = U \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{U}{2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_{i,\sigma}. \quad (6.3)$$

Le second terme dans H_U est un potentiel de compensation assurant la symétrie particule-trou lorsque le terme correspondant au potentiel de la grille

$$H_G = -V_g \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_{i,\sigma}. \quad (6.4)$$

est nul.

Dans le cadre du test de la méthode qui est discuté dans ce Chapitre, nous allons travailler sans tension de grille $V_g = 0$. Nous laissons à une étude ultérieure l'étude du comportement de la conductance en fonction de ce paramètre.

Le système est toujours unidimensionnel, mais la présence de spin fait qu'il y a deux canaux de conductance : un pour chaque direction de spin. La présence de ces deux canaux nous fait donc sortir du cas purement unidimensionnel, pour lequel la méthode de la boucle a été établie. Il nous faut donc vérifier comment sa validité est affectée.

Une autre conséquence du fait que l'on sorte du cas purement unidimensionnel est que les calculs numériques deviennent considérablement moins aisés. En effet, DMRG est un algorithme extrêmement efficace dans un cas unidimensionnel comportant uniquement des termes (d'interaction ou de *hopping*) à courte portée (voir section 1.3.3). C'est grâce à cette efficacité impressionnante que nous avons pu traiter sans approximations des systèmes si grands (jusqu'à $L = 300$ sites) en l'absence de spin. Le fait d'avoir à traiter deux canaux nous éloigne de cette situation idéale.

6.2 La méthode de la boucle avec spin

6.2.1 Position du problème

La question qui conditionnait la validité de la méthode de la boucle pour des fermions sans spin, et à laquelle nous avons apporté une réponse positive dans le Chapitre 4, était : peut-on, à température nulle, remplacer un système en interaction, relié à des fils unidimensionnels, par un diffuseur à un corps avec une amplitude de transmission t effective ?

Avec le spin, la question devient : peut-on remplacer une chaîne de Hubbard, connectée à des fils contenant chacun deux canaux de spin, par un diffuseur à un corps avec des amplitudes de transmission $t_{\uparrow\uparrow}$, $t_{\downarrow\downarrow}$, $t_{\uparrow\downarrow}$ et $t_{\downarrow\uparrow}$ effectives ? (on définit l'amplitude de transmission $t_{\alpha\beta}$ comme l'amplitude de probabilité qu'un électron de spin α soit transmis avec un spin β)

Si cela est possible, la conductance est obtenue à partir de la généralisation de la formule de Landauer au cas multi-canaux [66] :

$$g = \text{Tr} (t^\dagger t) \quad (6.5)$$

où la matrice de transmission est dans notre cas de dimension 2 :

$$t = \begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow} & t_{\uparrow\downarrow} \\ t_{\downarrow\uparrow} & t_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (6.6)$$

Dans l'hypothèse où il est effectivement possible de remplacer la chaîne de Hubbard en interaction par un diffuseur à un corps effectif, il reste la question pratique de savoir

comment obtenir la valeur des amplitudes de transmission à partir d'un calcul numérique du courant permanent. En prenant en compte la symétrie due à l'absence de champ magnétique :

$$t_{\uparrow\uparrow} = t_{\downarrow\downarrow}, \quad (6.7)$$

$$t_{\uparrow\downarrow} = t_{\downarrow\uparrow}, \quad (6.8)$$

nous avons deux paramètres à extraire et en conséquence la valeur du courant permanent ne suffirait pas. Comme on l'a vu au Chapitre 4, un des avantages de l'extrapolation à taille infinie dans le cas sans spin est que le courant permanent dans cette limite ne dépend que du module de l'amplitude de transmission, qui est la seule information vraiment nécessaire pour obtenir la conductance. Dans le cas de deux canaux, il faut pouvoir identifier les contributions au courant permanent des différentes amplitudes de transmission.

Nous allons voir cependant que le cas que nous considérons est moins général que le cas de deux canaux avec des fermions sans spin. L'absence de termes de renversement de spin dans l'Hamiltonien de Hubbard permet finalement d'utiliser la méthode de la boucle de la même façon qu'avec les systèmes purement unidimensionnels, moyennant quelques modifications mineures.

6.2.2 Diffusion avec ou sans renversement de spin

L'Hamiltonien (6.1) ne contient aucun terme qui renverse la direction de spin des électrons (un terme de ce genre contiendrait un facteur du type $c_{j,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}$). De fait, on pourrait être tenté de faire l'hypothèse qu'il n'y a pas de diffusion avec renversement de spin, et qu'en particulier $t_{\uparrow\downarrow} = t_{\downarrow\uparrow} = 0$ (c'est ce qui est fait, sans justification, dans la référence [84]).

Du point de vue multi-particule, cela n'est cependant pas évident. Dans le cas où L_S est impair par exemple, dans la limite de forte interaction, le fondamental du nano-système demi-rempli porte un spin un-demi. En effet, dans le cas de demi-remplissage, il y a un électron par site. L'interaction localise chaque électron sur un site et impose une alternance de la direction de spin, d'un site à son proche voisin. En effet, la possibilité de sauts virtuels d'un électron sur ses sites proches voisins (déjà occupés par un électron mais de spin différent) diminue l'énergie du système global [38]. On peut imaginer des processus dans lesquels un électron de spin opposé à celui du nano-système est transmis

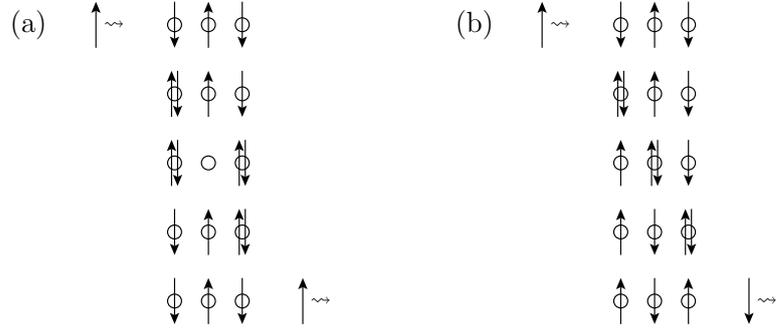


FIG. 6.1: Deux exemples de séquence de sauts (à lire du haut vers le bas) dans lesquels un électron de spin *up* arrive sur le nano-système par la gauche et est transmis à droite avec (a) ou sans (b) renverser son spin, pour un système de $L_S = 3$ sites.

avec ou sans avoir échangé son spin avec celui du nano-système (voir Figure 6.1). Cela est dû au fait que l'électron sortant du nano-système n'est pas forcément le même que celui y entrant. Dans le cas des fermions sans spin, qui étaient indiscernables, le problème ne se posait pas.

Ainsi, si on envoie sur le nano-système un électron avec un spin défini, il y a une certaine probabilité pour que celui-ci soit transmis (ou réfléchi) avec un spin différent. Cette probabilité dépend en réalité des événements passés, chaque événement de renversement de spin changeant l'état du diffuseur. Cela est en contradiction avec l'image d'un diffuseur à un corps, qui n'a pas de structure.

On peut remarquer cependant qu'il est toujours possible de regrouper les événements d'échange de spin par paires. Du point de vue macroscopique, sans connaissance de l'état microscopique du nano-système, une paire de transmissions avec renversement de spin peut être vue, de façon effective, comme une paire d'événements sans renversement de spin, puisque les deux cas laissent le nano-système dans le même état final. Cela nous amène à considérer les amplitudes de transmissions effectives :

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\uparrow} &= t_{\downarrow\downarrow} \equiv t \\ t_{\downarrow\uparrow} &= t_{\uparrow\downarrow} = 0. \end{aligned} \tag{6.9}$$

Dans le cadre de cette hypothèse, la formule (6.5) donne la conductance :

$$g = 2|t(E_F)|^2 \tag{6.10}$$

où l'on a réintroduit la dépendance à l'énergie de l'amplitude t .

Les équations (6.9) correspondent à l'hypothèse de pouvoir remplacer un système complexe (ayant une structure interne pouvant évoluer au gré des événements de diffusion) par un diffuseur sans structure. Les événements de diffusion avec renversement de spin sont pris en compte d'une façon effective comme des événements sans renversement.

6.2.3 Test de la méthode

Dans le Chapitre 4, nous avons montré que le système en interaction se comportait de la même façon qu'un diffuseur à un corps effectif en déterminant numériquement le comportement du courant permanent $J(\Phi)$ en fonction du flux Φ .

Dans le problème qui nous intéresse ici, un tel test n'est malheureusement pas à notre portée. En effet, on a déjà mentionné le fait que le degré de liberté de spin rend l'étude numérique bien moins aisée. Or, la totalité de la courbe $J(\Phi)$ ne peut être obtenue qu'avec une implémentation à valeurs complexes du code DMRG, qui demande elle-même plus de ressources numériques que la version à valeurs réelles.

À défaut de pouvoir explorer l'ensemble de la courbe $J(\Phi)$, nous pouvons en revanche la caractériser à l'aide de deux paramètres différents, tous deux calculables avec l'implémentation à valeurs réelles du code DMRG : la raideur de charge \mathcal{D} que nous avons déjà utilisée et ce que nous appellerons, par abus de langage,¹ la courbure \mathcal{C} (voir remarque sur la terminologie page 75).

On rappelle les définitions (équations (4.5) et (4.9)) de la raideur de charge \mathcal{D} et de la courbure \mathcal{C} :

$$\mathcal{D} = \frac{L}{2} |E(\Phi = 0) - E(\Phi = \pi)| \quad (6.11)$$

$$\mathcal{C} = L \frac{e^2}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \Phi^2}_{\Phi=0}. \quad (6.12)$$

Dans le cas sans interaction, les deux canaux de spin sont indépendants et on peut écrire directement le lien qui existe entre \mathcal{D} et l'amplitude de transmission effective en ajoutant un facteur 2 dans l'équation (B.40) :

$$\mathcal{D}_\infty = \hbar v_F \arcsin(|t(E_F)|), \quad (6.13)$$

¹La véritable courbure correspond à \mathcal{C}/L .

et de même pour le lien entre \mathcal{C} et t (à partir de (B.28)) :

$$\mathcal{C}_\infty = \frac{2ev_F}{\pi\hbar} \frac{|t(E_F)| \arccos(|t(E_F)|)}{\sqrt{1 - |t(E_F)|^2}}. \quad (6.14)$$

En l'absence de diffuseur, nous avons :

$$\mathcal{D}_\infty^0 = \frac{\hbar v_F}{2} \pi \quad (6.15)$$

$$\mathcal{C}_\infty^0 = \frac{ev_F}{2\hbar} \frac{4}{\pi}. \quad (6.16)$$

Dans l'Annexe B, on remarque que la courbure d'un anneau unidimensionnel n'est bien définie que pour un nombre impair de particules. Dans notre cas à deux canaux, cela nous conduit à ne travailler qu'avec des systèmes où $N_\uparrow = N_\downarrow$ est impair.

Le test que nous nous proposons d'effectuer consiste à regarder si, ayant calculé \mathcal{D}_∞ et \mathcal{C}_∞ pour le cas d'un nano-système en interaction, les équations (6.13) et (6.14) mènent à la même amplitude de transmission $|t(E_F)|$. Ce test n'est pas sans rappeler le fit réalisé dans la Figure 4.5, où $|t(E_F)|$ était le seul paramètre ajustable. La différence ici est que nous ne pouvons calculer toute la courbe $J(\Phi)$, mais seulement deux quantités caractérisant cette courbe : la pente à l'origine, et le résultat de l'intégrale entre $\Phi = 0$ et $\Phi = \pi$.

Si la méthode fonctionne avec l'hypothèse (6.9), ceci représenterait une forte indication que l'on a deux canaux équivalents.

6.3 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons les premiers résultats numériques que nous avons recueillis (on rappelle que dans ce Chapitre, $V_g = 0$). La limitation des ressources numériques à notre disposition restreint cependant la qualité des extrapolations. Les plus grands systèmes que nous considérons comportent en tout $L = 26$ sites avec $N_\uparrow = N_\downarrow = 13$, ce qui correspond déjà à une taille de l'espace de Hilbert d'environ 10^{14} , et que l'on traite en gardant jusqu'à $N_c = 3000$ états dans le processus DMRG. Malgré cette limitation en taille, les résultats semblent confirmer la validité de la méthode de la boucle en présence de spin.

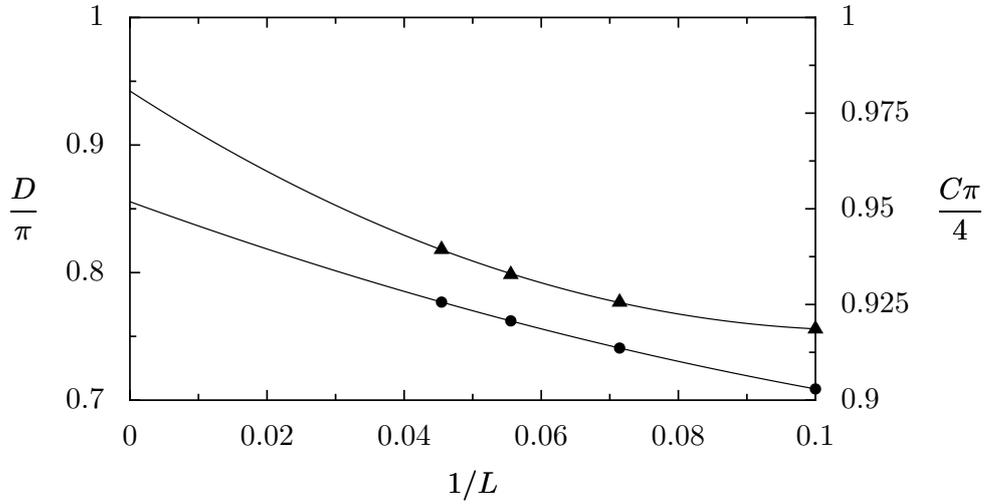


FIG. 6.2: Exemples d'extrapolation de données concernant la raideur de charge \mathcal{D} (cercles, échelle de gauche) et la courbure \mathcal{C} (triangles, échelle de droite) pour $L_S = 2$ et $U = 4$. Pour chaque cas, la ligne correspond au meilleur ajustement d'une parabole aux points numériques. La conductance obtenue à partir de \mathcal{C}_∞ vaut 0.944. Celle obtenue avec \mathcal{D}_∞ vaut 0.949.

6.3.1 Décroissance à L_S pair

Dans le cas où L_S est pair, à forte interaction, le fondamental du nano-système ne porte pas de spin [38]. Le problème de l'existence d'une structure interne au diffuseur, discuté dans la section 6.2.2, ne se pose pas. Ce cas est donc particulièrement favorable à l'hypothèse (6.9).

La Figure 6.2 montre un exemple d'extrapolation des données concernant la raideur de charge et la courbure. Les deux quantités ne se comportent pas exactement pareil pour des systèmes de taille finie, mais \mathcal{C}_∞ et \mathcal{D}_∞ mènent approximativement à la même conductance. De plus, en l'absence de tension de grille ($V_g=0$), les complications liées aux systèmes inhomogènes ne sont pas présentes, de sorte que déjà pour les tailles relativement petites considérées, les critères donnés dans la section 4.2.1 sont respectés et les extrapolations peuvent être considérées fiables.

La Figure 6.3 montre l'évolution en fonction de U de la conductance obtenue à partir des données sur la raideur de charge, via la formule (6.13). On voit que la conductance décroît avec l'interaction, d'autant plus vite que la taille du nano-système est grande.

La conductance obtenue à partir des données sur la courbure est dans chaque cas très proche de celle obtenue avec la raideur de charge. La différence est typiquement de

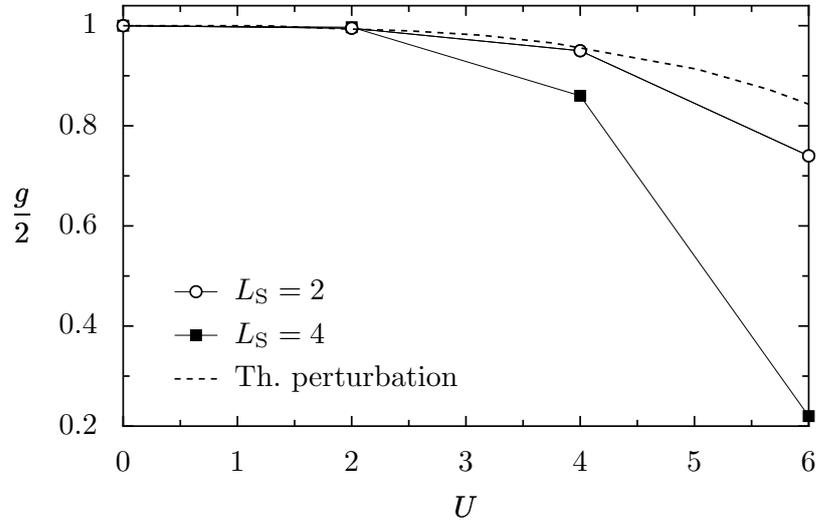


FIG. 6.3: Conductance obtenue à partir des données sur la raideur de charge pour $L_S = 2$ et 4. La conductance obtenue avec la courbure est très proche (la différence, de l'ordre de 2%, pour chaque point est plus petite que la taille du symbole). Les pointillés correspondent au résultat de la théorie de perturbation de la référence [142] pour $L_S = 2$. Les lignes pleines relient simplement les points numériques.

l'ordre de 2%, c'est pourquoi nous ne l'avons pas tracée sur la Figure 6.3. Nous pouvons donc conclure, à partir de ces données, que le test est positif et que la méthode en présence de spin et d'interaction est validée dans le cas L_S pair.

Un autre argument allant dans le sens de la validité de la méthode de la boucle est l'accord qualitatif de notre résultat avec des calculs de perturbation au second ordre en U réalisés par Oguri [94, 142]. On peut voir sur la Figure 6.3 que l'accord pour une interaction pas trop grande est très bon pour $L_S = 2$.

Il est intéressant de noter que le domaine de validité de la théorie de perturbation semble devenir beaucoup moins grand quand L_S augmente. Le résultat de Oguri pour $L_S = 4$ diffère en effet très peu de celui pour $L_S = 2$ (la différence sur l'échelle de la Figure 6.3 n'excède pas 3%), alors que notre résultat pour $L_S = 4$ montre que la conductance est bien plus rapidement supprimée par l'interaction. Cela semble être une limitation inhérente à la théorie de perturbation, puisque selon elle (voir [142]) la conductance à U fixé sature très rapidement lorsque L_S augmente.

Récemment, une étude numérique basée sur le groupe de renormalisation numérique (NRG) a permis d'aller au-delà du régime perturbatif [140] avec des résultats en accords avec les nôtres, confirmant la validité de notre approche.

	$U = 0$	$U = 2$	$U = 4$	$U = 6$
avec \mathcal{D}	1.00	1.00	0.98	0.75
avec \mathcal{C}	1.00	0.99	0.95	0.65

TAB. 6.1: Valeur de $|t|^2$ obtenue par extrapolation des données concernant la raideur de charge \mathcal{D} et la courbure \mathcal{C} pour $L_S=3$.

6.3.2 Résonance Kondo à L_S impair

Pour L_S impair, à demi-remplissage, le nano-système est porteur d'un spin. Comme on l'a expliqué, l'orientation de ce spin affecte les événements de diffusion possibles (au niveau microscopique, pas au niveau effectif). Il y a donc une corrélation entre le spin du nano-système et la distribution des électrons libres dans les fils. Cette corrélation mène à l'établissement d'un état singulet qui s'accompagne de l'apparition d'une résonance au niveau de Fermi : dans ce régime, la transmission à travers le nano-système est parfaite pour chaque direction de spin ($g = 2$). Cela est connu sous le nom d'effet Kondo [143].

On peut comprendre cette résonance par le fait que le fondamental du nano-système est dégénéré. Contrairement au cas L_S pair, les deux états dégénérés portent un spin total $\pm 1/2$. Le passage d'une configuration à une autre implique donc l'échange d'un électron avec les fils.

Pour $L_S = 1$, le modèle que l'on étudie peut être résolu exactement grâce à l'ansatz de Bethe [144] et une transmission parfaite ($|t|^2=1$) est obtenue. Pour L_S plus grand (mais toujours impair), la théorie de perturbation au second ordre en U peut être prolongée à l'ordre infini [94, 142] et indique que la transmission parfaite apparaît également.

Pour $L_S = 1$, nous retrouvons effectivement $|t|^2 = 1$ quelque soit l'intensité U de l'interaction, à partir de la raideur de charge \mathcal{D} aussi bien qu'avec la courbure \mathcal{C} . Le Tableau 6.1 montre nos résultats pour $L_S = 3$. Pour une interaction pas trop forte, on retrouve bien le résultat d'une transmission parfaite, mais la transmission décroche lorsque U augmente.

Le fait que les extrapolations menant aux résultats pour $U = 6$ dans le Tableau 6.1 ne mènent pas à la même conductance est probablement dû au fait que les extrapolations ne sont pas suffisamment poussées. Elles sont en effet, selon les critères de la section 4.2.1, de moins bonne qualité que celles de la Figure 6.2. Malheureusement les limites des

ressources numériques à notre disposition ne nous permettent pas de traiter des systèmes plus grands, ce qui serait nécessaire pour pouvoir améliorer la qualité des extrapolations et vérifier la validité de la méthode de la boucle.

Il est à noter qu'il est déjà connu de l'étude du modèle de fermions sans spin que l'extrapolation dans le cas d'une résonance devient plus difficile lorsque L_S et U augmentent. Dans la Figure 2 de la référence [82], on peut voir qu'au-delà d'une certaine valeur de U (dépendant de L_S), l'extrapolation à L_S impair, où la conductance parfaite est observée, est moins fiable que celle à L_S pair, ce qui correspond exactement à ce que l'on observe dans notre cas avec spin.

6.4 Conclusion du Chapitre 6

En conclusion, nous avons généralisé l'utilisation de la méthode de la boucle au cas avec spin. Les premiers résultats montrent que la méthode reste valable pour le cas du modèle de Hubbard sans tension de grille ($V_g=0$).

Les limites des ressources numériques à notre disposition sont cependant bien plus rapidement atteintes dans le problème avec spin. Il est envisagé dans un futur proche d'utiliser des super-calculateurs plus puissants afin de confirmer et d'étendre les résultats présentés dans ce Chapitre.

Il serait notamment intéressant d'étudier le blocage de Coulomb et la physique Kondo dans des chaînes de Hubbard. Il est envisagé d'étudier comment des résultats récents concernant ces systèmes [138] sont confirmés dans l'étude exacte que nous pouvons réaliser. La prise en compte du degré de spin permettrait d'étendre et d'enrichir les conclusions de nos travaux exposés dans le Chapitre 5 pour le cas d'un couplage parfait entre la chaîne et les fils.

Conclusion

“I love it, when a plan comes together!”

— Col. John “Hannibal” Smith, *The A-Team*.

Dans cette thèse, nous avons étudié les effets des corrélations électroniques sur le transport dans des systèmes de basse dimensionalité. L’étude numérique d’Hamiltoniens modèles à l’aide de techniques quasi-exactes nous a permis de prendre en compte les corrélations du problème à N corps. Lorsque cela était possible, nous avons soutenu et étendu les résultats numériques par des calculs analytiques. Le but de notre approche, plutôt que de modéliser avec réalisme un système particulier, est d’améliorer la compréhension qualitative des effets des corrélations en identifiant les mécanismes généraux qui prennent place dans les systèmes modèles étudiés et qui peuvent être similaires à ceux qui apparaissent dans les systèmes réels.

Nous avons tout d’abord porté notre intérêt vers l’étude des effets des corrélations sur le transport électronique dans les systèmes bidimensionnels désordonnés, dans le but d’améliorer la compréhension des effets combinés du désordre et de l’interaction Coulombienne. Dans le Chapitre 3, nous nous sommes intéressés à la statistique spectrale d’un système bidimensionnel désordonné de fermions sans spin en interaction. En effet les corrélations spectrales caractérisent la distribution statistique des écarts des niveaux et constituent une indication sur le degré de localisation des fonctions d’onde, et donc sur la mobilité des électrons.

Dans le régime de faible désordre (régime diffusif), nous trouvons que les corrélations spectrales diminuent toujours lorsque l’on augmente l’intensité de l’interaction. Dans le cas où le désordre est suffisamment fort pour localiser les fonctions d’onde à une particule, en revanche, les corrélations spectrales sont augmentées par une inter-

action modérée, avant de diminuer à interaction forte. À fort désordre, on a donc un comportement non-monotone de la répulsion des niveaux en fonction de l'intensité de l'interaction. L'interprétation de l'augmentation des corrélations spectrales comme la signature d'une délocalisation des électrons a été confirmée par une analyse de la structure du fondamental.

Cette étude a cependant été limitée à des systèmes relativement petits (quatre électrons sur un réseau carré de six par six sites). Il serait intéressant de déterminer si le comportement non-monotone des corrélations spectrales en fonction de l'intensité de l'interaction que nous avons observé se traduit par une double transition (ré-entrante) de la distribution des écarts entre niveaux d'énergie : Poisson/Wigner-Dyson/Poisson (pour l'exemple d'un système à faible remplissage). La première de ces transitions a déjà été observée avec une méthode numérique traitant les effets multi-particules approximativement [57].

D'autre part, la prise en compte du degré de liberté de spin serait particulièrement intéressante, étant donné que ce dernier semble jouer un rôle important dans les expériences sur la transition métal-isolant dans les systèmes bidimensionnels d'électrons (voir par exemple [20]). Il serait très intéressant de réaliser le même genre d'étude exacte dans des systèmes avec spin afin de comprendre le mécanisme de l'augmentation de la conductance observée dans ces systèmes qui a lieu dans le régime de *faible* désordre (voir par exemple [48]), par contraste avec le cas sans spin.

En vue de poursuivre notre étude du transport dans les systèmes fortement corrélés, et afin d'aller au-delà des indications indirectes que peut donner la statistique spectrale sur la mobilité des électrons, nous nous sommes intéressés à l'étude de la conductance à travers des systèmes unidimensionnels en interaction (en l'absence de désordre, dans un premier temps). Nous avons utilisé la méthode de la boucle, récemment développée [78], qui permet d'obtenir en tenant compte de toutes les corrélations la conductance d'un nano-système relié à des fils unidimensionnels semi-infinis. La méthode implique la réalisation d'une extrapolation à taille infinie du courant permanent dans un anneau composé d'un fil idéal bouclant le nano-système sur lui-même. Nous avons été amené à bien comprendre le comportement de cette extrapolation dans les systèmes avec une densité électronique inhomogène (Chapitre 4).

Cela nous a permis d'étudier l'influence d'une tension de grille sur la conductance d'une chaîne en interaction (Chapitre 5). La versatilité de la méthode de la boucle, qui permet de déterminer la conductance de n'importe quel système, pourvu qu'il soit

connecté aux réservoirs par des fils unidimensionnels, nous a permis d'étudier l'établissement d'un blocage de Coulomb dans une chaîne unidimensionnelle *parfaitement couplée aux fils*, ce qui n'a jamais été observé auparavant.

Lorsque l'on augmente l'intensité de l'interaction, des pics apparaissent dans la dépendance en tension de grille de la conductance, accompagnés par des marches dans le nombre moyen de particules présentes dans le nano-système, ce qui est caractéristique du blocage de Coulomb. Nous avons pu expliquer l'apparition des vallées par une approche perturbative à interaction forte. Nous avons également montré que la position des pics est donnée par les énergies propres du nano-système isolé à forte interaction, ce qui montre que le nano-système devient, d'une façon effective, découplé des fils. Enfin nous avons expliqué la diminution de la largeur des pics avec l'interaction, tout comme l'asymétrie de leur forme, en analysant l'élément de matrice de couplage effectif pour les transitions dominantes entre les états multi-particules avec des nombres de particules entiers consécutifs.

Nous avons également étudié numériquement le rôle du lissage des contacts sur cet effet. En effet, le branchement progressif de l'intensité de l'interaction lorsque l'on passe du fil au système dont on étudie la conductance est nécessaire en vue de s'approcher de la situation expérimentale, dans laquelle les contacts reliant les réservoirs et le nano-système ne sont en général pas abrupts. Nos résultats montrent que le blocage de Coulomb que nous avons observé est relativement robuste pour des contacts pas trop lisses.

Le degré d'avancement des techniques expérimentales à l'heure actuelle rend possible l'étude du transport électronique dans des systèmes de plus en plus petits, comme des transistors de type MOSFET de quelques dizaines de nanomètres de long [32] ou même des chaînes mono-atomiques [87]. Dans ce type de systèmes de dimensionalité réduite, les corrélations dues à l'interaction Coulombienne entre les électrons deviennent importantes et les concepts concernant les effets multi-particules sur le transport développés dans cette thèse sont de première importance.

Les résultats présentés dans cette thèse sont également pertinents dans le cadre de l'électronique moléculaire. Ce domaine émergent s'intéresse au transport à travers une molécule unique [145]. La taille de ces molécules est telle que les effets multi-particules peuvent avoir une grande influence sur leurs propriétés de transport. En addition des effets des corrélations électroniques, l'influence d'autres degrés de liberté (comme les phonons par exemple) mène à une physique encore plus riche.

Parmi les prolongements possibles de notre travail, il est envisagé d'étudier comment

le blocage de Coulomb que nous observons est affecté par un potentiel de désordre.

Récemment, une méthode a été développée pour obtenir la conductance non-linéaire à partir d'un algorithme DMRG dépendant du temps [132]. Cette méthode pourrait être appliquée à notre modèle et il ne serait pas sans intérêt d'étudier la suppression du blocage avec la tension de polarisation source-drain.

L'effet d'une température finie pourrait également être étudié, tout comme le cas où les fils avec lesquels le nano-système est connecté aux réservoirs contiennent plusieurs canaux de conductance. L'étude de ces deux effets n'est cependant pas accessible avec notre méthode et nécessite donc le développement d'autres approches.

Enfin, un développement majeur serait l'inclusion du degré de liberté de spin. Dans le Chapitre 6 nous avons généralisé l'application de la méthode de la boucle aux systèmes avec spin. Les résultats que nous avons obtenus semblent montrer que la méthode est toujours valable dans ce cas. Il serait particulièrement intéressant de prolonger notre travail sur le blocage de Coulomb dans un système avec spin. Une étude récente [138] montre que l'on peut s'attendre à une physique extrêmement riche dans ces systèmes, avec l'apparition du blocage de Coulomb éventuellement annulé par l'effet Kondo, que l'on pourrait étudier en fonction de l'intensité de l'interaction et du couplage du nano-système aux fils. La robustesse de ces effets avec le lissage des contacts serait également un étude d'un grand intérêt en vue de s'approcher des conditions expérimentales.

Quelque soit le développement envisagé, cependant, les limites des ressources numériques actuelles sont très rapidement atteintes quand la taille du système augmente. Pour le cas avec spin, par exemple, la raison en est que l'algorithme DMRG que nous avons utilisé est extrêmement efficace pour des systèmes purement unidimensionnels avec interaction (et *hopping*) à courte portée. C'est cette efficacité qui nous a permis d'étudier la conductance des systèmes sans spin. L'inclusion du spin diminue malheureusement considérablement cette efficacité étant donné qu'elle correspond à sortir du cas purement unidimensionnel.

Du point de vue fondamental, prendre en compte les effets multi-particules dans le transport électronique est un des plus grands défis de la physique mésoscopique actuelle. Les résultats présentés dans cette thèse montrent qu'une certaine compréhension de la physique des corrélations électroniques peut être apportée par des études numériques. Dans l'avenir, on peut espérer que les limitations en taille auxquelles ce type d'étude est confronté seront repoussées par l'amélioration des techniques de calcul ainsi que l'évolution de la puissance des calculateurs disponibles. Ainsi, des études numériques du

type de celles présentées dans cette thèse, en complémentarité avec le développement de nouvelles méthodes analytiques, et leur confrontation avec les résultats expérimentaux, peuvent ouvrir la voie vers une meilleure compréhension de la physique particulièrement riche des effets multi-particules.

Annexe A

Statistique spectrale non-universelle dans de petits systèmes

Dans cette Annexe, on explique en détail un mécanisme responsable de l'apparition d'un pic dans la distribution $P(s)$ des écarts énergétiques entre le fondamental et le premier état excité d'un système multi-particule avec désordre et interaction (voir Chapitre 3). On peut voir un exemple de manifestation de ce pic dans la Figure 3.3b pour $U = 20$. Ce pic est dû à un mécanisme qui augmente les corrélations spectrales d'une façon non-universelle.

Cet effet a lieu dans de très petits systèmes, lorsque l'espacement moyen entre niveaux $\langle \Delta \rangle$ est bien plus grand que l'amplitude de saut (hopping) t_h . On commence par considérer le cas sans interaction, avant de généraliser au cas corrélé.

A.1 Sans interaction

En l'absence du terme de saut (soit avec $t_h = 0$), les états propres du système utilisé au Chapitre 3 et défini par l'Hamiltonien (2.1) sont des déterminants de Slater de états à une particule localisé sur des sites individuels, et la distribution de leur énergie est Poissonienne. Dans la limite de désordre fort, $W \gg t_h$, le couplage $t_h = 1$ des sites proches voisins est beaucoup plus petit que la différence typique entre leurs énergies. En conséquence, les particules restent localisées sur des sites individuels, sauf dans des échantillons pour lesquels l'énergie du plus haut (en énergie) site occupé i est presque dégénéré avec celle du site inoccupé le plus bas j , et pour lesquels ces deux sites sont

proches voisins.

Dans ces échantillons, l'Hamiltonien de saut couple directement deux niveaux quasi-dégénérés, et cela induit une délocalisation d'un électron sur ces deux sites (comme montré dans [146]).

Si l'espacement moyen $\langle \Delta \rangle \sim W/L^d$ est plus grand que t_h (système de petite taille ou bien très fort désordre W), les deux états couplés peuvent être considérés comme un système à deux niveaux. Ainsi, l'espacement entre les deux niveaux multi-particules devient

$$\Delta = \sqrt{(v_j - v_i)^2 + 4t^2}. \quad (\text{A.1})$$

Dans le cas où les sites i et j ne sont pas proches voisins on a plutôt : $\Delta = v_j - v_i \simeq 0$. En conséquence, les échantillons particuliers sont responsable de l'apparition d'un creux à $s = 0$ et d'un pic à $s = 2t_h / \langle \Delta \rangle$ dans la distribution $P(s)$.

Si au contraire l'espacement moyen $\langle \Delta \rangle$ est plus petit que t_h (système plus grand ou W pas trop grand), alors en général plus de deux états sont couplés et des corrélations universelles (de type théorie des Matrices Aléatoires) peuvent survenir. Même si pour des tailles intermédiaires les corrélations spectrales sont toujours plus grandes dans les échantillons particuliers, leur poids dans l'ensemble statistique diminue rapidement avec L . Dans la limite thermodynamique l'anomalie disparaît donc.

A.1.1 Avec interaction

En l'absence de saut ($t_h = 0$), avec un désordre W relativement fort, il est toujours possible de trouver des valeurs de U telles que les deux niveaux multi-particules les plus bas d'un échantillon donné soient quasi-dégénérés. Par exemple, l'un peut minimiser l'énergie d'interaction (avec un cristal de Wigner) et l'autre peut être légèrement différent. Dans la seconde configuration, l'augmentation de l'énergie d'interaction est compensée par une diminution de l'énergie de désordre.

Or, les deux premiers états multi-particules dans certains échantillons peuvent être connectés par le simple saut d'une particule. La probabilité d'une telle situation est relativement grande puisqu'un état multi-particule est couplé à beaucoup d'autres directement par le saut d'une particule.

Dans ces échantillons, l'introduction du saut ($t_h = 1$) couple donc directement deux niveaux quasi-dégénérés. Si les valeurs de U et W sont suffisamment fortes, les particules restent localisées sur des sites individuels, sauf celle qui est impliquée dans la connexion des deux états. On a donc une délocalisation du fondamental dans la base des états sur site ($\mathcal{R} = 2$).

Pour $\langle \Delta \rangle > t_h$ (petite taille ou très grand désordre), les deux niveaux couplés peuvent à nouveau être considéré comme un système à deux niveaux, et les corrélations non-universelles apparaissent comme expliqué plus haut.

Pour $\langle \Delta \rangle < t_h$ (taille plus grande et désordre pas trop fort), davantage de niveaux sont couplés et l'approximation du système à deux niveaux ne tient plus. Comme pour le cas sans interaction, ce mécanisme disparaît dans la limite thermodynamique. Cependant, d'autres mécanismes impliquant davantage de sauts peuvent intervenir et la compétition entre désordre et interaction peut toujours induire une délocalisation et finalement mener aux corrélations spectrales observées dans [57].

Annexe B

Courant permanent dans un anneau comportant un diffuseur

Dans cette Annexe, nous considérons en détail la situation dans laquelle un nano-système quelconque fermé sur lui-même en une boucle par un simple canal (voir Figure 4.2) peut être décrit par une théorie à une particule. Nous montrons comment obtenir un développement en $1/L$ pour le courant permanent J en fonction du flux magnétique φ , ainsi que pour la raideur de charge \mathcal{D} .

La première contribution pour chacun de ces développements a été calculée en 1994 dans la référence [128]. La première correction pour la raideur de charge (d'ordre un en $1/L$) a été dérivée par R. A. Molina *et al.* dans la référence [78]. Dans cette référence, cependant, une définition malheureuse du vecteur d'onde de Fermi mène à une apparente dépendance de cette correction à la parité du nombre total de particules. Ici nous calculons les trois premiers termes du développement de la raideur de charge (donc jusqu'à l'ordre deux en $1/L$) et montrons qu'il n'y a en réalité pas de distinction de parité. Pour le courant permanent (ainsi que pour la courbure \mathcal{C}), nous nous contentons de redériver le premier terme.

B.1 États à une particule

B.1.1 Matrice de diffusion et matrice de transfert

En l'absence d'interaction, on peut avoir recours au formalisme de la matrice de diffusion (voir par exemple [62]).

Les états propres dans un canal sont des ondes planes. De part et d'autre du nano-système, on associe des amplitudes complexes à ces ondes : a et d pour les ondes planes entrant dans le nano-système à gauche et à droite, respectivement, et b et c pour les ondes sortant du nano-système.

Au lieu de décrire le système par son Hamiltonien, on peut décrire comment les ondes planes incidentes à une énergie donnée sont diffusées par le système. La matrice de diffusion S_S décrivant ceci relie les amplitudes entrant dans le nano-système aux amplitudes en sortant :

$$\begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} = S_S \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Un nano-système quelconque peut ainsi être décrit par la matrice de diffusion générale

$$S_S = \begin{pmatrix} t & r \\ r' & t' \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Comme nous n'avons ici qu'un seul canal par accès, les amplitudes de transmission t et t' et les amplitudes de réflexion r et r' sont de simples nombres complexes (dépendant de l'énergie). Ainsi S_S est une matrice deux par deux.

On peut également décrire le nano-système par sa matrice de transfert, M_S . La matrice M_S relie les amplitudes à droite du nano-système aux amplitudes à gauche :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M_S \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Cette propriété rend les matrices de transfert particulièrement faciles à combiner : la matrice de transfert de deux objets placés en série est simplement le produit des matrices

de transfert des deux objets.

Il existe bien entendu un lien entre matrice de transfert et matrice de diffusion. Il est facile de montrer :

$$M_S = \begin{pmatrix} 1/t & -r/t \\ r'/t & 1/t'^* \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

B.1.2 États à une particule

Pour décrire la boucle, il nous faut combiner S_S avec la matrice

$$S_L = \begin{pmatrix} e^{ikL_L+i\Phi} & 0 \\ 0 & e^{ikL_L-i\Phi} \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

décrivant le fil¹ de longueur L_L : la transmission du fil est évidemment de un avec une phase correspondant simplement à la phase kL_L accumulée sur la longueur du fil. À cette phase s'ajoute (ou se retranche, selon le sens de parcours) la phase $\Phi = e\varphi/\hbar$ due au flux magnétique φ .

Pour combiner le fil et le nano-système, nous utilisons les matrices de transfert :

$$M_S = \begin{pmatrix} 1/t & -r/t \\ -r^*/t^* & 1/t^* \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

où on a supposé la symétrie par renversement du temps dans le nano-système, ce qui implique que $t = t'$ (que l'on notera $t = |t|e^{i\alpha}$), et

$$M_L = e^{-i\Phi} \begin{pmatrix} e^{-ikL_L} & 0 \\ 0 & e^{ikL_L} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Comme nous avons des conditions de bords périodiques, un électron faisant le tour

¹En anglais, *fil* se dit *lead*, d'où l'indice L utilisé ici. L'indice F prêterait à confusion avec par exemple celui dans l'énergie de Fermi E_F .

du système doit se retrouver dans le même état :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M_S M_L \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

quelque soient a et b . On peut écrire cette condition :

$$\det(I - M_S M_L) = 0. \quad (\text{B.9})$$

Cela mène directement à la condition de quantification des vecteurs d'onde k des états à une particule :

$$\cos(\Phi) = \frac{1}{|t(k)|} \cos(kL + \delta\alpha(k)). \quad (\text{B.10})$$

Ici, on a défini la phase relative $\delta\alpha = \alpha - kL_S$ et on a introduit la longueur totale de la boucle $L = L_L + L_S$.

On peut aisément inverser l'équation (B.10) pour obtenir une équation implicite pour les vecteurs d'onde des états à une particule :

$$k_n^\pm = k_n^0 + \frac{1}{L} f_\pm(k_n^\pm, \Phi), \quad (\text{B.11})$$

$$\text{où } k_n^0 = \frac{2\pi n}{L} \quad (\text{B.12})$$

sont les solutions à flux nul dans le cas où on remplace le nano-système par un simple fil sans interaction de longueur L_S (on a alors $|t| = 1$ et $\delta\alpha = 0$) et où on a défini la fonction

$$f_\pm(k, \Phi) = \pm \arccos(|t(k)| \cos(\Phi)) - \delta\alpha(k). \quad (\text{B.13})$$

Comme k doit être positif, le signe moins ne doit pas être utilisé pour $n = 0$. Lorsque $\delta\alpha(k)$ varie lentement sur $2\pi/L$, échelle sur laquelle sont séparés les k_n^0 , l'ordre des vecteurs d'ondes (et donc des niveaux d'énergie) est donné d'abord par n , puis par le signe utilisé. Cela est toujours le cas pour des tailles L suffisamment grandes.

L'équation (B.11) est une équation implicite puisque $f_\pm(k, \Phi)$ dépend lui-même de k à travers $|t|$ et $\delta\alpha$. Dans le cas général, il n'est ainsi pas possible d'avoir une solution analytique pour k . Il est par contre possible de faire des progrès si on s'intéresse à la limite d'un fil de taille infinie ($L \gg 1$).

On commence par insérer l'équation (B.11) dans elle-même pour obtenir le développement en puissance de $1/L$ pour les vecteurs d'ondes :

$$\begin{aligned}
 k_n^\pm &= k_n^0 + \frac{1}{L} f_\pm(k_n^0, \Phi) + \frac{1}{L^2} f_\pm(k_n^0, \Phi) \left(\frac{\partial f_\pm(k, \Phi)}{\partial k} \right)_{k=k_n^0} \\
 &+ \frac{1}{2L^3} \frac{\partial}{\partial k} \left(f_\pm^2(k, \Phi) \frac{\partial f_\pm(k, \Phi)}{\partial k} \right)_{k=k_n^0} \\
 &+ \frac{1}{6L^4} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \left(f_\pm^3(k, \Phi) \frac{\partial f_\pm(k, \Phi)}{\partial k} \right)_{k=k_n^0} + O\left(\frac{1}{L^5}\right)
 \end{aligned} \tag{B.14}$$

Notons que les deux premiers termes peuvent être du même ordre, puisque k_n^0 est un vecteur d'onde (voir (B.12)). Près des résonances, les dérivées par rapport à k de $\delta\alpha$ et de $|t|$ peuvent être grandes et donc le développement ci-dessus n'est valable que pour des tailles L suffisamment grandes, voir la discussion dans le Chapitre 4.

Comme il n'y a pas de corrélations, la relation de dispersion $\epsilon(k)$ dans le fil ne change pas lorsque le nano-système est introduit. On peut donc obtenir l'énergie des états à une particule de la boucle en y introduisant l'équation (B.14) :

$$\begin{aligned}
 \epsilon(k_n^\pm) &= \epsilon(k_n^0) + \frac{1}{L} \frac{d\epsilon}{dk} f_\pm(k_n^0, \Phi) + \frac{1}{2L^2} \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{d\epsilon}{dk} f_\pm^2(k, \Phi) \right)_{k=k_n^0} \\
 &+ \frac{1}{6L^3} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \left(\frac{d\epsilon}{dk} f_\pm^3(k, \Phi) \right)_{k=k_n^0} \\
 &+ \frac{1}{24L^4} \frac{\partial^3}{\partial k^3} \left(\frac{d\epsilon}{dk} f_\pm^4(k, \Phi) \right)_{k=k_n^0} + O\left(\frac{1}{L^5}\right).
 \end{aligned} \tag{B.15}$$

Pour un nombre $N = 2n_F + 1$ impair de particules (dénnoté par l'index supérieur (i)), l'énergie du fondamental de la boucle s'écrit :

$$E^{(i)} = \epsilon(k_0^+) + \sum_{n=1}^{n_F} [\epsilon(k_n^+) + \epsilon(k_n^-)]. \tag{B.16}$$

Comme on est intéressé par le courant permanent, les seules contributions que l'on souhaite garder sont celles qui dépendent du flux Φ . En explicitant la fonction $f_\pm(k, \Phi)$,

on obtient :

$$\epsilon(k_0^+) = -\frac{1}{L^3} \cos \Phi \left(\left[\frac{\pi}{2} - \delta\alpha \right]^2 \frac{d^2\epsilon}{dk^2} \frac{d|t|}{dk} \right)_{k=0} \quad (\text{B.17})$$

$$\begin{aligned} \epsilon(k_n^+) + \epsilon(k_n^-) &= \frac{1}{L^2} \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arccos^2(|t| \cos \Phi) \right)_{k=k_n^0} \\ &\quad - \frac{1}{L^3} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \delta\alpha \arccos^2(|t| \cos \Phi) \right)_{k=k_n^0} \\ &\quad + \frac{1}{12L^4} \frac{\partial^3}{\partial k^3} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arccos^2(|t| \cos \Phi) (6\delta\alpha^2 + \arccos^2(|t| \cos \Phi)) \right)_{k=k_n^0} \\ &\quad + O\left(\frac{1}{L^5}\right). \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Comme la somme sur n dans (B.16) comporte un nombre de termes proportionnel à L , on a écrit $\epsilon(k_n^+) + \epsilon(k_n^-)$ un ordre plus loin que $\epsilon(k_0^+)$.

Dans les expressions ci-dessus on a supposé raisonnablement que $k = 0$ correspond à un minimum de l'énergie et donc que $(d\epsilon/dk)_{k=0} = 0$. D'autre part, on a utilisé les égalités suivantes concernant le nano-système : $|t(0)| = 0$ et $\delta\alpha(0) = \pm\pi/2$. On peut motiver la généralité de ces deux dernières hypothèses à l'aide de l'argument suivant. La limite $k \rightarrow 0$ correspond à la limite des grandes longueurs d'onde. Quelque soit le nano-système, ce dernier est vu comme ponctuel par les électrons dans cette limite. On peut donc supposer le système continu et représenter le potentiel du nano-système par une fonction de Dirac : $V(x) = A\delta(x)$. L'amplitude de transmission dans ces conditions s'écrit [2] :

$$t = 1 / \left(1 + \frac{A}{2ik} \right). \quad (\text{B.19})$$

Dans la limite $k \rightarrow 0$, on voit que les hypothèses sont vérifiées pour toute amplitude $A \neq 0$. Ceci n'est cependant pas une démonstration générale et il est possible de construire des systèmes particuliers pour lesquels les hypothèses ne tiennent pas. Cela ne sera toutefois pas le cas des systèmes que l'on considérera.

La suite du calcul, pour être efficace, dépend du but poursuivi. Nous allons commencer par nous intéresser au courant permanent.

B.2 Le courant permanent

On commence par déterminer l'énergie du fondamental multi-particule, en se limitant au premier ordre. On peut donc écrire :

$$E^{(i)(1)}(\Phi) = \frac{1}{2\pi L} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{2\pi}{L}n_F + \frac{\pi}{L}} dk \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arccos^2 (|t| \cos \Phi) \right)_{k=k_n^0} \quad (\text{B.20})$$

où on a gardé que le premier terme de l'équation (B.18) et où on a fait la substitution :

$$\sum_{n=1}^{n_F} \longrightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{2\pi}{L}n_F + \frac{\pi}{L}} dk. \quad (\text{B.21})$$

Dans le cas d'un nombre impair de particules, $n_F = (N - 1)/2$. Si on veut définir le vecteur d'onde de Fermi à partir du remplissage :

$$k_F = \pi \frac{N}{L}, \quad (\text{B.22})$$

on voit que la borne supérieure de l'intégrale est égale² à k_F .

Comme d'autre part nous ne sommes intéressés dans cette section que par le premier terme du développement en $1/L$, nous pouvons remplacer la borne inférieure π/L par 0. On obtient donc, pour la première contribution dépendant du flux à l'énergie du fondamental pour un nombre N de particules impair :

$$E^{(i)(1)}(\Phi) = \frac{\hbar v_F}{2\pi L} \arccos^2 (|t(E_F)| \cos(\Phi)). \quad (\text{B.23})$$

Cela nous permet d'obtenir le courant permanent [128] en dérivant par rapport à φ :

$$\begin{aligned} J^{(i)(1)}(\Phi) &= -\frac{\partial E_0^{(i)(1)}}{\partial \varphi} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial E_0^{(i)(1)}}{\partial \Phi} \\ &= -\frac{e v_F \arccos (|t(E_F)| \cos(\Phi))}{\pi L \sqrt{1 - |t(E_F)|^2 \cos^2(\Phi)}} |t(E_F)| \sin(\Phi). \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Pour le cas N pair, on retranche simplement $\epsilon(k_F)$ à l'énergie (B.23), ce qui donne

²Dans la référence [78], k_F était défini comme $2\pi n_F/L$.

l'énergie du fondamental

$$E^{(p)(1)}(\Phi) = \frac{\hbar v_F}{2\pi L} \arccos^2(|t(E_F)| \cos(\pi - \Phi)), \quad (\text{B.25})$$

et le courant permanent

$$J^{(p)(1)}(\Phi) = \frac{ev_F}{\pi L} \frac{\arccos(|t(E_F)| \cos(\pi - \Phi))}{\sqrt{1 - |t(E_F)|^2 \cos^2(\Phi)}} |t(E_F)| \sin(\Phi) \quad (\text{B.26})$$

À partir du courant permanent, il est possible d'obtenir la courbure :

$$\mathcal{C}_\infty = L \frac{\partial^2 E^{(1)}}{\partial \varphi^2} \Big|_{\varphi=0} = -L \frac{e}{\hbar} \frac{\partial J^{(1)}}{\partial \Phi} \Big|_{\Phi=0}. \quad (\text{B.27})$$

Pour le cas impair, on obtient :

$$\mathcal{C}_\infty = \frac{ev_F}{\pi \hbar} \frac{|t(E_F)| \arccos(|t(E_F)|)}{\sqrt{1 - |t(E_F)|^2}}. \quad (\text{B.28})$$

Pour le cas pair, le résultat obtenu diverge pour $|t(E_F)| = 1$, ce qui peut être compris par le fait que le niveau fondamental à flux nul est dégénéré (voir Figure 1.3b). Travailler avec la courbure requiert donc de travailler avec un nombre impair de particules.

B.3 La raideur de charge

Parce qu'elle est calculable numériquement sans avoir besoin de manipuler des nombres complexes, et parce qu'elle ne souffre pas d'une dépendance à la parité du nombre de particules, il peut être préférable de travailler avec la raideur de charge :

$$\mathcal{D} = (-1)^N \frac{L}{2} (E(0) - E(\pi)). \quad (\text{B.29})$$

On peut déjà l'obtenir au premier ordre non-nul à partir des équations (B.23) et (B.25). Cependant, comme nous voulons aussi les ordres suivants, le calcul est moins laborieux si nous revenons d'abord aux énergies des états à une particule.

Si on définit la quantité :

$$\Delta \epsilon_n^\pm = \epsilon(k_n^\pm)_{\Phi=\pi} - \epsilon(k_n^\pm)_{\Phi=0}, \quad n \geq 0, \quad (\text{B.30})$$

alors la raideur de charge s'écrit dans le cas impair :

$$\mathcal{D}^{(i)} = \frac{L}{2} \left[\Delta\epsilon_0^+ + \sum_{n=1}^{n_F} (\Delta\epsilon_n^- + \Delta\epsilon_n^+) \right] \quad (\text{B.31})$$

et dans le cas pair :

$$\mathcal{D}^{(p)} = \frac{-L}{2} \left[\Delta\epsilon_0^+ + \sum_{n=1}^{n_F} (\Delta\epsilon_n^- + \Delta\epsilon_n^+) - \Delta\epsilon_{n_F}^+ \right] \quad (\text{B.32})$$

Pour calculer les sommes dans ces expressions, on peut comme précédemment remplacer la somme par une intégrale. L'erreur introduite ce faisant est de l'ordre de $1/L^2$ et va affecter le terme d'ordre deux. Nous allons donc la prendre en compte. Pour une fonction $g(k)$ quelconque, on peut montrer que :

$$\sum_{n=1}^{n_F} g\left(\frac{2\pi}{L}n\right) = \frac{L}{2\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{\frac{2\pi}{L}n_F + \frac{\pi}{L}} g(k)dk - \frac{\pi^2}{6L^2} \sum_{n=1}^{n_F} g''\left(\frac{2\pi}{L}n\right) + O\left(\frac{1}{L^4}\right) \quad (\text{B.33})$$

Nous allons utiliser cette identité (en approximant la dernière somme par une intégrale). Pour ce faire, nous définissons une fonction $\Delta\epsilon$ de k telle que $\Delta\epsilon(k = k_n^0) = \Delta\epsilon_n^- + \Delta\epsilon_n^+$. D'autre part, comme on veut définir k_F à partir du remplissage ($k_F = \pi N/L$), l'écriture de la borne supérieure de l'intégrale en fonction de k_F dépend de la parité du nombre de particules puisque $n_F = (N-1)/2$ si N est impair et $n_F = N/2$ si N est pair. Au final on peut écrire :

$$\mathcal{D}^{(i)} = \frac{L}{2}\Delta\epsilon_0^+ + \frac{L^2}{4\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{k_F} \Delta\epsilon(k)dk - \frac{\pi}{24} (\Delta\epsilon'(k_F) - \Delta\epsilon'(0)) \quad (\text{B.34})$$

$$\mathcal{D}^{(p)} = -\frac{L}{2}\Delta\epsilon_0^+ - \frac{L^2}{4\pi} \int_{\frac{\pi}{L}}^{k_F + \frac{\pi}{L}} \Delta\epsilon(k)dk + \frac{\pi}{24} (\Delta\epsilon'(k_F) - \Delta\epsilon'(0)) + \frac{L}{2}\Delta\epsilon_{n_F}^+ \quad (\text{B.35})$$

On remarque que pour le terme corrigeant l'erreur fait par le passage de la somme à l'intégrale on a approximé les bornes à 0 et k_F dans les deux cas. Ceci est valable puisque ce terme est déjà d'ordre $1/L^2$. Pour les intégrales, par contre, il faudra développer leur résultat autour de zéro et, pour le cas pair, de k_F .

Ces points un peu délicats étant explicités, il ne reste plus qu'à tout mettre ensemble

en utilisant les expressions suivantes :

$$\Delta\epsilon_0^+ = \frac{2}{L^3} \left(\frac{d^2\epsilon}{dk^2} \frac{d|t|}{dk} \left[\frac{\pi}{2} - \delta\alpha \right]^2 \right)_{k=0} \quad (\text{B.36})$$

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon_{n_F}^+ &= \frac{2}{L} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arcsin(|t|) \right)_{k=\frac{2\pi}{L}n_F} + \frac{1}{L^2} \frac{d}{dk} \left(\frac{d\epsilon}{dk} (\pi - 2\delta\alpha) \arcsin(|t|) \right)_{k=\frac{2\pi}{L}n_F} \\ &+ \frac{1}{2L^3} \frac{d^2}{dk^2} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arcsin(|t|) \left[\frac{2 \arcsin^2(|t|)}{3} + \pi^2/2 + 2\delta\alpha^2 - 2\pi\delta\alpha \right] \right)_{k=\frac{2\pi}{L}n_F} \\ &+ O\left(\frac{1}{L^4}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon(k) &= \frac{2\pi}{L^2} \frac{d}{dk} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arcsin(|t|) \right) - \frac{2\pi}{L^3} \frac{d^2}{dk^2} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \delta\alpha \arcsin(|t|) \right) \\ &+ \frac{\pi}{3L^4} \frac{d^3}{dk^3} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arcsin(|t|) \left[\arcsin^2(|t|) + 3\delta\alpha^2 + \frac{\pi^2}{4} \right] \right) + O\left(\frac{1}{L^5}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

On obtient ainsi les trois premiers termes du développement en $1/L$ de la raideur de charge :

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_\infty + \mathcal{D}^{(1)} + \mathcal{D}^{(2)} \quad (\text{B.39})$$

$$\mathcal{D}_\infty = \frac{\hbar v_F}{2} \arcsin(|t(k_F)|) \quad (\text{B.40})$$

$$\mathcal{D}^{(1)} = -\frac{1}{2L} \frac{d}{dk} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \delta\alpha \arcsin(|t|) \right)_{k=k_F} \quad (\text{B.41})$$

$$\mathcal{D}^{(2)} = \frac{1}{4L^2} \frac{d^2}{dk^2} \left(\frac{d\epsilon}{dk} \arcsin(|t|) \left[\frac{1}{3} \arcsin^2(|t|) + \delta\alpha^2 - \frac{\pi^2}{4} \right] \right)_{k=k_F} \quad (\text{B.42})$$

On remarque que le résultat final est le même quelque soit la parité de N .

Annexe C

Diffusion par un puits de potentiel

Nous nous proposons dans cette Annexe de calculer l'amplitude de transmission d'un puits de potentiel rectangulaire dans un modèle de liaison forte (voir schéma Figure C.1). Cela nous permettra de vérifier la validité du programme DMRG dans le cas sans interaction.

Le Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = - \sum_{i=-\infty}^{\infty} (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.) - V_g \sum_{i=1}^{L_S} \hat{n}_i. \quad (\text{C.1})$$

Soit $|\psi\rangle$ l'état de diffusion correspondant à ce Hamiltonien. On peut écrire

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(n) c_n^\dagger |0\rangle \quad (\text{C.2})$$

On découpe l'espace en trois zones. Le vecteur d'onde est le même à gauche et à droite du puits. On fait les ansatz suivant [2] :

$$\psi(n) = \begin{cases} a_1 e^{ikn} + b_1 e^{-ikn} & \text{à gauche } (n \leq 0) \\ a_2 e^{ik_2 n} + b_2 e^{-ik_2 n} & \text{dans le puits } (1 \leq n \leq L_S) \\ a_3 e^{ikn} + b_3 e^{-ikn} & \text{à droite } (n \geq L_S + 1) \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

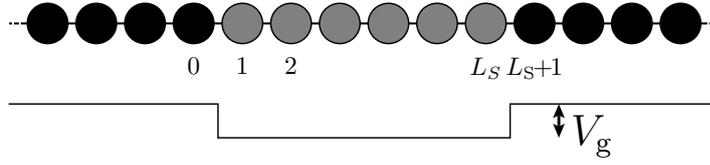


FIG. C.1: Partie centrale d'une chaîne unidimensionnelle infinie dont on calcule l'amplitude de transmission. Un potentiel de grille $-V_g$ est appliqué aux sites 1 à L_S .

L'équation de Schrödinger pour notre Hamiltonien s'écrit :

$$-[\psi(n-1) + \psi(n+1)] = [E - V(n)] \psi(n) \quad (\text{C.4})$$

où $V(n)$ vaut $-V_g$ si $1 \leq n \leq L_S$ et s'annule sinon.

Si on applique cette équation loin des bords du puits, on trouve que les ansatz que nous avons fait sont valables à condition que les deux équations suivantes soient vérifiées :

$$E = -2 \cos(k) \quad (\text{C.5})$$

$$E = -2 \cos(k_2) - V_g. \quad (\text{C.6})$$

Cela permet de déterminer le vecteur d'onde dans le puits :

$$k_2 = \arccos\left(\cos(k) - \frac{V_g}{2}\right). \quad (\text{C.7})$$

Pour $n = 0$, l'équation de Schrödinger fait intervenir $\psi(1)$. Si l'on écrivait $\psi(1)$ en utilisant l'ansatz de gauche, on sait que l'équation serait vérifiée. Ainsi, l'équation de Schrödinger pour $n = 0$ peut simplement s'énoncer en écrivant que les deux ansatz (celui de gauche et celui dans le puits) doivent concorder en $n = 1$:

$$a_1 e^{ik} + b_1 e^{-ik} = a_2 e^{ik_2} + b_2 e^{-ik_2}. \quad (\text{C.8})$$

On écrit de même l'équation de Schrödinger pour $n = 1$, et on rassemble les deux équations correspondantes sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{e^{ik} - e^{-ik}} \begin{pmatrix} e^{ik_2} - e^{-ik} & e^{-ik_2} - e^{-ik} \\ e^{ik} - e^{ik_2} & e^{ik} - e^{-ik_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.9})$$

On fait de même avec les équations pour $n = L_S$ et $n = L_S + 1$ pour obtenir :

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{e^{ik_2} - e^{-ik_2}} \begin{pmatrix} (e^{ik} - e^{-ik_2})e^{i(k-k_2)L_S} & (e^{-ik} - e^{-ik_2})e^{-i(k+k_2)L_S} \\ (e^{ik_2} - e^{ik})e^{i(k+k_2)L_S} & (e^{ik_2} - e^{-ik})e^{i(k_2-k)L_S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix} \quad (\text{C.10})$$

On peut maintenant insérer (C.10) dans (C.9) pour obtenir une formule liant les amplitudes des ondes planes à droite du puits à celles à gauche. On peut écrire :

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = M_S \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.11})$$

où M_S est en réalité la matrice de transfert du puits (qui constitue ici le nano-système). Il nous suffit de calculer uniquement le premier élément de la première ligne de cette matrice, qui se trouve être égal à l'inverse de l'amplitude de transmission (voir l'équation (B.4)). On obtient :

$$t = \frac{-2 \sin(k) \sin(k_2) e^{-ikL_S}}{(1 - \cos(k - k_2)) e^{ik_2L_S} - (1 - \cos(k + k_2)) e^{-ik_2L_S}}. \quad (\text{C.12})$$

C'est le résultat principal de cette Annexe.

Si on se place à demi-remplissage et qu'on s'intéresse à ce qui se passe à $k_F = \pi/2$, on peut obtenir des formules assez simples pour le module et l'argument :

$$|t(k_F)|^2 = \left(\cos^2(k_g L_S) + \frac{\sin^2(k_g L_S)}{\sin^2(k_g)} \right)^{-1} \quad (\text{C.13})$$

$$\delta\alpha(k_F) = \arctan \left(\frac{\sin(k_g L_S)}{\sin(k_g) \cos(k_g L_S)} \right) \quad (\text{C.14})$$

où on a défini le vecteur d'onde $k_g = k_2(k = \pi/2) = \arccos\left(-\frac{V_g}{2}\right)$. De la façon dont on a défini nos ansatz, l'argument de t donne directement la phase relative $\delta\alpha$. Si l'on souhaite prendre en compte la taille du puits, la phase associée est donnée par $\alpha = \delta\alpha + kL_S$. D'autre part, ces deux expressions posent problème si $|V_g| \geq 2$. Dans ce régime, il faut les redériver et les formules obtenues correspondent à (C.13) et (C.14) dans lesquelles on a remplacé les fonctions trigonométriques sin, cos et arccos par les fonctions hyperboliques correspondantes sh, ch et argch.

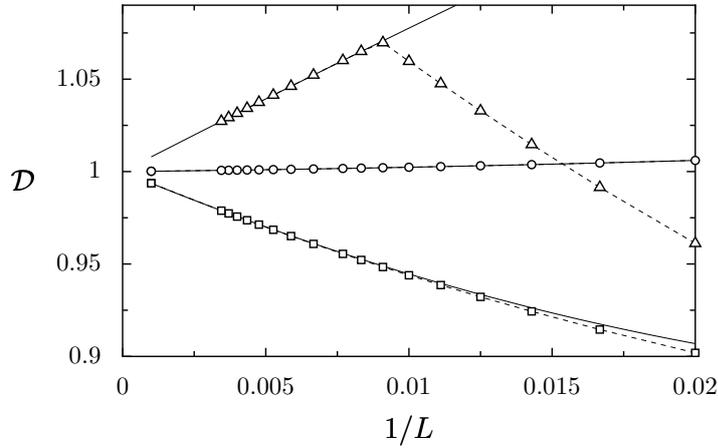


FIG. C.2: \mathcal{D} en fonction de $1/L$ pour $V_g = 0.5$ (cercles), $V_g = 0.875$ (carrés) et $V_g = 1.06$ (triangles). Les lignes sont obtenues en portant (C.12) dans (B.39), les symboles (relié par des pointillés) correspondent aux résultats numériques DMRG.

À propos de la phase relative, on note que l'ensemble image de la fonction arctan est $[-\pi/2, \pi/2]$. Or $\delta\alpha$ est défini exactement, et non pas à π ou 2π près. Il faut donc apporter une correction manuellement. Sachant que $\delta\alpha = 0$ pour $V_g = 0$, il suffit de suivre le comportement de l'arctan lorsque l'on fait varier V_g de zéro jusqu'à la valeur désirée et d'ajouter π pour chaque saut observé.

Les équations (C.13) et (C.14) sont utilisées dans le Chapitre 4 pour vérifier le programme DMRG et la méthode de la boucle en l'absence d'interaction ($U=0$). Ici nous pouvons aller plus loin et vérifier que les formules obtenues dans l'Annexe B donnent bien les résultats DMRG à taille finie.

Pour ce faire, on utilise l'expression de l'amplitude de transmission (C.12) (on utilise aussi (C.7)) à partir de laquelle on calcule le module $|t|$ et la phase relative $\delta\alpha$ (en prenant soin de compenser tout saut en fonction de V_g) que l'on peut ensuite insérer dans le développement (B.39 – B.42). Pour gérer la taille des expressions obtenues, la procédure est réalisée semi-analytiquement à l'aide d'un logiciel de calcul formel.

La Figure C.2 montre la comparaison des résultats ainsi obtenus avec les résultats numériques du programme DMRG. On voit que l'accord est d'autant meilleur que L est grand. Cet accord peut aller jusqu'au dixième chiffre significatif pour $L = 1000$ et $V_g = 0.5$.

L'origine du désaccord repose d'une part sur le fait que l'équation (B.39) est un

développement limité (et donc d'autant plus valable que $1/L$ est petit), et d'autre part sur le fait que l'énergie de Fermi dans le fil n'est parfaitement défini qu'à taille L infinie. Ce dernier point est particulièrement flagrant pour la courbe à $V_g = 1.06$, qui se situe à droite d'une résonance et qui a été obtenue sans compenser le remplissage dans le fil (voir discussion détaillée dans la section 4.2).

Bibliographie

- [1] *Some time with Feynman*, Leonard Mlodinow, Penguin Books Ltd (2004).
- [2] L. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1968), 3rd edition.
- [3] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki, and H. Ezawa, *Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern*, American Journal of Physics **57**, 117 (1989).
- [4] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid state physics* (Saunders College Publishing, New York, 1976).
- [5] G. Bergmann, *Weak Localization in Thin Films*, Physics Reports **107**, 1 (1984).
- [6] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Disordered electronic systems*, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [7] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Scaling theory of localisation : Absence of quantum diffusion in two dimensions*, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [8] F. Hund, *Rechnungen über das magnetische verhalten von kleinen metallstücken bei tiefen temperaturen*, Ann. Phys. (Leipzig) **32**, 102 (1938).
- [9] M. Büttiker, Y. Imry and R. Landauer, *Josephson behavior in small normal one-dimensional rings*, Phys. Lett. **96A**, 365 (1983).
- [10] H.-F. Cheung, Y. Gefen, E. K. Riedel, and W.-H. Shih, *Persistent currents in small one-dimensional metal rings*, Phys. Rev. B **37**, 6050 (1988).
- [11] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris, 1973).
- [12] L. P. Kouwenhoven, C. M. Marcus, P. L. McEuen, S. Tarucha, R. M. Westervelt, and N. S. Wingreen, in *Mesoscopic electron transport*, edited by L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, and G. Schön (1997).

- [13] Y. Alhassid, *The statistical theory of quantum dots*, Rev. Mod. Phys. **72**, 895 (2000).
- [14] D. Ullmo and H. U. Baranger, *Interactions in chaotic nanoparticles : Fluctuations in Coulomb blockade peak spacings*, Phys. Rev. B **64**, 245324 (2001).
- [15] G. Usaj and H. U. Baranger, *Exchange and the Coulomb blockade : Peak height statistics in quantum dot*, Phys. Rev. B **67**, 121308(R) (2003).
- [16] B. Tanatar and D. M. Ceperley, *Ground state of the two-dimensional electron gas*, Phys. Rev. B **39**, 5005 (1989).
- [17] V. M. Pudalov, M. D'Iorio, S. V. Kravchenko, and J. W. Campbell, *Zero-magnetic-field collective insulator phase in a dilute 2d electron system*, Phys. Rev. Lett. **70**, 1866 (1993).
- [18] G. Benenti, X. Waintal, and J.-L. Pichard, *New quantum phase between the Fermi glass and the Wigner crystal in two dimensions*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1826 (1999).
- [19] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio, *Possible metal-insulator-transition at $B = 0$ in two dimensions*, Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994).
- [20] A. R. Hamilton, M. Y. Simmons, M. Pepper, E. H. Linfield, P. R. Rose, and D. A. Ritchie, *Reentrant insulator-metal transition at $B = 0$ in a two-dimensional hole gas*, Phys. Rev. Lett. **82**, 1542 (1999).
- [21] S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik, *Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems*, Rep. Prog. Phys. **67**, 1 (2004).
- [22] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik, *Colloquium : Metallic behavior and related phenomena in two dimensions*, Rev. Mod. Phys. **73**, 251 (2001).
- [23] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, and P. A. Lee, *Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions*, Phys. Rev. Lett. **44**, 1288 (1980).
- [24] E. Abrahams, *Theoretical approaches to the metal-insulator transition in 2D*, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 539 (1999).
- [25] L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir, and H. Bouchiat, *Magnetization of mesoscopic copper rings : Evidence for persistent currents*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2074 (1990).
- [26] B. L. Altshuler, Y. Gefen, and Y. Imry, *Persistent differences between canonical and grand canonical averages in mesoscopic ensembles : Large paramagnetic orbital susceptibilities*, Phys. Rev. Lett. **66**, 88 (1991).
- [27] F. von Oppen and E. K. Riedel, *Average persistent current in a mesoscopic ring*, Phys. Rev. Lett. **66**, 84 (1991).

- [28] V. Chandrasekhar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen, W. J. Gallagher, and A. Kleinsasser, *Magnetic response of a single, isolated gold loop*, Phys. Rev. Lett. **67**, 3578 (1991).
- [29] D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, *Experimental observation of persistent currents in GaAs-AlGaAs single loop*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2020 (1993).
- [30] B. Reulet, M. Ramin, H. Bouchiat, and D. Mailly, *Dynamic response of isolated Aharonov-Bohm rings coupled to an electromagnetic resonator*, Phys. Rev. Lett. **75**, 124 (1995).
- [31] U. Eckern and P. Schwab, *Normal persistent currents*, Advances in Physics **44**, 387 (1995).
- [32] M. Boehm, M. Hofheinz, X. Jehl, M. Sanquer, M. Vinet, B. Previtalli, B. Fraboulet, D. Mariolle, and S. Deleonibus, *Size scaling of the addition spectra in silicon quantum dots*, Phys. Rev. B **71**, 033305 (2005).
- [33] M. Hofheinz, X. Jehl, M. Sanquer, G. Molas, M. Vinet and S. Deleonibus, *Individual charge traps in silicon nanowires : Measurements of location, spin and occupation number by Coulomb blockade spectroscopy*, arXiv :cond-mat/0504325.
- [34] Y. V. Nazarov, *Coulomb blockade without tunnel junctions*, Phys. Rev. Lett. **82**, 1245 (1999).
- [35] R. J. Bartlett and J. F. Stanton, "Applications of post-Hartree-Fock methods : a tutorial", chap. 2 of *Reviews in Computational Chemistry Vol. V* (VCF Publishers, New York 1994).
- [36] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous electron gas*, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [37] W. Kohn and L. J. Sham, *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [38] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism* (Springer-Verlag, Paris, 1994).
- [39] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, *Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations*, vol. 1 (Birkhäuser, Boston, 1985).
- [40] S. White, *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [41] *Density-Matrix Renormalization – A New Numerical Method in Physics*, ed. by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg, Springer (Berlin/Heidelberg, 1999).

- [42] P. Schmitteckert, Ph.D. thesis (Univ. Augsburg, 1996).
- [43] J. R. Laguna, Ph.D. thesis (Universidad Complutense de Madrid, 2002), arXiv :cond-mat/0207340.
- [44] H. Falakshahi, Z. Á. Németh, and J.-L. Pichard, *Effect of a lattice upon an interacting system of electrons in two dimensions : Breakdown of scaling and decay of persistent currents*, Eur. Phys. J. B **39**, 93 (2004).
- [45] T. Giamarchi and B. S. Shastry, *Persistent currents in a one-dimensional ring for a disordered Hubbard model*, Phys. Rev. B **51**, 10915 (1995).
- [46] É. Gambetti-Césaire, D. Weinmann, R. A. Jalabert, and P. Brune, *Disorder-induced enhancement of the persistent current for strongly interacting electrons in one-dimensional rings*, Europhys. Lett. **60**, 120 (2002).
- [47] R. Kotlyar and S. Das Sarma, *Disorder and interaction in 2d : Exact diagonalization study of the Anderson-Hubbard-Mott model*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2388 (2001).
- [48] P. J. H. Denteneer, R. T. Scalettar, and N. Trivedi, *Conducting phase in the two-dimensional disordered Hubbard model*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4610 (1999).
- [49] P. Schmitteckert, R. A. Jalabert, D. Weinmann, and J.-L. Pichard, *From the Fermi glass towards the Mott insulator in one dimension : Delocalization and strongly enhanced persistent currents*, Phys. Rev. Lett. **81**, 2308 (1998).
- [50] D. Weinmann, P. Schmitteckert, R. A. Jalabert, and J.-L. Pichard, *Delocalization effects and charge reorganizations induced by repulsive interactions in strongly disordered chains*, Eur. Phys. J. B **19**, 139 (2001).
- [51] T. Vojta, F. Epperlein, and M. Schreiber, *Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons ? it depends !*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4212 (1998).
- [52] X. Waintal, G. Benenti, and J.-L. Pichard, *Delocalized Coulomb phase in two dimensions*, Europhys. Lett. **49**, 466 (2000).
- [53] H. Falakshahi and X. Waintal, *Hybrid phase at the quantum melting of the Wigner crystal*, Phys. Rev. Lett. **94**, 046801 (2005).
- [54] B. L. Al'tshuler and B. I. Shklovskii, *Repulsion of energy levels and conductivity of small metal samples*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **91**, 220 (1986), [Sov. Phys. JETP **64**, 127 (1986)].
- [55] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, and H. B. Shore, *Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition*, Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993).

- [56] M. L. Mehta, *Random matrices* (Academic Press, London, 1990).
- [57] G. Benenti, X. Waintal, J.-L. Pichard, and D. L. Shepelyansky, *Compressibility crossover and quantum opening of a gap for two-dimensional disordered clusters with Coulomb repulsion*, Eur. Phys. J. B **17**, 515 (2000).
- [58] H. M. Pastawski, *Classical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations*, Phys. Rev. B **44**, 6329 (1991).
- [59] H. J. Schulz, G. Cuniberti, and P. Pieri, in *Field theories for low-dimensional condensed matter systems*, edited by G. Morandi, P. Sodano, A. Tagliacozzo, and V. Tognetti (Springer, 2000), vol. 131 of *Solid State Sciences Series*.
- [60] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1971).
- [61] É. Akkermans and G. Montambaux, *Physique mésoscopique des électrons et des photons* (EDP Sciences/CNRS Éditions, Les Ulis, 2004).
- [62] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [63] R. Landauer, *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
- [64] R. Landauer, *Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices*, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).
- [65] M. Büttiker, *Four-terminal phase-coherent conductance*, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [66] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Relation between conductivity and transmission matrix*, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [67] Y. Meir and N. S. Wingreen, *Landauer formula for the current through an interacting electron region*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [68] N. S. Wingreen, A.-P. Jauho, and Y. Meir, *Time-dependent transport through a mesoscopic structure*, Phys. Rev. B **48**, 8487 (1993).
- [69] A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, *Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems*, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).
- [70] G. Stefanucci and C.-O. Almbladh, *Time-dependent quantum transport : An exact formulation based on TDDFT*, Europhys. Lett. **67**, 14 (2004).
- [71] P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. Karpan, M. Zwierzycki, and P. J. Kelly, *Conductance calculations for quantum wires and interfaces : Mode matching and Green's functions*, Phys. Rev. B **72**, 035450 (2005).

- [72] W. Kohn, *Theory of the insulating state*, Phys. Rev. **133**, A171 (1964).
- [73] D. J. Thouless, *Electrons in disordered systems and the theory of localization*, Physics Reports **13**, 93 (1974).
- [74] B. S. Shastry and B. Sutherland, *Twisted boundary condition and effective mass in Heisenberg-Ising and Hubbard rings*, Phys. Rev. Lett. **65**, 243 (1990).
- [75] R. M. Fye, M. J. Martins, D. J. Scalapino, J. Wagner, and W. Hanke, *Drude weight, optical conductivity, and flux properties of one-dimensional Hubbard rings*, Phys. Rev. B **44**, 6909 (1991).
- [76] E. Akkermans and G. Montambaux, *Conductance and statistical properties of metallic spectra*, Phys. Rev. Lett. **68**, 642 (1992).
- [77] R. Berkovits and Y. Avishai, *Interacting electrons in disordered potentials : conductance versus persistent currents*, Phys. Rev. Lett. **76**, 291 (1996).
- [78] R. A. Molina, P. Schmitteckert, D. Weinmann, R. A. Jalabert, G.-L. Ingold, and J.-L. Pichard, *Residual conductance of correlated one-dimensional nanosystems : A numerical approach*, Eur. Phys. J. B **39**, 107 (2004).
- [79] J. Favand and F. Mila, *Comparison of tunneling through molecules with mott-hubbard and with dimerization gaps*, Eur. Phys. J. B **2**, 293 (1998).
- [80] O. P. Sushkov, *Conductance anomalies in a one-dimensional quantum contact*, Phys. Rev. B **64**, 155319 (2001).
- [81] O. P. Sushkov, *Restricted and unrestricted Hartree-Fock calculations of conductance for a quantum point contact*, Phys. Rev. B **67**, 195318 (2003).
- [82] R. A. Molina, D. Weinmann, R. A. Jalabert, G.-L. Ingold, and J.-L. Pichard, *Conductance through a one-dimensional correlated system : Relation to persistent currents and the role of the contacts*, Phys. Rev. B **67**, 235306 (2003).
- [83] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Transport in a one-channel Luttinger liquid*, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992).
- [84] T. Rejec and A. Ramšak, *Formulas for zero-temperature conductance through a region with interaction*, Phys. Rev. B **68**, 035342 (2003).
- [85] V. Meden and U. Schollwöck, *Conductance of interacting nanowires*, Phys. Rev. B **67**, 193303 (2003).
- [86] R. A. Molina, D. Weinmann, and J.-L. Pichard, *Length-dependent oscillations of the conductance through atomic chains : The importance of electronic correlations*, Europhys. Lett. **67**, 96 (2004).

- [87] R. H. M. Smit, C. Untiedt, G. Rubio-Bollinger, R. C. Segers, and J. M. van Ruitenbeek, *Observation of a parity oscillation in the conductance of atomic wires*, Phys. Rev. Lett. **91**, 076805 (2003).
- [88] N. Agraït, A. L. Yeyati, and J. M. van Ruitenbeek, *Quantum properties of atomic-sized conductors*, Physics Reports **377**, 81 (2003).
- [89] D. L. Maslov and M. Stone, *Landauer conductance of Luttinger liquids with leads*, Phys. Rev. B **52**, R5539 (1995).
- [90] I. Safi and H. J. Schulz, *Transport in an inhomogeneous interacting one-dimensional system*, Phys. Rev. B **52**, R17040 (1995).
- [91] T. Rejec and A. Ramšak, *Conductance of interacting Aharonov-Bohm systems*, Phys. Rev. B **68**, 033306 (2003).
- [92] R. A. Molina, D. Weinmann, and J.-L. Pichard, *Interacting electron systems between Fermi leads : effective one-body transmissions and correlation clouds*, Eur. Phys. J. B **48**, 243 (2005).
- [93] G. Chiappe and J. A. Vergés, *Transport through an interacting system connected to leads*, J. Phys. : Condens. Matter **15**, 8805 (2003).
- [94] A. Oguri, *Transport through a finite hubbard chain connected to reservoirs*, Phys. Rev. B **59**, 12240 (1999).
- [95] I. L. Aleiner, P. W. Brouwer, and L. I. Glazman, *Quantum effects in Coulomb blockade*, Phys. Rep. **358**, 309 (2002).
- [96] B. W. Alphenaar, A. A. M. Staring, H. van Houten, M. A. A. Mabeoone, O. J. A. Buyk, and C. T. Foxon, *Influence of adiabatically transmitted edge channels on single-electron tunneling through a quantum dot*, Phys. Rev. B **46**, 7236 (1992).
- [97] I. K. Marmoros and C. W. J. Beenakker, *Activated transport through a quantum dot with extended edge channels*, Phys. Rev. B **46**, 15562 (1992).
- [98] H. Yi and C. L. Kane, *Coulomb blockade in a quantum dot coupled strongly to a lead*, Phys. Rev. B **53**, 12956 (1996).
- [99] K. A. Matveev, *Coulomb blockade at almost perfect transmission*, Phys. Rev. B **51**, 1743 (1995).
- [100] K. Flensberg, *Capacitance and conductance of mesoscopic systems connected by quantum point contacts*, Phys. Rev. B **48**, 11156 (1993).
- [101] A. Furusaki and K. A. Matveev, *Theory of strong inelastic cotunneling*, Phys. Rev. B **52**, 16676 (1995).

- [102] A. V. Andreev and K. A. Matveev, *Coulomb blockade oscillations in the thermopower of open quantum dots*, Phys. Rev. Lett. **86**, 280 (2001).
- [103] I. L. Aleiner and L. I. Glazman, *Mesoscopic charge quantization*, Phys. Rev. B **57**, 9608 (1998).
- [104] A. Kaminski, I. L. Aleiner, and L. I. Glazman, *Mesoscopic charge fluctuations in the Coulomb blockade regime*, Phys. Rev. Lett. **81**, 685 (1998).
- [105] P. W. Brouwer and I. L. Aleiner, *Effects of electron-electron interaction on the conductance of open quantum dots*, Phys. Rev. Lett. **82**, 390 (1999).
- [106] A. A. Odintsov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **94**, 312 (1988) [Sov. Phys. JETP **67**, 1265 (1988)].
- [107] W. Zwerger and M. Scharpf, Z. Phys. B **85**, 421 (1991).
- [108] G. Schön and A. D. Zaikin, *Quantum coherent effects, phase transitions, and the dissipative dynamics of ultra small tunnel junctions*, Physics Reports **198**, 237 (1990).
- [109] S. V. Panyukov and A. D. Zaikin, *Coulomb blockade and nonperturbative ground-state properties of ultrasmall tunnel junctions*, Phys. Rev. Lett. **67**, 3168 (1991).
- [110] V. A. Krupenin, A. B. Zorin, M. N. Savvateev, D. E. Presnov, and J. Niemeyer, *Single-electron transistor with metallic microstrips instead of tunnel junctions*, J. Appl. Phys. **90**, 2411 (2001).
- [111] D. S. Golubev and A. D. Zaikin, *Coulomb interaction and quantum transport through a coherent scatterer*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4887 (2001).
- [112] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard, *An adiabatic quantum electron pump*, Science **283**, 1905 (1999).
- [113] H. Pothier, S. Guéron, N. O. Birge, D. Esteve, and M. H. Devoret, *Energy distribution function of quasiparticles in mesoscopic wires*, Phys. Rev. Lett. **79**, 3490 (1997).
- [114] V. A. Gopar, P. A. Mello, and M. Büttiker, *Mesoscopic capacitors : A statistical analysis*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3005 (1996).
- [115] P. W. Brouwer and M. Büttiker, *Charge-relaxation and dwell time in the fluctuating admittance of a chaotic cavity*, Europhys. Lett. **37**, 441 (1997).
- [116] P. W. Brouwer, A. Lamacraft, and K. Flensberg, *Nonequilibrium theory of Coulomb blockade in open quantum dots*, Phys. Rev. B **72**, 075316 (2005).
- [117] D. S. Golubev and A. D. Zaikin, *Electron transport through interacting quantum dots in the metallic regime*, Phys. Rev. B **69**, 075318 (2004).

- [118] P. W. Brouwer, A. Lamacraft, and K. Flensberg, *Weak Coulomb blockade effect in quantum dots*, Physical Review Letters **94**, 136801 (2005).
- [119] A. G. Huibers, S. R. Patel, C. M. Marcus, P. W. Brouwer, C. I. Duruöz, and J. S. Harris, Jr., *Distributions of the conductance and its parametric derivatives in quantum dots*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1917 (1998).
- [120] G. Benenti, X. Waintal, and J.-L. Pichard, *Signatures of an intermediate 2d Coulomb phase at low temperature*, Europhys. Lett. **51**, 89 (2000).
- [121] P. H. Song and D. L. Shepelyansky, *Low-energy transition in spectral statistics of two-dimensional interacting fermions*, Phys. Rev. B **61**, 15546 (2000).
- [122] R. Berkovits, Y. Gefen, I. V. Lerner, and B. L. Altshuler, *Statistical properties of the first excited state of an interacting many particle disordered system*, Phys. Rev. B **68**, 085314 (2003).
- [123] G. Katomeris, F. Selva, and J.-L. Pichard, *Andreev-Lifshitz supersolid revisited for a few electrons on a square lattice. i*, Eur. Phys. J. B **31**, 401 (2003).
- [124] G. Vasseur and D. Weinmann, *Delocalization due to correlations in two-dimensional disordered systems*, Eur. Phys. J. B **42**, 279 (2004).
- [125] H. D. Simon and K. J. Wu, *TRLan software package* (<http://www.nersc.gov/research/SIMON/trlan.html>, 1999).
- [126] F. Selva and J.-L. Pichard, *Role of a parallel magnetic field upon a few correlated electrons trapped in 2D mesoscopic disordered clusters*, Europhys. Lett. **55**, 518 (2001).
- [127] R. Berkovits and J. W. Kantelhardt, *Parallel magnetoconductance of interacting electrons in a two-dimensional disordered system*, Phys. Rev. B **65**, 125308 (2002).
- [128] A. O. Gogolin and N. V. Prokov'ev, *Simple formula for the persistent current in disordered one-dimensional rings : Parity and interaction effects*, Phys. Rev. B **50**, 4921 (1994).
- [129] A. Oguri, *Fermi liquid theory for the nonequilibrium Kondo effect at low bias voltages*, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 110 (2005).
- [130] J. Friedel, Phil. Mag. **43**, 153 (1952).
- [131] J. S. Langer and V. Ambegaokar, Phys. Rev. **121**, 1090 (1961); D. C. Langreth, Phys. Rev. **150**, 516 (1966).
- [132] G. Schneider and P. Schmitteckert, *Conductance in strongly correlated 1D systems : Real-time dynamics in DMRG*, arXiv :cond-mat/0601389.

- [133] A. Freyn and G.-L. Ingold, unpublished.
- [134] Y. Nisikawa and A. Oguri, *Numerical renormalization group approach to a quartet quantum-dot array connected to reservoirs : Gate-voltage dependence of the conductance*, Phys. Rev. B **73**, 125108 (2006).
- [135] D. Bohr, P. Schmitteckert, and P. Wölfle, *Dmrg evaluation of the Kubo formula — conductance of strongly interacting quantum systems*, Europhys. Lett. **73**, 246 (2006).
- [136] R. Berkovits, F. von Oppen, and J. W. Kantelhardt, *Discrete charging of a quantum dot strongly coupled to external leads*, Europhys. Lett. **68**, 699 (2004).
- [137] G. Vasseur, D. Weinmann, and R. A. Jalabert, *Coulomb blockade without potential barriers*, Eur. Phys. J. B **51**, 267 (2006).
- [138] Y. Nisikawa and A. Oguri, *Numerical renormalization group approach to a quartet quantum-dot array connected to reservoirs : Gate-voltage dependence of the conductance*, Phys. Rev. B **73**, 125108 (2006).
- [139] F. Selva and D. Weinmann, *Persistent currents for Coulomb interacting electrons on 2d disordered lattices*, Eur. Phys. J. B **18**, 137 (2000).
- [140] A. Oguri and A. C. Hewson, *NRG approach to the transport through a finite Hubbard chain connected to reservoirs*, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 988 (2005).
- [141] M. Hofheinz, X. Jehl and M. Sanquer, private communication.
- [142] A. Oguri, *Quasiparticle description for transport through a small interacting system*, Phys. Rev. B **63**, 115305 (2001).
- [143] A. C. Hewson, *The Kondo problem to heavy fermions* (Cambridge university press, 1993).
- [144] V. Zlatic and B. Horvatic, *Series expansion for the symmetric anderson hamiltonian*, Phys. Rev. B **28**, 6904 (1983).
- [145] G. Cuniberti, G. Fagas, and K. Richter, eds., *Introducing molecular electronics*, vol. 680 of *Lecture notes in physics* (Springer, Berlin, 2005).
- [146] A. Wobst, G.-L. Ingold, P. Hänggi, and D. Weinmann, *Phase-space signatures of the Anderson transition*, Phys. Rev. B **68**, 085103 (2003).