

La Matière Mal Condensée

Une Petite Introduction à la Physique des Systèmes Désordonnés

DAVID CARPENTIER

Version du 29 mars 2007

Mise en Garde : Ces notes de cours sont (toujours) en rédaction. Elles sont donc largement incomplètes, des erreurs peuvent encore s'y cacher, et certaines parties devraient être largement remaniées. En conséquence, merci de me signaler toute erreur ou amélioration possible, et de **me contacter avant toute utilisation autre que personnelle.**

Table des matières

1	La matière mal condensée ?	9
1.1	Matière condensée, ordre et fluctuations thermiques	9
1.2	Notion de désordre	9
1.3	Description statistique des systèmes désordonnés	11
1.3.1	Nature du désordre	11
1.3.2	Désordre gelé ou désordre recuit	11
1.3.3	A propos des fluctuations des observables	12
I	Transport Quantique : la Localisation Electronique	15
2	Localisation électronique : introduction	17
2.1	Rappels sur le transport électronique dans des solides	17
2.1.1	La théorie de Drude-Sommerfeld	17
2.1.2	Condition d'application de la formule de Drude	18
2.2	Lois d'échelles - Renormalisation du pauvre	19
2.2.1	Fonction d'échelle $\beta(g)$	19
2.2.2	Extrapolation et conséquences	21
3	Fils quantiques désordonnés : le formalisme de Landaüer	25
3.1	Localisation dans un fil désordonné	25
3.1.1	Formalisme de Landauer	25
3.1.2	Matrice S : définition et loi de composition	29
3.1.3	Loi d'échelle pour la conductivité en dimension 1	30
3.1.4	Le problème des fluctuations	32
3.2	Compléments sur le formalisme de Landaüer	37
3.2.1	Formalisme pour plusieurs modes électroniques	37
3.2.2	Formalisme de Buttiker pour la conductance à 4 terminaux	37
4	Localisation Faible et Diffusion Multiple des Electrons	41
4.1	Définitions	41
4.1.1	Le Hamiltonien	41
4.1.2	Modèles de désordre	42
4.1.3	Diffusion d'ondes planes : les fonctions de Green	44
4.1.4	Transport d'un électron : la probabilité de diffusion	48
4.2	Développement perturbatif de la fonction Green moyenne	51

4.2.1	Développement de la fonction de Green : représentation diagrammatique	51
4.2.2	Fonction de Green moyennée et énergie propre	51
4.3	Développement perturbatif de la conductibilité	55
4.3.1	Conductivité de Drude	55
4.3.2	Corrections quantiques : image semi-classique	58
4.3.3	Corrections de vertex : le Diffuson	58
4.3.4	Diagrammes maximalelement croisés : le Cooperon	59
4.4	Corrections quantiques à la probabilité de transmission	63
4.5	Résultats expérimentaux dans le régime de localisation faible.	64
4.5.1	Effet d'un champ magnétique sur les corrections de localisation faible	64
4.5.2	Fluctuations universelles de conductances dans les films mésoscopiques : données expérimentales	65
4.6	Annexes	66
4.6.1	La formule de Kubo	66
4.6.2	Coefficient de diffusion effectif	71
5	Transport électronique dans un isolant : l'exemple des semi-conducteurs dopés	73
5.1	Introduction	73
5.2	La conductivité de saut	73
5.2.1	Courant tunnel entre deux sites	73
5.3	Percolation de liens	75
II	Solides Amorphes : l'Exemple des Verres de Spins	77
6	Introduction et phénoménologie des verres	79
6.1	Quelques résultats expérimentaux sur la transition vitreuse	79
7	Les verres à basse température et le modèle de systèmes à deux niveaux	85
7.1	Le modèle de systèmes à deux niveaux	85
7.1.1	Un système à deux niveaux (TLS) unique	86
7.1.2	Distribution des paramètres	87
7.2	Transport de la chaleur	87
7.2.1	Transport de la chaleur dans les isolants conventionnels	88
7.2.2	Relaxation de chaleur dans les verres en dessous de $1K$	89
7.2.3	Conductivité thermique des TLS	90
8	Introduction aux verres de spins	93
8.1	Le modèle d'Edwards-Anderson	93
8.2	Un peu d'expériences.	94
8.2.1	Susceptibilité magnétique	94
8.2.2	Chaleur spécifique	96
8.2.3	Effet d'histoire / Rémanence	96

8.3	Phénoménologie : fragmentation de l'espace des phases	97
8.3.1	Rappels de physique statistique	97
8.3.2	Vallées et barrières d'énergie : une image de champ moyen	98
8.3.3	Image (très floue) des verres	99
8.3.4	La frustration	99
8.3.5	Paramètre d'ordre	100
9	Le modèle d'énergies aléatoires	103
9.1	Définition du modèle	103
9.2	Solution micronanonique	103
9.3	Lien avec la statistique des extrêmes	105
9.3.1	Rappels sur les statistiques d'extrêmes	106
9.3.2	Retour au REM	107
9.3.3	Localisation dans l'espace des énergies	108
9.4	Solution par la méthode des répliques	109
9.4.1	La méthode des répliques	109
9.4.2	Solution naïve du REM par les répliques	111
9.4.3	Brisure de symétrie des répliques	115
10	Solution du champ moyen des verres de spins d'Ising	119
10.1	Modèles de champ moyen	119
10.2	Lien entre le modèle p-spin et le REM	120
10.3	Solution du modèle p-spin et brisure de symétrie des répliques	122
10.3.1	Expression générale de \overline{Z}^n	122
10.3.2	Solution symétrique	123
10.3.3	Solution non symétrique	125
10.4	Brisure de symétrie des répliques, et brisure d'ergodicité	127
10.4.1	Le paramètre d'ordre est une fonction !	127
10.4.2	Ultramétrie	132
10.4.3	Notion de complexité	133
10.5	Retour sur le modèle de Sherrington-Kirkpatrick	135
11	Dynamique du verre : le vieillissement	137
11.1	Quelques résultats expérimentaux	137
11.1.1	Aimantation thermo-rémanente	137
11.1.2	Effets de température : la mémoire du verre	139
11.2	Survol des résultats analytiques	141
11.2.1	Formalisme	141
11.2.2	Théorème Fluctuation-Dissipation	142
11.2.3	Résultats généraux de champ moyen	142
11.3	Le modèle de pièges	143
11.3.1	Définition	144
11.3.2	Analyse du modèle : les fonctions de corrélation	145
11.3.3	Modèle de pièges ultramétrique	148

Avant Propos

Le but de ce cours est de proposer, au travers de deux exemples, une introduction aux techniques et aux questions générales de l'étude des "systèmes désordonnés". Le choix de ces deux exemples est personnel, et vise à illustrer deux cas distincts de systèmes désordonnés : d'une part des phases ordonnées perturbées par du désordre (par exemple des impuretés), et d'autre part des phases intrinsèquement désordonnées, les phases amorphes. Le choix s'est porté sur un exemple d'effet quantique, et un de physique classique.

Localisation électronique. Le premier cas sera illustré par l'étude du transport électronique quantique dans les solides. La présence d'impuretés dans ces solides, associée à la nature quantique (ondulatoire) des électrons, conduit aux effets de localisation dont il est question dans la partie I de ce cours. Au delà de l'illustration d'une phase désordonnée, ce choix est justifié par l'introduction qu'il permet à la physique quantique mésoscopique. Cette physique s'intéresse aux propriétés d'échantillons solides à très petite échelle (micrométrique). A ces échelles, la nature ondulatoire des électrons devient importante : couplée à la présence de désordre tel que des impuretés, elle conduit à des phénomènes de localisation (faible) des électrons. Il s'agit d'une excellente illustration de l'importance de la caractérisation des fluctuations d'observables physiques dans les systèmes désordonnés.

Les Verres de spins. Le cas des solides amorphes est illustré de façon naturelle par l'exemple des verres de spins. En effet, bien que leur compréhension soit encore loin d'être satisfaisante, il s'agit sans doute de la phase amorphe la mieux comprise. On peut ainsi déterminer un modèle statistique simple, le modèle de verres de spins d'Ising d'Edwards-Anderson, qui capture la physique essentielle de ces verres de spins. Il permet d'illustrer la difficulté de résolution des modèles frustrés, avec des contraintes à différentes échelles incompatibles entre elles. Cette partie est l'occasion de passer en revue les techniques analytiques développés pour résoudre ces modèles à l'approximation du champ moyen, et d'approcher la dynamique hors d'équilibre de ces verres, appelée vieillissement.

Bibliographie succincte :**Systèmes désordonnés**

1. *Models of disorder*, J.M. Ziman, Camb. Univ. Press
2. *La Matière mal condensée*, session 1978 des Houches
3. *Le Hasard et la Matière*, session 1986 des Houches

Localisation d'Anderson

4. *Physique mésoscopique des électrons et des photons*, E. Akkermans et G. Montambaux, CNRS Editions/EDP Sciences (2004)
5. *Electronic transport in mesoscopic systems*, S. Datta, Cambridge University Press (1995)
6. *Fluctuations and localization in mesoscopic electron systems*, M. Janssen, World Scientific (2001)

Verres de spins

7. *Spin glasses*, K.H. Fisher and J.A. Hertz, Camb. Univ. Press
8. *Spin glasses and Beyond*, M. Mézard, G. Parisi, M. Virasoro, World Scientific
9. *Systèmes désordonnés Unidimensionnels*, J.-M. Luck, Aléa Saclay
10. *Relaxations lentes et dynamique hors d'équilibre en physique de la matière condensée*, session 2002 des Houches

1 La matière mal condensée ?

1.1 Matière condensée, ordre et fluctuations thermiques

L'étude de la matière consiste à identifier les différentes phases des composés et les propriétés associées à chaque phase. Cette identification est associée à la caractérisation de l'ordre (symétrie) : longue portée (solide), courte portée (liquide), ou absence totale (gaz). Un diagramme des phases typiques est celui de la figure 1.1.

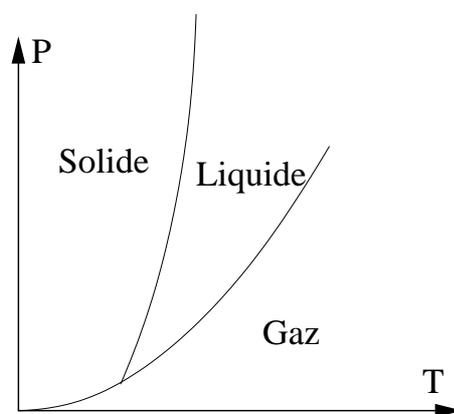


FIG. 1.1: Diag. des phases générique.

A haute température, les *fluctuations thermiques* détruisent l'ordre à longue portée. Près d'une transition de phase, l'étude des fluctuations autour d'une phase ordonnée s'avère aussi cruciale. L'étude de l'effet de ces fluctuations est faite dans le cadre habituel de la physique statistique. A basse température, différents ordres à longue portée apparaissent. Les solides sont caractérisés par un ordre orientationnel et translationnel à longue portée (en plus des symétries de la maille cristalline), mais d'autres types d'ordre existent ; par exemple dans les cristaux liquides formés de longues molécules.

D'autres phases peuvent exister sous l'effet des fluctuations quantiques, qui ne seront pas étudiées dans ce cours : ordre supraconducteur, superfluide, effet Hall quantique (ordre topologique), etc.

1.2 Notion de désordre

Le but de ce cours est l'étude de l'effet de fluctuations d'un autre type (ni thermiques, ni quantiques) qui modifient et parfois détruisent l'ordre de ces phases de basse température :

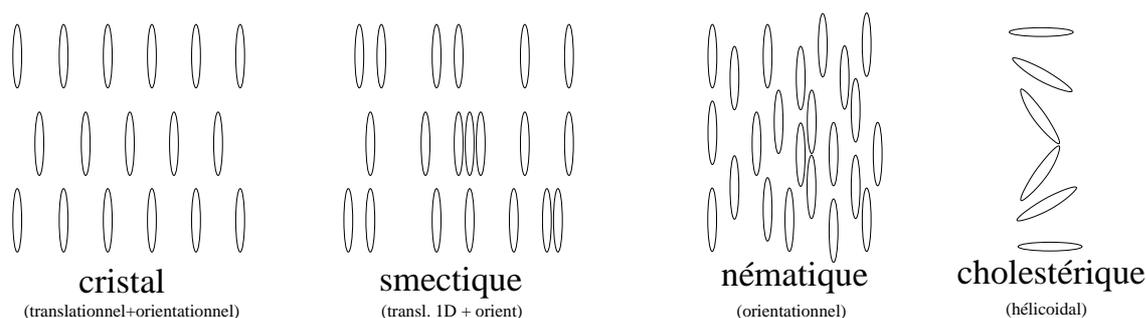


FIG. 1.2: Illustration de différents ordres de basse température sur les cristaux liquides.

il s'agit des impuretés et autres défauts, souvent hors d'équilibre, qui sont naturellement présents dans les matériaux réels. Ce domaine a longtemps été négligé (associé à une physique de matériaux sales) jusqu'à ce que soit identifiée l'émergence de nouveaux comportements universels associés à ce désordre. On peut comprendre l'importance de cette étude en réalisant que les cristaux parmi les plus purs réalisés actuellement (par exemple 6/9 : pureté de 99,9999%) contiennent de l'ordre d'une impureté par cube de 100 atomes de côté. Ceci ne correspond pas à des distances si grandes que ça entre impuretés, et l'effet de ces dernières sur les propriétés des solides mérite une étude particulière. Cette étude correspond au domaine de la physique des systèmes désordonnés, ou plutôt des matériaux mal condensés. Il touche donc des aspects physiques très différents : solides désordonnés, alliages, impuretés dans les supraconducteurs, verres, verres de spin, etc. Cependant des techniques et des questions communes existent qui justifient la définition de ce domaine en tant qu'unité, malgré l'absence d'un cadre formel bien défini.

Naïvement, on peut remarquer d'emblée qu'il existe deux grands types de systèmes désordonnés :

1. Les systèmes dans lesquels les impuretés ou défauts viennent perturber une phase ordonnée, par exemple des impuretés ponctuelles dans un métal. Ce désordre va modifier perturbativement (à faible concentration) les propriétés de la phase. Lorsque son intensité augmente, il peut éventuellement détruire l'ordre de celle-ci et donner naissance à une nouvelle phase. Ce qui nous amène au second type de systèmes désordonnés.
2. Dans les solides amorphes (les verres), le désordre est intrinsèquement lié à la nature de la phase : dans un verre, des (groupes d') atomes sont répartis aléatoirement, et c'est cette répartition aléatoire gelée qui caractérise la nature amorphe de la phase. On ne vise plus ici à étudier les perturbations des propriétés du composé induite par le désordre, mais à caractériser une phase intrinsèquement désordonnée. Il apparaît maintenant que ces phases sont perpétuellement hors d'équilibre, ce qui complique sérieusement leur étude. Des exemples de phases amorphes correspondent aux verres et solides trempés, aux polymères amorphes, aux verres de spin (solides comportant une forte concentration d'impuretés magnétiques).

Chacun de ces deux types de systèmes désordonnés sera illustré par un exemple dans

ce cours.

1.3 Description statistique des systèmes désordonnés

Il serait illusoire de vouloir décrire exactement les propriétés d'un échantillon qui contient des impuretés réparties aléatoirement (les grandeurs thermodynamiques dépendraient d'un très grand nombre de variables telles que les positions des impuretés, leur type, etc). Dans la description habituelle des phases d'un gaz, nous n'essayons pas de caractériser une phase à partir des positions et des vitesses des constituants (les atomes) mais à partir des lois de distribution statistiques de ces positions et vitesses. Ici nous allons procéder de façon similaire, et supposer que le désordre d'un échantillon peut être caractérisé par certaines lois de distribution : distribution des positions, des couplages, etc. En d'autres termes, un échantillon désordonné correspond au tirage d'un certain nombre de variables (le désordre) selon une ou plusieurs loi de distributions.

1.3.1 Nature du désordre

Il peut parfois être commode de classer les types de désordre en deux grandes classes : celui qui ne modifie pas la topologie de la phase ordonnée considérée (solide), et celui qui la modifie localement.

Désordre cellulaire

Dans un solide, une structure élémentaire (cellule) est répétée périodiquement sur un réseau. Un premier type de désordre consiste à modifier certaines cellules de ce réseau. Il peut s'agir de la substitution d'atomes de type A par des atomes de type B (impuretés, alliages binaires), ou du remplacement d'une cellule par une configuration contenant le même nombre d'atomes, mais ordonnés différemment (par exemple la glace). Dans ce dernier cas, la caractérisation statistique du problème passe par la loi de distribution des positions des cellules substituées, leur densité, et leur type (variables éventuellement couplées).

Désordre topologique

Exemple : dislocations, disclinaisons, lacunes, (défauts ponctuels), joints de grains, plans de macles, etc. (voir la figure 1.3). Le cas extrême correspond au réseau aléatoire dans lequel la connectivité de chaque site est une variable aléatoire. Le cas des verres semble appartenir à cette catégorie.

1.3.2 Désordre gelé ou désordre recuit

Une fois déterminée la nature du désordre, il convient de caractériser son évolution temporelle. Dans le cas d'atomes B substitués dans un solide, le temps caractéristique de diffusion de ces atomes B est extrêmement long, bien plus long que les temps typiques d'expérience, les temps de propagation des électrons, phonons, etc. Il est donc naturel de

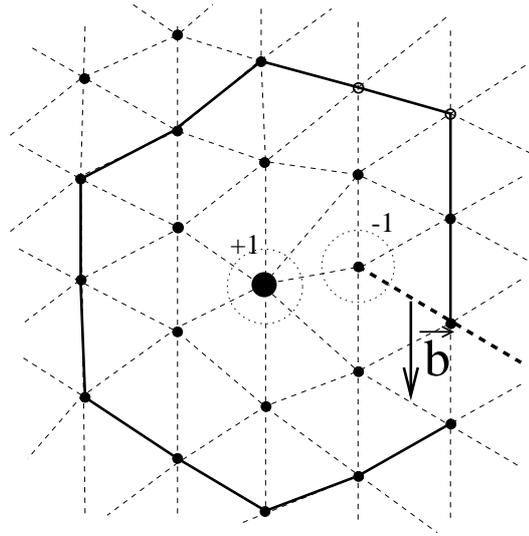


FIG. 1.3: Illustration de défaut topologique : une dislocation en dimension deux.

décrire les propriétés des solides correspondants en supposant ces impuretés figées dans une configuration hors d'équilibre. On parle alors de désordre gelé (*quenched disorder* en anglais). Dans le cas des dislocations, il est possible qu'elles évoluent (même lentement) durant la durée d'une expérience si elles ne sont pas accrochées par d'autres impuretés. On parle alors de désordre recuit (*annealed disorder* en anglais).

1.3.3 A propos des fluctuations des observables

D'après la définition précédente des systèmes désordonnés, lorsque nous considérons une grandeur thermodynamique O , il nous faut maintenant nous préoccuper d'une part de sa valeur moyenne d'ensemble $\langle O \rangle_T$, c'est-à-dire de la valeur moyenne de O sur la loi de distribution qui décrit ses variations sous l'effet des fluctuations thermiques. Mais il nous faut aussi considérer une valeur moyenne par rapport aux fluctuations induites par le désordre, notée $\langle O \rangle_{des}$. Que veut dire précisément cette moyenne sur le désordre ? Un échantillon est caractérisé par une réalisation \mathcal{D} du désordre, tirée selon une distribution $P(\mathcal{D})$. Dans cet échantillon, l'observable O prend une valeur qui *a priori* dépend (de façon complexe) de la valeur \mathcal{D} du désordre. D'un échantillon à l'autre, $O(\mathcal{D})$ fluctue : ces fluctuations sont dues au désordre. Afin de déterminer ce qu'il est pertinent de mesurer expérimentalement, il convient donc de considérer les différentes possibilités pour la loi de distribution due au désordre $P_{des}(O)$.

Considérons pour cela un système de "taille" N (nombre de degrés de liberté), et la distribution $P_{des}(N, O_N)$ de O sur l'ensemble des échantillons désordonnés de même taille. Trois cas doivent être différencier dans la limite thermodynamique :

1. grandeurs automoyennantes. Il s'agit du cas où, dans la limite thermodynamique, O_N prend une valeur déterminée O_0 , avec probabilité 1. L'observable O ne fluctue

plus d'échantillon à échantillon, ou plus exactement ses fluctuations sont négligeables. Une conséquence technique très importante est qu'il suffit de calculer la valeur moyenne $\langle O \rangle_{des}$ sur le désordre, bien plus facile à déterminer que la loi de distribution complète ou sa valeur typique. Ces grandeurs auto-moyennantes sont souvent des grandeurs additives (extensives) telles que l'énergie libre, la conductivité, etc. Pour s'en convaincre, considérons la somme S_N de N variables x_i tirées selon une loi de distribution $P(x)$ de valeur moyenne $\langle x \rangle$ et second moment $\langle x^2 \rangle$. On trouve facilement

$$\langle S_N \rangle = N \langle x \rangle \quad ; \quad \langle S_N^2 \rangle = N(N-1) \langle x \rangle^2 + N \langle x^2 \rangle \quad (1.1)$$

ce qui implique une variance

$$\sigma_N = \left(\langle S_N^2 \rangle - \langle S_N \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(N(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2) \right)^{\frac{1}{2}} \simeq N^{\frac{1}{2}} \quad (1.2)$$

Ainsi dans la limite de grand N , les fluctuations relatives s'annulent ($\sigma_N / \langle S_N \rangle \rightarrow 0$) : S_N est bien une grandeur auto-moyennante. Ceci permet de comprendre pourquoi une grandeur additive F est automoyennante : il est toujours possible de découper un échantillon de taille macroscopique en un grand nombre m d'échantillons de plus petite tailles (mais non microscopiques), associées à des valeurs F_i . Dans la limite d'une découpe de plus en plus fine, on peut écrire $F = \sum_i F_i \rightarrow m \langle F_i \rangle = \langle F \rangle$. Les termes de couplages de bords de domaines ont été négligés.

Remarque :

- a) Le résultat ci-dessus sur S_N est en fait une conséquence du théorème de la limite centrale qui prédit que S_N est asymptotiquement distribuée selon une loi normale-gaussienne :

$$P_N(S_N) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi N \sigma^2}} e^{-\frac{(S_N - N \langle x \rangle)^2}{2N \langle x^2 \rangle}}$$

A Faire : Loi des grands nombres .

2. Convergence en loi. Dans ce cas, $P(N, O_N)$ admet une loi limite $P^*(O)$ (différente d'une loi δ). Il convient donc de faire attention aux quantités pertinentes expérimentalement. Si l'on prend deux échantillons, O prendra deux valeurs distinctes O_1, O_2 . Quelles prédictions peut-on faire sur ces résultats ? L'idéal est bien sûr de pouvoir décrire la statistique complète de O $P(O)$. Si la loi $P(O)$ n'est pas trop large, il est équivalent de décrire l'ensemble des moments $\langle O^n \rangle$. A défaut, les deux premiers moments nous renseignent sur les résultats possibles : en général, bien que la valeur la plus probable O_{typ} est différente de $\langle O \rangle$, elle ne s'en écarte que de l'ordre de $\langle O^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$. La prudence est cependant de mise dans cette situation. Notons que dans ce cas,

$$\frac{\langle O_N^2 \rangle - \langle O_N \rangle^2}{\langle O_N \rangle^2}$$

tend vers une valeur finie lorsque N augmente.

3. Lois larges. C'est le cas extrême, pour lequel la physique (moyenne) est souvent dominée par les fluctuations rares. Un exemple simple est celui du produit $\Pi_N = \prod_{i=1}^N x_i$ de N variables :

$$\langle \Pi_N \rangle = \langle x \rangle^N \quad ; \quad \langle \Pi_N^2 \rangle = \langle x^2 \rangle^N \Rightarrow \frac{\langle \Pi_N^2 \rangle - \langle \Pi_N \rangle^2}{\langle \Pi_N \rangle^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \infty \quad (1.3)$$

Première partie

Transport Quantique : la Localisation Electronique

2 Localisation électronique : introduction

Dans cette partie, nous allons nous intéresser au transport électronique dans les métaux désordonnés. En présence d'impuretés, la dynamique classique des électrons est décrite comme une diffusion élastique. La probabilité de transmission d'un électron d'un point à un autre satisfait alors à une équation de diffusion. Les seuls effets quantiques pris en compte sont ceux de la statistique d'occupation des états (de Fermi-Dirac). Cette description de Drude-Sommerfeld, qui est remarquablement efficace, suppose donc que la nature ondulatoire des électrons (paquet d'ondes) ne joue aucun rôle dans ces propriétés de transport. On parle d'électrons incohérents.

L'étude de la dynamique quantique de ces électrons couplés à un environnement dynamique (les phonons, les autres électrons, etc) permet de caractériser le temps de cohérence de phase τ_ϕ de ces électrons. De façon intuitive, il s'agit du temps au delà duquel la phase des électrons est statistiquement indéterminée. Naturellement, ce temps augmente lorsque la température baisse : $\tau_\phi \simeq T^{-p}$. Dans le cas des électrons de conduction, on peut lui associer une longueur, la longueur de cohérence de phase de ces électrons, qui est donnée par $L_\phi = v_F \tau_\phi$ où v_F est la vitesse de Fermi du gaz d'électrons. Nous nous attendons à ce que la théorie de Drude-Sommerfeld s'applique lorsque cette longueur est négligeable devant les autres longueurs du problème, et en particulier devant la taille de l'échantillon $L \gg L_\phi$. Pour des échantillons de taille inférieure à la longueur de cohérence de phase L_ϕ , une nouvelle description du transport électronique doit être développée. Elle doit prendre en compte les effets interférences (ondulatoires) des électrons. Le domaine correspondant est celui de la physique *mésoscopique* [4, 10, 12], auquel nous allons nous intéresser dans la suite de cette première partie. Plus particulièrement, nous nous intéresserons essentiellement aux situations de transport diffusif cohérent, dans lesquelles les électrons rencontrent un grand nombre d'impuretés au cours de leur trajet :

$$l_{\text{ballistique}} \ll L_x, L_y, L_z \ll L_\phi. \quad (2.1)$$

Nous allons commencer par préciser le domaine d'application du transport classique.

Notations. G dénotera la conductance, g la conductance adimensionnée définie par $G = g e^2/h$. σ désigne la conductivité, R la résistance et ρ la résistivité.

2.1 Rappels sur le transport électronique dans des solides

2.1.1 La théorie de Drude-Sommerfeld

Les propriétés de conduction électrique des solides sont bien décrites par la théorie de Drude-Sommerfeld. Dans la théorie de Bloch, les électrons sont considérés comme clas-

siques (ils diffusent classiquement dans un potentiel aléatoire). De plus les collisions successives sont supposés indépendantes les unes des autres. Nous verrons par la suite que ces deux hypothèses sont violées à basse température.

Ces électrons ne sont pas libres, mais interagissent avec un potentiel induit par les ions du cristal. D'après le théorème de Bloch, les fonctions d'onde des électrons de conduction ont alors la même périodicité que le potentiel (cristal), et sont donc étendues dans l'échantillon. Cette périodicité induit également l'existence de niveaux d'énergie interdits, qui donnent des bandes d'énergie dans la limite thermodynamique. Les interactions entre électrons ne font que modifier la masse de ces électrons autour de la surface de Fermi (théorie du liquide de Fermi-Landau). On peut donc utiliser la théorie de Drude qui donne l'expression de la conductivité

$$\sigma_{\text{Drude}} = \frac{ne^2\tau_{el}}{m^*} \quad (2.2)$$

où τ_{el} : temps moyen entre 2 collisions élastiques¹ (à haute température, collisions avec phonons, ou entre électrons). Lorsque la température T augmente, la densité de phonons augmente ce qui réduit bien τ_{el} et donc σ_{Drude} .

2.1.2 Condition d'application de la formule de Drude

Cette formule est une formule de physique classique. Les effets ondulatoires peuvent être négligés tant que le libre parcours moyen $l_e = v_F\tau_{el}$ est grand devant la longueur d'onde λ_F des électrons, soit

$$l_e \gg \lambda_F \Rightarrow k_F l_e \gg 1. \quad (2.3)$$

Cette condition s'appelle condition de Ioffe-Regel[12]. Elle peut être convertie en une condition sur la conductivité σ de Drude (2.2). En exprimant le nombre d'électrons N dans un gaz de Fermi en dimension $D = 3$,

$$N = \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{(2\pi/L)^3} \times \underbrace{2}_{\text{spin}} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} L^3, \quad (2.4)$$

on obtient, par unité de volume,

$$\sigma = \frac{e^2\tau}{m^*} \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{e^2}{3\pi^2\hbar} k_F^2 \frac{\hbar k_F \tau}{m^*} \quad \text{avec } m^*v_F = \hbar k_F = \hbar 2\pi/\lambda_F \quad (2.5)$$

$$\Rightarrow \sigma\lambda_F = \frac{e^2}{\hbar} \frac{2}{3\pi} k_F l_e \gg \frac{e^2}{\hbar} \quad (2.6)$$

où nous avons introduit le quantum de conductance e^2/h . La condition de Ioffe-Regel (2.3) s'écrit alors $\sigma\lambda_F \gg 5.10^{-5}\Omega$, ou encore, avec λ_F de l'ordre de quelques Angstrom (valeur typique dans les métaux)

$$\rho = \sigma^{-1} \ll 100 \mu\Omega cm. \quad (2.7)$$

¹Ceci n'est strictement vrai que pour une interaction de contact isotrope.

Au delà commence un nouveau régime dans lequel les fluctuations quantiques (et plus précisément les effets d'interférences) ne peuvent plus être négligés. Le cadre théorique adapté à cette description est alors celui de la localisation d'Anderson que nous allons brièvement décrire.

2.2 Lois d'échelles - Renormalisation du pauvre

Cette idée de lois d'échelle a été formulée par la "bande des quatre" [2] : Abrahams, Anderson, Licciardello et Ramakrishnan (1979). Elle propose un cadre général dans lequel situer les différentes études de transport électronique.

Cette approche de lois d'échelles est réminiscente des idées utilisées dans l'étude des transitions de phases : le comportement (statistique) d'un système avec un nombre N de degrés de liberté (à l'échelle L) est déduit de celui d'un système avec $N - dN$ degrés de liberté (à l'échelle $L - dL$). Cela permet de déterminer les différents régimes et transitions de phases entre eux.

L'idée des quatre auteurs précédents est de supposer que la seule grandeur nécessaire à la caractérisation du comportement d'échelle du transport électronique est la conductivité. Il s'agit de l'hypothèse de loi d'échelle à *un seul paramètre*, la conductance. En d'autres termes, la conductance $\sigma(L)$ à l'échelle L ne dépend que de la conductance à l'échelle $L - dL$. Une des justifications de cette hypothèse sera donnée dans le chapitre suivant à l'occasion de l'étude des fils désordonnés, une autre provient des idées de Thouless sur la localisation [1].

2.2.1 Fonction d'échelle $\beta(g)$

Une façon commode de décrire le comportement d'échelle de la conductance adimensionnée $g(L)$ est de définir une fonction d'échelle $\beta(g)$ définie par la relation

$$\frac{d \ln g(L)}{d \ln L} \equiv \beta(g) \quad (2.8)$$

Cette définition est analogue à la définition rencontrée dans le contexte de l'étude des transitions de phase par le groupe de renormalisation. Comme dans ce contexte, il convient de faire ici attention à ce que la fonction $\beta(g)$ n'est pas universelle (elle est modifiée par une reparamétrisation de g par exemple). Seules certaines de ses propriétés (pentes, etc) sont universelles *autour des points fixes*, qui définissent par exemple le comportement critique autour d'une transition.

Dans notre cas, nous n'allons pas dériver de façon contrôlée cette fonction $\beta(g)$, mais seulement deviner son comportement à partir de deux cas limites connus.

Limite métallique (grande conductance)

Dans ce cas les effets quantiques sont négligeables (les effets du désordre sont faibles), et nous pouvons utiliser la loi d'Ohm. Celle-ci spécifie par exemple que $U = RI$. Afin de s'affranchir de la dépendance de R en la taille L du système, il est plus commode de

définir la résistivité ρ , grandeur intensive qui lie la densité j de courant électrique qui traverse l'échantillon et le champ électrique créé $E = \rho j$. Pour un échantillon de taille L^d , la conductance $G(L) = R^{-1}(L)$ est reliée à la conductivité $\sigma = \rho^{-1}$ par la relation²

$$g(L) = \sigma L^{d-2} \quad (2.9)$$

Dans cette limite de grand g , on obtient donc le comportement constant de la fonction $\beta(g)$

$$\beta(g) = d - 2 \quad (2.10)$$

Nous verrons par la suite que les corrections de faible désordre à cette formule sont de la forme $\beta(g) = d - 2 - \alpha/g$ où α est positif.

Limite isolante (faible conductance)

Dans la limite de faible g , nous nous attendons à ce que tous les états électroniques soient exponentiellement localisés autour des impuretés. Les centres de localisation de ces états sont réparties au hasard dans l'échantillon, et l'énergie des états localisés est elle-même aléatoire. En particulier deux états localisés proches dans l'espace ont avec une forte probabilité deux énergies propres très différentes, ce qui exclue toute hybridation de ces états³. A température finie, une conductivité de saut est possible, mais à température nulle nous nous attendons à une conductance qui décroît exponentiellement avec la taille L de l'échantillon :

$$g \propto e^{-L/\xi}. \quad (2.11)$$

De cette relation nous tirons le comportement de la fonction d'échelle dans ce régime

$$\beta(g) = \ln g + cte, \quad (2.12)$$

et ceci en toute dimension.

Digression la conductivité par saut à portée variable (VRH, variable range hopping).

Entre deux sites distants de $l \gg \xi$, la conductance est proportionnelle au recouvrement des fonctions d'onde $g \propto |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 \simeq e^{-l/\xi}$. Par ailleurs, le nombre d'états électroniques dans un volume L^d est $n(0)L^d$ où $n(0)$ est la densité au niveau de Fermi. L'écart typique en énergie ΔE_L est donc de l'ordre de $\Delta E_L \sim (n(0)L^d)^{-1}$ qui se réexprime en fonction de l'écart typique en énergie entre 2 états localisés ΔE_{loc} : $\Delta E_L = \Delta E_{loc}(\xi/L)^d$. Nous en tirons donc un ordre de grandeur de $\Delta E_{loc} \sim (n(0)\xi^2)^{-1}$. La conductance tunnel entre deux états localisés s'exprime alors comme

$$g \propto e^{-2l/\xi} e^{-\Delta E \xi} \quad (2.13)$$

où le premier terme correspond au recouvrement, le second à la probabilité que les fluctuations thermiques ramènent les deux énergies au même niveau, c'est-à-dire soient d'ordre ΔE_{loc} . A basse température $T \ll 1$, la distance typique l_{typ} entre 2 états qui participent au transport du courant vaut donc $l_{typ} \sim (\xi/n(0)kT)^{1/(d+1)}$, soit $\sigma \propto \exp[-cte(T_0/T)^{1/(d+1)}]$. Voir à ce sujet l'article de Ambegaokar, Halperin et Langer [5] sur l'analogie avec la percolation d'un réseau de résistances aléatoires.

²On ajoute les résistances en série dans la direction du courant, et en parallèle dans les directions transverses : $g(L) = L^{d-1}g_{1d}(L)$ et $g_{1d}(L) = \sigma/L$.

³Il conviendrait de faire un peu plus attention aux états résonnants entre états localisés distants...

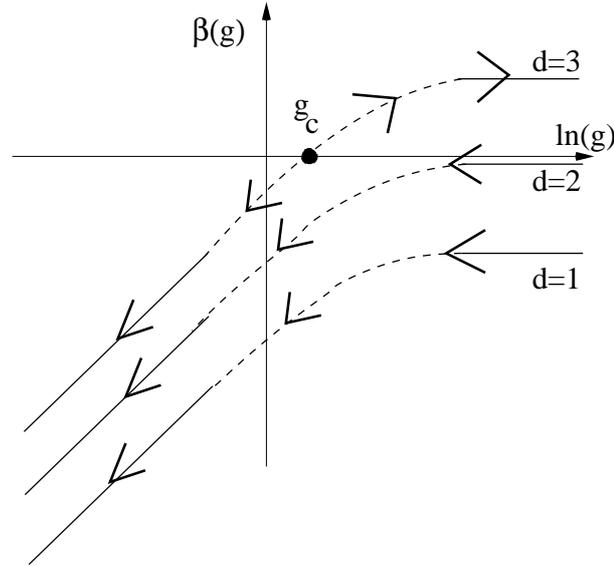


FIG. 2.1: Flot de renormalisation de la conductance g en dimension 1, 2, 3. L'extrapolation entre les deux limites connues est indiquée en trait pointillé.

2.2.2 Extrapolation et conséquences

Si nous supposons que $\beta(g)$ est monotone et continue, nous obtenons alors le résultat de la figure 2.1.

D'après la définition de $\beta(g)$, nous savons que le signe de cette fonction indique l'augmentation ou la diminution de g avec l'échelle. Le résultat de la figure 2.1 nous indique ainsi qu'en dimension 1 et 2, la conductance g diminue toujours avec la taille. Comme nous n'incorporons ici que des effets de désordre dans notre description du transport, ce comportement isolant est relié avec la localisation de tous les états électroniques en dimension 1 et 2 (la situation est différente en présence d'un couplage spin-orbite). Toujours d'après la figure 2.1, la situation est différente en dimension 3 où l'existence d'un point g_c où $\beta(g)$ s'annule correspond à une transition métal-isolant. Lorsque $g > g_c$, $\beta(g)$ est positive et la conductance augmente avec la taille : le système est un métal dans lequel une partie des états électroniques n'est pas localisée. Lorsque $g < g_c$, la situation est analogue au cas des dimensions inférieures avec des états localisés.

Etude qualitative de la transition (cf cours sur transitions de phase) : soit s la pente de la fonction $\beta(g)$ en g_c , et ϵ l'écart à la transition $\epsilon = |\ln g - \ln g_c|$. On obtient facilement différents résultats en fonction de s (ici $l = \ln L$) :

$$\begin{aligned} \frac{d \ln g}{dl} &= s \ln \frac{g}{g_c} \Rightarrow \ln \frac{g}{g_c} = \ln \frac{g_0}{g_c} e^{s(l-l_0)} \\ \Rightarrow \epsilon &= \ln \frac{g}{g_c} = \frac{\ln g_0}{g_c} \left(\frac{\xi}{L_0} \right)^s \end{aligned}$$

Nous avons défini ξ comme l'échelle à partir de laquelle le régime macroscopique (métallique

avec loi d'Ohm) est atteint :

$$\xi \simeq L_0 \frac{cte}{\epsilon^{1/s}},$$

ce qui définit $1/s$ comme un des exposants critiques du problème. Le comportement de la conductivité dans les deux régimes s'en déduit : dans le régime métallique la conductivité est fixée à l'échelle ξ (au delà elle est constante par la loi d'Ohm) $\sigma(\xi) \simeq \xi^{2-d} g(\xi) \simeq cte \epsilon^{(d-2)/s}$. D'après la relation d'Einstein, cette conductivité est reliée au coefficient D de diffusion des fluctuations de densité. Le résultat qui précède signale donc une diffusion anormale de ces fluctuations.

Remarques Pour aller plus loin sur ces lois d'échelle, on pourra s'intéresser à

1. les simulations numériques (Kramer et al.) : en accord avec loi d'échelle à 1 paramètre.
2. l'approche de théorie des champs : modèle σ non linéaire ($O(n)$ ou supersymétrique). Mais pas d'exposants critiques... Par contre il s'agit d'un cadre conceptuel important pour comprendre la description de la transition métal-insolant d'Anderson.

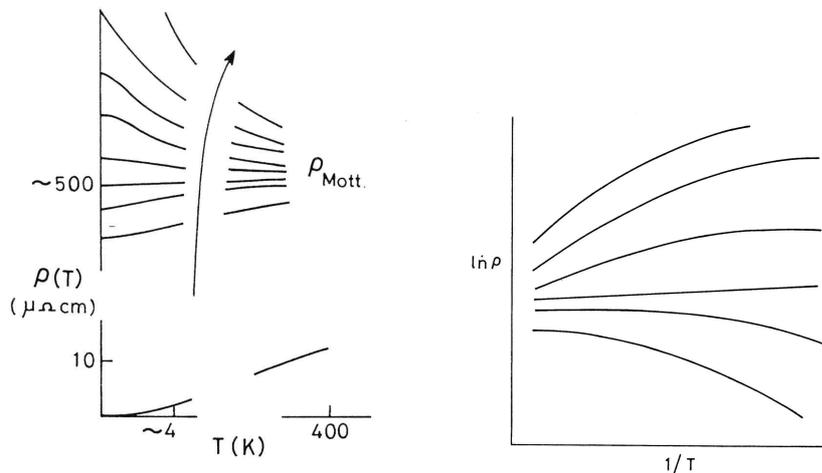


FIG. 2.2: Représentation schématique du comportement de la résistivité d'un métal (3D) en fonction de la température. Dans un métal faiblement désordonné, $d\rho/dT > 0$ à toute température. Lorsque la concentration en impuretés augmente (sens de la flèche), nous nous attendons à ce que $d\rho/dT$ change de signe, lorsque ρ dépasse une valeur de quelques $100\mu\Omega cm$. Au delà de cette concentration, le comportement de basse température est celui d'un isolant.

Nous avons représenté, sur la figure 2.2, le comportement attendu de la résistivité d'un échantillon métallique tridimensionnel en fonction de la température. Lorsque l'intensité

du désordre augmente, le sens de variation de cette résistivité bascule à basse température, et un comportement isolant est sensé apparaître à température nulle et fort désordre. La transition d'Anderson correspondrait à la densité d'impuretés pour laquelle la résistivité est indépendante de cette température.

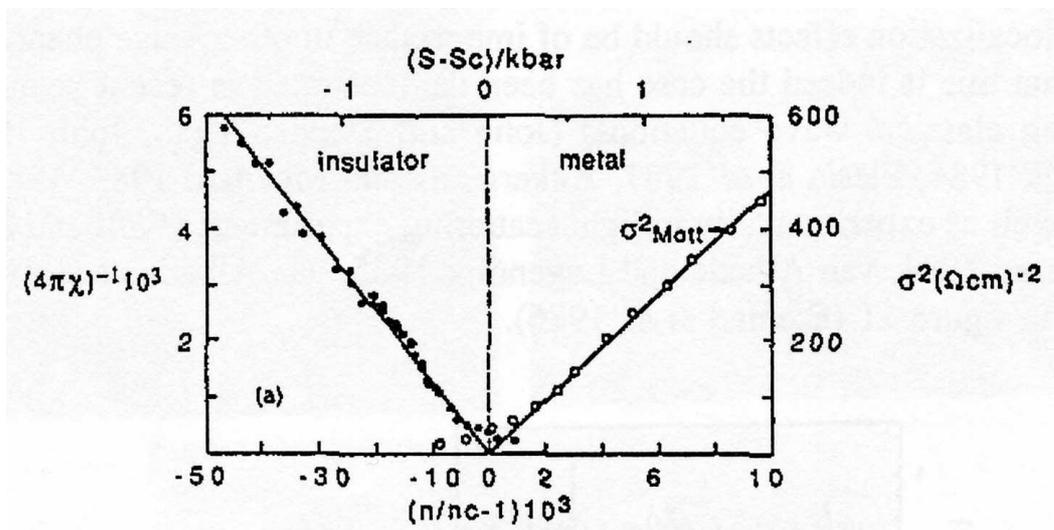


FIG. 2.3: Données obtenues dans du Silicium dopé au Phosphore. Lorsque la concentration en dopant varie, le matériau passe d'un état isolant à un état métallique. La courbe représente l'inverse de la susceptibilité diélectrique (isolant) et le carré de la conductivité (métal), afin d'étudier le comportement critique de la transition. D'après Paalanen et Thomas, *Helv. Phys. Acta* **56** (83), p.27

Sur la figure 2.3, nous avons reporté les courbes expérimentales de la conductivité et de la susceptibilité diélectrique du Silicium dopé au phosphore. Il s'agit d'un exemple classique de transition métal-insolant lorsqu'on varie le désordre (concentration en dopant, le Phosphore). Cependant, la situation est différente de celle du métal désordonné : à concentration nulle en dopant, le composé est un bon isolant. Lorsqu'on introduit des atomes de Phosphore, des électrons périphériques se trouvent localisés autour de ces atomes répartis aléatoirement dans l'échantillon. A concentration importante (près du seuil de percolation), les états électroniques entre sites voisins (dans l'espace et/ou en énergie) s'hybrident. Ce mécanisme de délocalisation des électrons permet le passage, lorsque la densité d'impuretés augmente, une transition vers un comportement métallique. Il s'agit bien d'une transition induite par le désordre (impuretés) et les effets quantiques (hybridation des sites). Cependant, le problème principal dans l'identification de cette transition avec le mécanisme proposé par Anderson vient des interactions Coulombiennes à longue portée. Dans un isolant, ces interactions entre les porteurs de charge introduit par le Phosphore ne sont pas écrantées. De plus, leur rôle dans cette transition de délocalisation électronique s'avère crucial.

3 Fils quantiques désordonnés : le formalisme de Landaüer

3.1 Localisation dans un fil désordonné

Par fil, nous entendons un échantillon dont les dimensions transverses L_y, L_z sont petites devant L_x . Plus précisément, nous allons considérer le cas où la diffusion des électrons est limitée dans les directions transverses L_y, L_z , et ne se produit effectivement que dans la direction x . Nous considérerons la situation où toutes ces longueurs sont plus petites que L_ϕ , la longueur de cohérence de phase des électrons (voir la suite et cours de cohérence quantique).

$$L_{\text{ballistique}}, L_y, L_z \ll L_x \ll L_\phi. \quad (3.1)$$

La longueur $L_{\text{ballistique}}$ est d'ordre le libre parcours moyen élastique L_{el} .

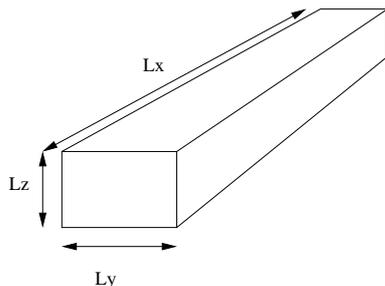


FIG. 3.1: Géométrie unidimensionnelle considérée : $L_z \gg L_x, L_y$. Nous supposons ici que la condition d'unidimensionnalité correspond à une diffusion quantique effective dans une seule dimension. Cette condition sera précisée dans le chapitre suivant.

3.1.1 Formalisme de Landauer

Nous allons commencer par dériver la formule de Landauer pour la conductance intrinsèque d'une portion de fil. Nous reviendrons par la suite sur le problème de la mesure de cette conductance.

Formule de Landauer pour une portion de fil.

Considérons une portion de fil désordonné que nous allons décrire comme une boîte noire. Pour étudier les propriétés électriques de la boîte noire, nous pouvons commencer par considérer les flux d'électrons entrant et sortant de la boîte à droite et à gauche de

celle-ci (Figure 3.2). Ces courants, notés $j_{1/2}^{R/L}$, sont reliés entre eux par une matrice de probabilité :



FIG. 3.2: Boite noire décrite par 2 coefficients réels R, T qui relient les courants d'électrons entrants et sortants de la boite.

$$\begin{pmatrix} j_1^L \\ j_2^R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & T' \\ T & R' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1^R \\ j_2^L \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

La conservation du courant et l'invariance par renversement du temps impose $R = R', T = T'$ et $R = 1 - T$.

Appliquons maintenant une différence de potentiel chimique $\mu_2 - \mu_1 = -e \delta V$ entre les bornes de cette boite noire. Cela correspond à une différence de densité électrique

$$\delta n = n_2 - n_1 = \left. \frac{dn}{dE} \right|_{E_F} e \delta V \quad (3.3)$$

Cette différence de densité est reliée aux courants électroniques de part et d'autre :

$$\delta n = \frac{j_1^R + j_1^L}{v_{F,1}} - \frac{j_2^R + j_2^L}{v_{F,2}} = \frac{1}{v_F} (j_1^R - j_2^L) (1 - T) = \frac{1}{v_F} (j_1^R - j_2^L) R \quad (3.4)$$

Par ailleurs le courant électrique I qui traverse le fil peut s'exprimer comme

$$\frac{1}{e} I = j_1^R - j_1^L = j_2^R - j_2^L \quad (3.5)$$

En utilisant les expressions $j_1^R - j_1^L = (1 - R)j_1^R = Tj_1^R$ et $j_2^R - j_2^L = (R - 1)j_2^L = -Tj_2^L$, on obtient pour ce courant

$$I = \frac{T}{2} (j_1^R - j_2^R), \quad (3.6)$$

soit pour la conductance

$$G = \frac{I}{V} = \frac{T}{2} \frac{1}{R} e^2 v \frac{dn}{dE} \quad (3.7)$$

Or $dn/dE = dn/dk \cdot dk/dE = \pi^{-1} m / (\hbar^2 k) = 1 / (\pi \hbar v_F)$. Ce qui fournit l'expression finale obtenue par Landauer

$$G = \frac{e^2 T}{h R} = \frac{e^2}{h} \frac{T}{1 - T} \quad (3.8)$$

qui exprime la conductance adimensionnée de la boite noire $g = G/(e^2/h)$ en fonction de son coefficient de transmission T . Notons que e^2/h correspond au quantum de conductance.

Formule de Landauer avec réservoirs

Cette formule a donné lieu à une importante et longue controverse due à l'existence d'une deuxième formule (non équivalente) pour la conductance d'un fil connecté à deux réservoirs (contacts électriques de grande dimension). Pour la comprendre, considérons un fil, décrit par la boîte noire ci-dessus, et connecté à deux réservoirs de potentiels chimiques μ_1, μ_2 (Figure 3.3).

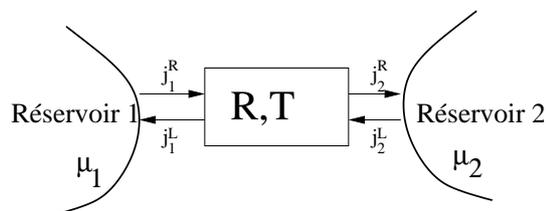


FIG. 3.3: Représentation schématique d'un conducteur unidimensionnel relié à deux contacts électriques, modélisés comme des réservoirs électroniques aux potentiels chimiques μ_1 et μ_2 . Le fil est modélisé formellement par deux coefficients de transmission T et réflexion R des courants électroniques.

Nous supposons que le contact entre le réservoir et le fil se fait sans réflexion (grand nombre d'états disponibles dans le réservoir). Nous remarquons alors que tous les électrons qui atteignent la boîte noire depuis la gauche viennent du réservoir 1, et sont donc au potentiel chimique μ_1 . De même, tous les électrons qui arrivent sur la boîte noire depuis la droite sont au potentiel chimique μ_2 .

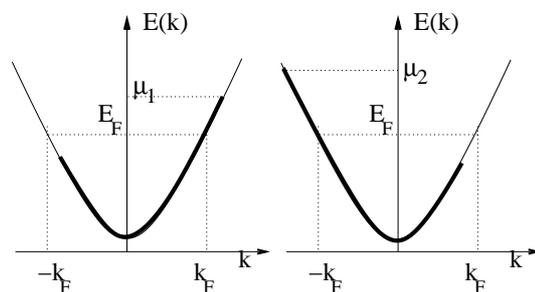


FIG. 3.4: Lois de dispersion unidimensionnelles des électrons au contact droit et gauche entre le fil et les réservoirs.

Commençons par dériver une formule utile pour le courant qui traverse le fil dans une direction s'exprime comme

$$I = env = e \frac{1}{L} \sum_k v f(E_k) = e \frac{1}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f(E) = \frac{2e}{h} \int f^+(E) dE \quad (3.9)$$

ou le facteur 2 tient compte du spin des électrons, la fonction $f(E)$ correspond à la densité d'états à $T = 0$, et la relation $\hbar v = \partial E / \partial k$ a été utilisée.

Avec cette formule, le courant droit j_2^R à droite du fil s'exprime donc comme

$$j_2^R = \frac{2e}{h} \int dE (f_1^R(E)T + f_2^L(E)(1 - T)) \quad (3.10)$$

Ce qui nous permet donc d'exprimer le courant à travers le fil comme

$$I = j_2^R - j_2^L = \frac{2e}{h} \int dE T(f_1^R(E) - f_2^L(E)) \quad (3.11)$$

Or à température nulle, $\int dE(f_1^R(E) - f_2^L(E)) = \mu_1 - \mu_2$ (voir Figure 3.4). Nous obtenons donc l'expression pour le courant $I = (2e/h)T(\mu_1 - \mu_2)$ soit pour la conductance

$$G_c = \frac{2e^2}{h}T \quad (3.12)$$

Cette formule est en accord avec celle dérivée par les formules de Kubo (voir la suite), mais visiblement par avec la précédente, ce qui a généré la controverse précédemment mentionnée. Afin de comprendre son sens, commençons par considérer le cas d'un conducteur parfait ($T = 1$). Dans ce cas, la conductance

$$G_0 = \frac{2e^2}{h} \quad (3.13)$$

caractérise les contacts entre le fil et le conducteur parfait. On l'appellera donc *conductance de contact* dans la suite. Nous remarquons alors que la résistance totale du fil G_c^{-1} de la formule (3.12) s'exprime (addition de résistance en séries) comme la somme de la résistance de contact G_0^{-1} et de la résistance 'intrinsèque' du fil G^{-1} tirée de la formule (3.8) :

$$G^{-1} + G_0^{-1} = \frac{h}{e^2} \left(\frac{R}{T} + 1 \right) = \frac{e^2}{h} \frac{1}{T} = G_c^{-1} \quad (3.14)$$

Une conséquence importante est qu'une mesure de conductance habituelle à deux terminaux donne la conductance avec contacts G_c alors qu'une mesure à quatre terminaux est nécessaire pour mesurer G (Enquist & Anderson 81).

Remarques

1. un fil réel comporte en général un grand nombre de modes transverses. Ces modes correspondent aux différents états propres du potentiel de confinement dans les directions transverses $V(y, z)$. Tant que $V(r)$ ne dépend pas de x , la direction du fil, ces modes se propagent librement comme des ondes planes. Le formalisme précédent s'étend naturellement à la description d'un fil comportant plusieurs modes indexés par n : le courant d'un mode n peut être réfléchi ou transmis par la boîte noire en un courant de mode n' , et nous devons donc considérer a priori les coefficients $T_{n,n'}, R_{n,n'}$. Le coefficient de transmission total du mode n est $T_n = \sum_{n'} T_{nn'}$, et de réflexion total $R_n = \sum_{n'} R_{nn'}$. Les formules analogues aux deux formules de Landauer précédentes sont

$$G_c = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,n'} T_{nn'} \quad ; \quad G = \frac{4e^2}{h} \frac{\sum_n T_n \sum_n 1/v_n}{\sum_n (1 + R_n - T_n)/v_n} \quad (3.15)$$



FIG. 3.5: Boite noire décrite par 4 coefficients complexes (matrice S) qui relie les amplitudes des fonctions d'ondes d'électrons entrants et sortants de la boite.

2. La formule précédente permet de relier l'importance de la conductance de contact avec la section du fil. En effet, dans un fil métallique habituel, le nombre N de modes transverses est grand. Pour que G soit fini, il faut donc que tous les T_n soient d'ordre $1/N$ d'après (3.15). Ainsi, $1 + R_n - T_n \sim 2 + 1/N$. En reportant dans la deuxième équation de (3.15), on retrouve que $G = G_c$ dès que N est grand (quelques μm de diamètre pour les fils métalliques).

3.1.2 Matrice S : définition et loi de composition

$a_{1/2}^{R/L}$: amplitude (complexe) de la fonction d'onde de l'électron à gauche/droite de la boite noire (1/2) et sortante/revenante (R/L). La matrice S relie les amplitudes sortantes aux amplitudes rentrantes :

$$\begin{pmatrix} a_1^L \\ a_2^R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^R \\ a_2^L \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Remarques

1. une autre possibilité est d'utiliser les matrices de transfert qui relient les amplitudes de droite $a_2^{R,L}$ aux amplitudes de gauche $a_1^{R,L}$.
2. L'unitarité de la matrice est liée à la conservation du courant dans le fil. Elle impose

$$t = t' \quad ; \quad r^* t' = r' t^* \quad (3.17)$$

En supposant que les électrons se propagent de façon cohérente entre deux boites noires¹ il est possible de dériver la loi de composition de deux matrices : $S_{13} = S_{12} \otimes S_{23}$. Pour cela, commençons par écrire les relations vérifiées par les amplitudes des fonctions d'onde

$$\begin{pmatrix} a_1^L \\ a_2^R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{12} & t'_{12} \\ t_{12} & r'_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^R \\ a_2^L \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} a_2^L \\ a_3^R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{23} & t'_{23} \\ t_{23} & r'_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2^R \\ a_3^L \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Il nous reste à exprimer $a_2^{R/L}$ en fonction des amplitudes des deux extrémités :

$$a_2^L = r_{23} a_2^R + t'_{23} a_3^L = r_{23} (t_{12} a_1^R + r'_{12} a_2^L) + t'_{23} a_3^L \quad (3.19)$$

$$\Rightarrow a_2^L = \frac{t_{12} r_{23}}{1 - r'_{12} r_{23}} a_1^R + \frac{t'_{23}}{1 - r'_{12} r_{23}} a_3^L \quad (3.20)$$

¹le déphasage subi par un électron entre les deux boites est constant, et dans la suite de la discussion, il est absorbé dans la définition des coefficients des matrices S .

et de même

$$a_2^R = t_{12}a_1^R + r'_{12}a_2^L = \frac{t_{12}}{1 - r'_{12}r_{23}}a_1^R + \frac{r'_{12}t'_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}}a_3^L \quad (3.21)$$

d'où nous tirons

$$a_3^R = t_{23}a_2^R + r'_{23}a_3^L = \frac{t_{12}t_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}}a_1^R + \left(r'_{23} + \frac{r'_{12}t_{23}t'_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}} \right) a_R^L \quad (3.22)$$

$$a_1^L = \left(r_{12} + \frac{t_{12}t'_{12}r_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}} \right) a_1^R + \frac{t'_{12}t'_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}}a_3^L. \quad (3.23)$$

Ce résultat se réécrit

$$\begin{pmatrix} r_{13} = r_{12} + r_{23} \frac{t_{12}t'_{12}}{1 - r'_{12}r_{23}} & t'_{13} = \frac{t'_{12}t'_{13}}{1 - r'_{12}r_{23}} \\ t_{13} = \frac{t_{12}t_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}} & r'_{13} = r'_{12} \frac{t_{23}t'_{23}}{1 - r'_{12}r_{23}} + r'_{23} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

L'interprétation de cette formule est similaire à celle de composition des matrices de probabilité (replexion multiple).

3.1.3 Loi d'échelle pour la conductivité en dimension 1

L'idée est maintenant d'utiliser ce qui précède pour dériver une formule de récurrence pour la conductance G_n d'un ensemble de n boites noires en série. On va choisir ces boites de taille comparable, de telle façon que le désordre contenu dans chacune d'entre elles soit du même ordre de grande. Autrement dit, les coefficients r_i, t_i, r'_i, t'_i des matrices S_i qui caractérisent ces boites soient distribués selon un loi de distribution $P(r, t, r', t')$.

Considérons donc un bloc de n boites caractérisé par une matrice S_n , auquel on rajoute un $n+1$ ème bloc caractérisé par la matrice S . D'après ce qui précède, nous devons utiliser la loi de composition des matrices S , et non des matrices de probabilité, pour capturer la physique de la localisation, associée aux effets d'interférences quantiques. Nous tirons de cette loi de composition la relation

$$G_{n+1}^{-1} = \frac{h}{e^2} \left(\frac{1}{T} - 1 \right) = \frac{h}{e^2} \left(\frac{1 + R_n R - \sqrt{R_n R} 2 \cos \theta}{T_n T} - 1 \right) \quad (3.25)$$

ou la phase θ , prise par un électron en un tour entre les 2 dernières boites, est aléatoire. Elle sera supposée² uniformément répartie entre 0 et 2π . Elle dépend *a priori* des phases des matrices S_n et S . En moyennant sur cette phase θ , on obtient

$$\langle G_{n+1}^{-1} \rangle_\theta = \frac{h}{e^2} \left(\frac{1 + R_n R}{T_n T} - 1 \right) = \frac{h}{e^2} \frac{1 + (1 - T_n)(1 - T) - T_n T}{T_n T} \quad (3.26)$$

$$= \frac{h}{e^2} \left(\frac{1 - T}{T} \frac{1}{T_n} + \frac{1 - T_n}{T_n} \frac{1}{T} \right) \quad (3.27)$$

$$= \frac{h}{e^2} \left(2 \frac{1 - T}{T} \frac{1 - T_n}{T_n} + \frac{1 - T}{T} + \frac{1 - T_n}{T_n} \right) \quad (3.28)$$

²voir cependant la discussion dans le livre de J.-M. Luck [13] sur la violation de cette hypothèse pour le modèle d'Anderson.

Soit en définissant la résistance adimensionnée $g^{-1} = \frac{e^2}{h}G^{-1}$:

$$\langle g_{n+1}^{-1} \rangle = 2\langle g_n^{-1} \rangle \langle g^{-1} \rangle + \langle g_n^{-1} \rangle + \langle g^{-1} \rangle \quad (3.29)$$

Formule dérivée par Landauer en 1970.

Remarques

1. $\langle G_{n+1}^{-1} \rangle$ ne dépend du désordre aux échelles intermédiaires qu'à travers $\langle G^{-1} \rangle, \langle G_n^{-1} \rangle$. D'après cette formule, $\langle G^{-1} \rangle$ encode toute l'information nécessaire sur le désordre dans un échantillon. Ce résultat justifie l'hypothèse de loi d'échelle à un paramètre qui sera utilisée dans la partie suivante.
2. Cette formule nous montre aussi que la loi d'Ohm est violée dans un conducteur quantique cohérent. Elle n'est valable (approximativement) que pour les bons conducteurs de faibles résistances ($\langle G^{-1} \rangle, \langle G_n^{-1} \rangle \ll 1$).

De cette relation de composition (3.29), on peut tirer le comportement de la résistance moyenne avec la longueur du fil (loi d'échelle) : supposons que le désordre est suffisamment faible à l'échelle L_0 des boites pour que l'on puisse appliquer la loi d'Ohm à celle-ci : $\langle G_0^{-1} \rangle = \rho_0 L_0$ où ρ_0 est la résistivité du fil. En composant les résistivités des boites selon (3.29), $\langle G_n^{-1} \rangle$ croit d'abord linéairement avec n jusqu'à ce qu'elle atteigne une valeur (échelle ξ) pour laquelle le premier terme de (3.29) ne puisse plus être négligé. Cette échelle caractéristique peut être définie par $\langle G_{n^*}^{-1} \rangle = 1 = \rho_0 \xi$, soit

$$\xi = \frac{1}{\rho_0}. \quad (3.30)$$

La nouvelle loi d'échelle est alors une loi de croissance exponentielle $\langle G_{n+1}^{-1} \rangle \sim \langle G_n^{-1} \rangle (1 + 2\langle G_0^{-1} \rangle)$. Cette relation peut être convertie en une équation différentielle dans la limite où les boites ont une taille infinitésimale dL :

$$\langle G^{-1} \rangle(L + dL) = (2\langle G^{-1} \rangle(L) + 1)\rho_0 dL + \langle G^{-1} \rangle(L) \quad (3.31)$$

$$\Rightarrow \frac{d\langle G^{-1} \rangle(L)}{dL} = (2\langle G^{-1} \rangle(L) + 1)\rho_0 \quad (3.32)$$

$$\Rightarrow \ln \left(\frac{1 + 2\langle G^{-1} \rangle(L)}{3} \right) = 2 \left\langle \frac{L}{\xi} - 1 \right\rangle \quad (3.33)$$

$$\Rightarrow \langle G^{-1} \rangle(L) \simeq e^{2\rho_0 L} \quad (3.34)$$

où nous avons utilisé l'approximation de la loi d'Ohm à l'échelle ξ : $\langle G^{-1} \rangle(\xi) = 1 \simeq \rho_0 \xi$.

Ce résultat montre que la résistivité $\langle G^{-1} \rangle(L)/L$ diverge à température nulle dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$. En d'autres termes, un fil infini est toujours isolant, quelque soit l'intensité de son désordre. Ceci est une conséquence de la localisation de tous ses états électroniques. Une preuve rigoureuse de ce résultat existe qui utilise la représentation du problème en matrices aléatoires³.

Remarques

³Ce résultat est valable pour des modèles avec symétrie particule-trou : voir la suite.

1. Dans le cas de N modes transverses, la longueur de localisation est proportionnelle à N : $\xi_N = N\xi_1$.
2. Dans cette première remarque, on peut résoudre le paradoxe provenant du résultat ci-dessus. Il est évident qu'un fil de cuivre est un bon conducteur. Or ceci impose, d'après notre discussion initiale, que la longueur de localisation ξ soit plus grande que la longueur de cohérence de phase L_ϕ au delà de laquelle les résistances s'ajoutent de nouveau en série. Dans un fil métallique, L_ϕ est de l'ordre de quelques μm à basse température (quelques K). Or le nombre de modes transverses est donné à peu près par le nbre d'atomes dans une section du fil, soit $\sim 10^6$ pour un fil de $0.1\mu\text{m}$. Si l'on approxime ξ_1 par le libre parcours moyen $\simeq 10\text{\AA}$, on obtient $\xi \sim 1\text{mm} \gg L_\phi$. Ce qui explique que pour les fils de cuivre habituels, la loi d'Ohm est bien vérifiée, et qu'ils restent conducteurs à basse température.
3. Naïvement, $L_\phi \ll \xi$ correspond au régime de localisation faible alors que $L_\phi \gg \xi$ correspond au régime de localisation forte.
4. A faire : méthode DMPK en $1d$. Equation de Focker Planck pour les matrices aléatoires.
5. Importance des symétries : tout ce qui précède concerne les électrons dans un métal, sans champ magnétique. Il est habituel dans ce contexte de caractériser le problème par deux symétries, celle par renversement du temps T , et celle de rotation du spin S . Un champ magnétique brise les deux. La classification de Dyson-Wigner selon S, T (tirée des matrices aléatoires) définit les 3 classes d'universalité du problème de localisation selon que ces symétries soient brisées ou non :

	S	T
Gaussien Unitaire	+/-	-
Orthogonal	+	+
Symplectique	-	+

Mais en 1996, M. Zirnbauer a montré l'existence d'autres classes d'universalités formelles. Les symétries associées (chirale et particule-trou) se sont révélées liées à des exemples physiques d'Effet Hall Quantique et de quasiparticules dans les supraconducteurs). *A Faire : Fermions de Dirac (spectre relativiste)* .

3.1.4 Le problème des fluctuations

Dans cette partie, nous revenons sur le sens à donner à la théorie précédente d'une loi d'échelle à un paramètre. En effet, *a priori*, G^{-1} est une variable aléatoire⁴ qui, pour une taille finie L , fluctue d'échantillon à échantillon. Quelle est la variable à retenir dans ce contexte pour décrire le comportement d'échelle ? Pour comprendre le problème, considérons en particulier, dans la phase isolante, la résistance $G^{-1} \sim e^{2L/\xi}$. Si ξ fluctue de façon gaussienne entre deux échantillons (loi assez naturelle ici), la résistance sera distribuée selon une loi log-normale, qui n'est pas caractérisée de façon unique par ses

⁴L'idée de regarder la résistance G^{-1} et non la conductance vient de ce que c'est une variable quasi-additive, pour lequel le théorème de la limite centrale pourrait être utilisée : voir la suite de la discussion.

moments⁵. Ce problème du sens de ce paramètre de la loi d'échelle, et de la validité de l'hypothèse associée, a donné lieu à une intense controverse (voir en particulier l'article de Altshuler, Kravtsov et Lerner (86)).

La bonne variable

Nous allons ici suivre l'idée de Anderson, Thouless, Abrahams et D.S. Fisher (1981) qui ont montré qu'il fallait chercher, en remplacement de la résistance G^{-1} , une variable f telle que

- i. additivité : $\langle f_{12} \rangle = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle$, ce qui assurera que $\langle f(L) \rangle \simeq L$.
- ii. auto-moyennage : $\langle (\Delta f)^2(L) \rangle / \langle f^2(L) \rangle \rightarrow_{L \rightarrow \infty} 0$, où

$$\langle (\Delta f)^2(L) \rangle = \langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2.$$

Ces auteurs ont proposés comme candidat possible

$$f = \ln(1 + g^{-1}),$$

Afin de comprendre leur choix, revenons donc au cas du fil désordonné que nous avons traité dans la partie 3.1. Nous avons vu alors que $g^{-1} = -1 + 1/T$ où T est le coefficient de transmission précédemment défini. De cette relation, nous tirons que $f = -\ln T$ pour un fil. La loi de composition de f va donc découler de celle (3.25 pour T :

$$T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \theta} \quad (3.35)$$

où la phase θ est une phase aléatoire. Nous en tirons la loi de compositions pour les variables f :

$$f_{12} = f_1 + f_2 + X_{12} \quad \text{avec} \quad X_{12} = \ln(1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \theta) \quad (3.36)$$

En utilisant le résultat de l'intégrale $\int_0^{2\pi} d\theta \ln(a + b \cos \theta) = \pi \ln[\frac{1}{2}(a + \sqrt{a^2 - b^2})]$, en posant $a = 1 + R_1 R_2$ et $b = -2\sqrt{R_1 R_2}$, il est aisé de vérifier que $\langle X \rangle = 0$. Ceci nous prouve que f vérifie bien la première propriété

$$\langle f_{12} \rangle = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle \quad (3.37)$$

Reste le problème des fluctuations.

⁵La loi log-normale $P_{LN}(x)$ est définie de telle façon que $\ln x$ soit normalement distribué :

$$P_{LN}(x) = e^{-\frac{\ln^2(x/x_0)}{2\sigma^2}} / (x\sqrt{2\pi\sigma^2})$$

Ses moments valent $m_n = x_0^n e^{n^2\sigma^2/2}$. La loi de distribution $\tilde{P}(x) = P_{LN}(x)(1 + a \sin(2\pi \ln(x)))$ ($|a| < 1$) admet exactement les mêmes moments (Feller p.227), ce qui nous donne un exemple d'une loi de distribution insuffisamment caractérisée par ses moments, car trop 'large'.

En utilisant ce qui précède, $f_{12} - \langle f_{12} \rangle$ s'écrit comme la somme de 3 variables de moyennes nulles :

$$f_{12} - \langle f_{12} \rangle = (f_1 - \langle f_1 \rangle) + (f_2 - \langle f_2 \rangle) + X_{12} \quad (3.38)$$

ce qui nous permet d'écrire que

$$\langle (\Delta f_{12})^2 \rangle = \langle (\Delta f_1)^2 \rangle + \langle (\Delta f_2)^2 \rangle + \langle X^2 \rangle \quad (3.39)$$

Or la variance de X s'exprime sous la forme $\langle X^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \ln^2(1 + x^2 - 2 \cos \theta)$ avec $0 < x = \sqrt{R_1 R_2} < 1$. Cette fonction est bornée sur l'intervalle $0, 1$ (elle est nulle en 0 et vaut $\pi^2/3$ en 1). Elle est représentée sur la Figure 3.6. Ainsi $\langle (\Delta f_{12})^2 \rangle$ est borné par

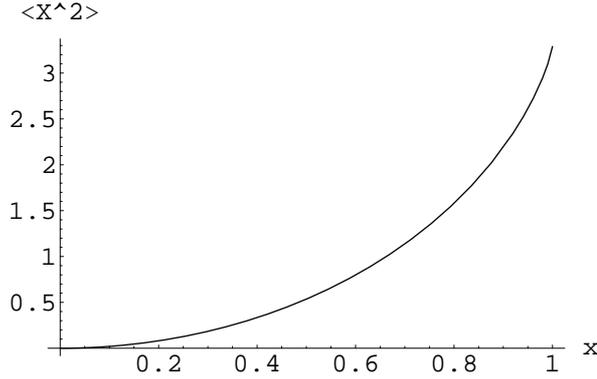


FIG. 3.6: Représentation de $\langle X^2 \rangle$ en fonction de $x = \sqrt{R_1 R_2}$.

$\langle (\Delta f_1)^2 \rangle + \langle (\Delta f_2)^2 \rangle + \frac{\pi^2}{3}$. Cette borne maximale se comporte donc comme linéairement avec l'échelle :

$$\langle (\Delta f)_{max}^2(L) \rangle = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{L}{L_0} - 1 \right)$$

Dans le pire des cas (borne maximale), nous trouvons donc que $\langle (\Delta f)^2(L) \rangle / \langle f \rangle^2(L) \sim L^{-1}$ et tend donc vers 0 dans la limite thermodynamique. $f = \ln(1 + g^{-1})$ est donc bien une 'bonne variable' pour la loi de l'échelle à un paramètre... L'est-elle vraiment ? Avant d'aller plus loin dans notre réflexion, faisons quelques remarques.

Remarques

1. Corrections aux lois d'échelle : f étant une variable auto-moyennante (qui ne fluctue pas dans la limite thermo), elle permet de définir une conductance typique $g_{typ}^{-1} = e^f - 1$. D'après ce qui précède, $g_{typ}^{-1}(L) \simeq e^{\alpha L} - 1$. Nous pouvons redériver une fonction d'échelle $\beta(g_{typ})$ pour la conductivité 'typique', et la comparer avec notre résultat précédent. Pour cela remarquons d'abord que $\ln f = \ln(\alpha L) \Rightarrow df/d \ln L = f$. Soit pour $\ln g_{typ} = -\ln(e^f - 1)$:

$$\frac{d \ln g_{typ}}{\ln L} = -\frac{e^f}{e^f - 1} \frac{df}{d \ln L} = -(1 + g_{typ}) \ln(1 + g_{typ}^{-1}), \quad (3.40)$$

ce qui nous donne notre résultat :

$$\beta(g_{typ}) = -(1 + g) \ln(1 + g^{-1}) = -1 - \frac{1}{2g} - \frac{6}{g^2} + \dots \quad (3.41)$$

Ce résultat est bien en accord avec notre résultat précédent pour un bon métal.

2. Que mesure-t-on expérimentalement ? On somme en série des résistances $G^{-1}(L_\phi)$: valeur moyenne (et pas typique) de $G^{-1}(L_\phi)$...

Convergence de distributions de probabilité

Remarquons d'abord qu'à L fini, même une variable auto-moyennante telle que f fluctue (l'ordre de grandeur de ses fluctuations peut être très petit). Ces fluctuations sont caractérisées par une loi de distribution $P_L(f)$. Que signifie alors cette théorie d'échelle à un paramètre ? En effet, si l'on raisonne par analogie avec les situations habituelles de physique statistique, le groupe de renormalisation ne permet pas uniquement d'identifier les points fixes du flot de renormalisation (phases ou transitions) pour lesquels le système est invariant d'échelle. Il permet aussi d'identifier les paramètres qui contrôlent l'écart au point fixe (variables pertinentes) et d'éliminer les variables non pertinentes qui peuvent être oubliées dans la détermination de l'approche de ces points fixes⁶. Dans notre cas, une variable auto-moyennante admet une loi asymptotique (point fixe) connue : une fonction delta, caractérisée par un seul paramètre $f(L \rightarrow \infty)$. Mais l'écriture d'une loi d'échelle à un paramètre suppose que l'approche de cette loi asymptotique se fait d'une façon universelle, décrite par un seul paramètre. Autrement dit, la loi de distribution de f à grand L peut être caractérisé (dans un sens qui reste à préciser) par un seul paramètre. Afin de préciser le sens de cette convergence en loi, revenons sur le théorème de la limite centrale.

Celui-ci nous dit (voir l'introduction du cours) que la somme de N variables aléatoires $x_N = \sum_{i=1}^N \zeta_i$ tirés selon une loi de distribution qui possède deux premiers moments finis ζ_0 et Δ_0 , est asymptotiquement distribué selon une loi normale $P_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N\Delta_0}} \exp(-(x - N\zeta_0)^2 / (2N\Delta_0))$.

- i. Il s'agit donc ici d'une convergence à 2 paramètres : Δ_0, ζ_0 . Les autres paramètres caractérisant $P(\zeta)$ (par exemple les autres moments) sont non pertinents. Plus N est grand, et plus la portion de la distribution ('centre') qui peut être approximée à la précision voulue par la gaussienne est importante. Cette approche est décrite par la loi des grandes nombres.
- ii. A N finie, cette convergence ne saurait concerner que le 'centre' de la distribution et non ses queues dans lesquelles sont contenues les informations non pertinentes. Toute approche de loi d'échelle qui étudierait les moments de la loi de distribution pourrait serait donc *a priori* suspecte (une meilleure idée ici est de regarder les moments de la loi de distribution à l'échelle $y = (x - N\zeta_0) / (N\Delta_0)$).
- iii. Par 'centre' de la loi de distribution, nous entendons la région $[x_1, x_2]$ qui contient une fraction significative arbitraire du poids de la distribution

$$\int_{x_1}^{x_2} P(x) dx = 1 - \epsilon$$

Ici, ϵ est arbitraire. Les queues de la distribution correspondent au complémentaire de ce 'centre' dans le support de cette distribution.

⁶Cette description du groupe de renormalisation est volontairement simpliste.

Nous allons maintenant essayer d'utiliser cet exemple pour affiner notre compréhension de la loi d'échelle vérifiée par f . En effet, nous avons vu que f vérifie une loi de composition

$$f_n = f_{n-1} + f_1 + X_{n-1,1} \quad (3.42)$$

A priori, ces trois variables sont corrélés. $X_{n-1,1}$ s'exprime en effet en fonction de f_{n-1} et f_1 : en remarquant que $R_i = 1 - T_i = 1 - e^{-f_i}$ nous obtenons

$$X_{n-1,1} = \ln \left[1 + (1 - e^{-f_1}) - 2 \cos \theta_{n-1,1} \sqrt{(1 - e^{-f_1})(1 - e^{-f_{n-1}})} \right] \quad (3.43)$$

Nous pouvons alors utiliser notre résultat d'automoyennance de f_n : avec une probabilité proche de 1, f_n sera d'ordre n à grand n . Il est donc possible de le négliger dans l'expression de $X_{n-1,1}$:

$$X_{n-1,1} \simeq \ln \left[1 + (1 - e^{-f_1}) - 2 \cos \theta \sqrt{1 - e^{-f_1}} \right] \quad (3.44)$$

Nous avons maintenant une variable $X_{n-1,1}$ indépendante de f_{n-1} et nous pouvons appliquer le théorème de la limite centrale (ou loi des grands nombres) à $f_n = \sum (f_1^{(i)} + X_i)$. Nous obtenons alors une convergence en loi d'échelle à 2 paramètres

$$\langle f_n \rangle = n \langle f_1 \rangle \quad (3.45)$$

$$\langle (\Delta f_n)^2 \rangle = n \left[\langle (\Delta f_1)^2 \rangle + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \ln^2 \left[1 + (1 - e^{-f_1}) - 2 \cos \theta \sqrt{1 - e^{-f_1}} \right] \right] \quad (3.46)$$

Dans la limite de faible désordre $f_1 \ll 1$, $X_1 \simeq \ln^2(1 + 2\sqrt{f_1} 2 \cos \theta \simeq 4f_1 \cos^2 \theta$. Nous obtenons ainsi que

$$\langle (\Delta f_n)^2 \rangle \simeq 2n \langle f_1 \rangle = 2 \langle f_n \rangle \quad (3.47)$$

L'hypothèse de loi d'échelle à un paramètre n'apparaît donc justifiée en dimension 1 qu'à faible désordre (ce qui n'est pas vraiment trop sérieux en $d = 1$: il est toujours possible d'imaginer qu'à une échelle très petite le désordre est faible). Ce résultat jette par contre un sérieux doute sur le possibilité de décrire la transition d'Anderson par une théorie à un paramètre.

Remarques si $L \ll \xi$, la distribution de ρ est une loi de Poisson $P(\rho) = \rho_0^{-1} e^{-\rho/\rho_0}$.

Ce résultat sur la loi d'échelle à 2 paramètres a été vérifié par d'autres techniques. Voir par exemple Pendry et Slevin (1990).

3.2 Compléments sur le formalisme de Landauer

3.2.1 Formalisme pour plusieurs modes électroniques

Nous considérons maintenant un fil quasi-unidimensionnel comportant plusieurs modes électroniques transverses. Ce fil est analogue à un guide d'ondes électroniques. L'énergie des électrons peut s'écrire $E_x + E_y + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_i + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Les modes i qui contribuent au transport sont ceux à l'énergie de Fermi. Le nombre de valeurs discrètes de E_i inférieures à E_F nous donne donc le nombre de modes transverses de conduction.

Reprenons dans ce cadre le calcul précédent de la conductance à deux terminaux. La matrice de probabilité M doit maintenant s'écrire :

$$\begin{pmatrix} j_{11}^L \\ \vdots \\ j_{1i}^L \\ \vdots \\ j_{21}^R \\ \vdots \\ j_{2i}^R \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{11} & \dots & R_{1j} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ R_{i1} & \dots & R_{ij} & \dots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} T'_{11} & \dots & T'_{1j} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ T'_{i1} & \dots & T'_{ij} & \dots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} T_{11} & \dots & T_{1j} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ T_{i1} & \dots & R_{ij} & \dots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} R'_{11} & \dots & R'_{1j} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ R'_{i1} & \dots & R'_{ij} & \dots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{11}^R \\ \vdots \\ j_{1j}^R \\ \vdots \\ j_{21}^L \\ \vdots \\ j_{2j}^L \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

où R_{ij} est le coefficient de réflexion pour un courant de mode j vers un courant de mode i et T_{ij} est le coefficient de transmission pour un courant de mode j vers un courant de mode i . Introduisons la notation : $R_i = \sum_j R_{ij}$ et $T_i = \sum_j T_{ij}$.

L'invariance par renversement du temps et l'unitarité de la matrice de diffusion nous imposent ici : $\sum_i T_i = \sum_i (1 - R_i)$ et $R_i + T_i = 1$, $R'_i + T_i = 1$.

Par analogie avec le cas à un mode, l'intensité s'écrit :

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{h} \sum_i \int dE ((1 - R'_i f_1^R(E) - T_i f_2^L(E)) \\ &= \frac{e}{h} \sum_i \int dE T_i (f_1^R(E) - f_2^L(E)) \end{aligned} \quad (3.49)$$

A température nulle $\int dE (f_1^R - f_2^L) = \mu_1 - \mu_2$. D'où :

$$G = \frac{Ie}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{e^2}{h} \sum_i T_i \quad (3.50)$$

3.2.2 Formalisme de Buttiker pour la conductance à 4 terminaux

Nous allons maintenant analyser le cas où le fil est relié à quatre contacts (terminaux).

1. Cas à un mode

Considérons l'interface entre le contact 1 et le conducteur. Ce contact est modélisé par un réservoir d'électrons thermalisés au potentiel chimique μ_1 . Le courant provenant du contact 1 vers le conducteur vaut $\frac{e}{h}\mu_1$. Le courant qui va du conducteur au réservoir comporte quatre contributions : le courant 1 réfléchi par le fil, et les courants transmis par le fil et issus des réservoirs 2, 3 et 4. Nous arrivons en conséquence à l'expression suivante pour le courant électronique au niveau du contact 1 [9] :

$$I_1 = \frac{e}{h}((1 - R_1)\mu_1 - \sum_{j \neq 1} T_{1j}\mu_j) \quad (3.51)$$

On peut généraliser ce résultat sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{pmatrix} = \frac{e}{h} \begin{pmatrix} (1 - R_{11}) & -T_{12} & -T_{13} & -T_{14} \\ -T_{21} & (1 - R_{22}) & -T_{23} & -T_{24} \\ -T_{31} & -T_{32} & (1 - R_{33}) & -T_{34} \\ -T_{41} & -T_{42} & -T_{43} & (1 - R_{44}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

À un facteur e près, cette matrice peut être vue comme la matrice de conductance. Notons qu'en raison de la conservation du courant, la somme de chaque colonne et de chaque ligne est nulle. Considérons maintenant la situation expérimentale $I_1 = -I_3$ et que $I_2 = -I_4$. Nous obtenons

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 - \mu_3 \\ \mu_2 - \mu_4 \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

avec

$$\alpha_{11} = \frac{e}{h} \frac{(1 - R_{11})S - (T_{14} + T_{12})(T_{41} + T_{21})}{S} \quad (3.54)$$

$$\alpha_{12} = \frac{e}{h} \frac{(T_{12}T_{34} - T_{14}T_{32})}{S} \quad (3.55)$$

$$\alpha_{21} = \frac{e}{h} \frac{(T_{21}T_{43} - T_{23}T_{41})}{S} \quad (3.56)$$

$$\alpha_{22} = \frac{e}{h} \frac{(1 - R_{22})S - (T_{21} + T_{23})(T_{32} + T_{12})}{S} \quad (3.57)$$

où

$$S = T_{12} + T_{14} + T_{32} + T_{34} = T_{21} + T_{41} + T_{23} + T_{43} \quad (3.58)$$

(Ces deux sommes sont égales en raison de l'invariance par renversement du temps) Supposons maintenant que le courant aille du réservoir 1 au réservoir 3. Les potentiels mesurés sont alors μ_2 et μ_4 , avec la condition que les courants aux contacts 2 et 4 soient nuls. En injectant la condition $I_2 = 0$ dans la dernière matrice, on obtient facilement que

$$G_{13,24} = \frac{eI_1}{\mu_2 - \mu_4} = e \frac{(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})}{(\alpha_{21})} \quad (3.59)$$

Il s'agit de la conductance à 4 terminaux pour une différence de potentiel mesurée aux bornes 2 et 4 lorsque le courant passe dans l'échantillon du réservoir 1 vers

le réservoir 3. On peut généraliser cette démarche et l'appliquer à n'importe quel couple de contacts, et l'exprimer ainsi :

$$G_{mn,kl} = \frac{e^2}{h} \frac{(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})S}{(T_{km}T_{ln} - T_{kn}T_{lm})} = \frac{e^2}{h} \frac{D}{(T_{km}T_{ln} - T_{kn}T_{lm})} \quad (3.60)$$

2. Cas à plusieurs modes

Considérons pour simplifier que tous les terminaux sont identiques et comportent chacun N modes. La matrice de diffusion de notre échantillon sera désormais une matrice $4N \times 4N$. Notons désormais $R_{ii,mn}$ la probabilité qu'un électron du terminal i dans le mode m soit réfléchi dans le mode n , et $T_{ij,mn}$ la probabilité qu'un électron du terminal i dans le mode m passe dans le terminal j dans le mode n . Ainsi, nous pouvons exprimer le courant du réservoir i vers le réservoir j

$$I_{ij} = -\frac{e}{h} \sum_{mn} T_{ij,mn} \mu_j \quad (3.61)$$

et le courant qui revient vers le réservoir i

$$I_{ii} = -\frac{e}{h} \sum_{mn} R_{ii,mn} \mu_i \quad (3.62)$$

La conservation du courant nous conduit à écrire cette fois $\sum_j I_{ij} = \frac{e}{h} N \mu_i$. L'expression du courant I_i est alors [9] :

$$I_i = \frac{e}{h} \left((N - R_{ii}) \mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij} \mu_j \right) \quad (3.63)$$

en notant $\sum_{mn} R_{ii,mn} = R_{ii}$ et $\sum_{mn} T_{ij,mn} = T_{ij}$.

4 Localisation Faible et Diffusion Multiple des Electrons

Nous avons vu au chapitre précédent que dans un fil métallique, la longueur de localisation ξ croissait (linéairement) avec le nombre N de modes transverses de ce fil : $\xi \simeq Nl_e$. Des effets importants de localisation se manifestent donc pour des tailles L très grande devant le libre parcours moyen l_e , mais aussi pour des longueurs de cohérence de phase plus grande que ξ . Or en pratique pour des conducteurs en dimension 2 et 3, lorsque le désordre augmente, la longueur de cohérence de phase demeure plus petite que la longueur de localisation. Les manifestations de la localisation d'Anderson n'apparaissent donc que sous la forme de corrections (faibles) au comportement de transport classique. On parle alors de localisation faible, qui est l'objet d'étude de ce chapitre.

Dans cette limite de localisation faible, nous étudions donc les effets perturbatifs sur le transport électronique de la diffusion par des impuretés. Les outils naturels pour étudier ces problèmes de diffusion sont le formalisme des fonctions de Green que nous allons rappeler dans un premier temps. Nous introduirons par la suite les développements diagrammatique en le désordre qui permettent d'évaluer les corrections de localisation faible à la conductivité d'un métal.

4.1 Définitions

4.1.1 Le Hamiltonien

Dans toute cette partie, nous allons considérer des électrons sans interaction, perturbés par un potentiel aléatoire $V(\mathbf{r})$. L'effet des interactions électroniques ne sera pas considéré ici, de même que le couplage entre électrons et phonons. Plus généralement, nous supposons que la diffusion considérée est un processus élastique, c'est-à-dire que les impuretés sont des objets statiques sans degré de liberté interne. Tous les processus inélastiques (y compris les interactions entre un électron et la mer de Fermi qui l'entoure) seront pris en compte phénoménologiquement à travers un temps de cohérence de phase τ_ϕ pour les électrons. Les différents processus de déphasage conduisent tous à un comportement algébrique de τ_ϕ avec la température¹ :

$$\tau_\phi(T) \simeq T^{-p}, \quad (4.1)$$

¹L'interaction entre électrons correspond à $p = 2/3$ en dimension $d = 1$ et $p = d/2$ en $d=2,3$, alors que le couplage électrons/phonons correspond à $p = 3$. Akkermans & Montambaux

que nous utiliserons par la suite. Le hamiltonien qui décrit ce système d'électrons sans interaction s'écrit donc simplement

$$H = H_0 + V \text{ avec } H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (4.2)$$

où V est l'opérateur qui modélise le champ d'impuretés. Plusieurs modélisations sont possibles pour ce potentiel de désordre. Nous allons maintenant discuter les deux plus utiles.

4.1.2 Modèles de désordre

Le désordre modélisé par V peut avoir plusieurs origines : des impuretés ponctuelles dans un métal, le potentiel coulombien créé par des impuretés distantes (donneurs) dans une hétérojonction (entre deux semiconducteurs ou un semiconducteur et un isolant), etc. Selon son origine, ce désordre peut avoir des propriétés différentes, en particulier pour ce qui est des corrélations spatiales. Nous ne considérerons dans ce chapitre que le cas générique d'un désordre gaussien sans corrélation, en le reliant dans un second temps avec un modèle d'impuretés localisées.

Le modèle gaussien

Le plus fréquemment, le potentiel de désordre $V(\mathbf{r})$ est modélisé par un champ continu caractérisé par sa loi de distribution que nous allons choisir gaussienne :

$$P[\{V(\mathbf{r})\}] = \frac{1}{Z_V} \exp\left(-\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r}_1 d^d \mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1) K(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2)\right) \quad (4.3)$$

où Z_V est un facteur de normalisation. Comme toute distribution gaussienne, celle-ci est entièrement caractérisée par ses deux premiers moments, définis par

$$\int d^d \mathbf{r}_1 W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) K(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4.4)$$

$$W(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \rangle_V \quad ; \quad \langle V(\mathbf{r}_1) \rangle_V = 0 \quad (4.5)$$

où $\langle \rangle_V$ désigne une moyenne sur $P[V]$. Si l'on considère un potentiel de désordre avec corrélation à courte portée, et que l'on se restreint aux propriétés de diffusions des électrons sur des longueurs d'ondes λ_F grande devant cette longueur de corrélation, il est commode d'approximer la fonction de corrélation W par un fonction delta :

$$W(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \rangle_V = \gamma \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (4.6)$$

où γ devient le seule paramètre de la loi de distribution du désordre. En composantes de Fourier, ces corrélations valent

$$\langle V_{\mathbf{q}} \rangle_V = 0 \quad ; \quad \langle V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \rangle_V = \frac{\gamma}{L^d} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}', 0) \quad (4.7)$$

Notons que de façon générale, l'ensemble des fonctions de corrélations moyennes² est décrite par la fonctionnelle génératrice $Z[\{j(\mathbf{r})\}]$ définie par

$$Z[\{j(\mathbf{r})\}] = \left\langle \exp \int d^d \mathbf{r} j(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \right\rangle_V \quad (4.8)$$

d'où l'on peut tirer les fonctions de corrélations et les cumulants moyens

$$\langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \dots V(\mathbf{r}_n) \rangle_V = \frac{\delta^n Z[\{j(\mathbf{r})\}]}{\delta V(\mathbf{r}_1) \dots \delta V(\mathbf{r}_n)} \Big|_{j=0} \quad (4.9)$$

$$\langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \dots V(\mathbf{r}_n) \rangle_{V,c} = \frac{\delta^n \ln Z[\{j(\mathbf{r})\}]}{\delta V(\mathbf{r}_1) \dots \delta V(\mathbf{r}_n)} \Big|_{j=0} \quad (4.10)$$

Dans le cas du modèle gaussien considéré ici, cette fonctionnelle génératrice vaut exactement

$$Z[\{j(\mathbf{r})\}] = \exp \left(\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' j(\mathbf{r}) W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') j(\mathbf{r}') \right) \quad (4.11)$$

Modèles d'impuretés localisés (modèle d'Edwards)

Un modèle sans doute plus réaliste dans le cas d'impuretés localisées dans un métal consiste à écrire le potentiel de désordre $V(\mathbf{r})$ comme la somme des contributions indépendantes de potentiel d'impuretés :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i v_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (4.12)$$

où le potentiel central $v(\mathbf{r})$ modélise l'interaction entre l'impureté située en \mathbf{r}_i et l'électron. Dans la suite, nous allons considérer le cas d'une répartition aléatoire d'impuretés dans l'échantillon, et négliger la portée du potentiel $v(\mathbf{r})$ d'une impureté devant toutes les longueurs caractéristiques du problème (dont la longueur de Fermi λ_F). Ceci revient à modéliser ce potentiel une fonction δ :

$$v_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = U_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

Cette approximation nous fournit les expressions pour les fonctions de corrélations moyennes à deux points dans la limite au continu où le volume de l'échantillon $V \rightarrow \infty$ à densité d'impuretés $\rho_{imp} = N_{imp}/V$ constante :

$$\langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle_V = N_{imp} \langle U_i^2 \rangle_U \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \gamma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4.13)$$

où N_{imp} est le nombre d'impuretés. La limite thermodynamique est donc prise à γ constant. $\langle U_i^2 \rangle_U$ est la variance de la loi de distribution des intensités U_i des potentiels d'impuretés, supposée de valeur moyenne nulle (on peut toujours se ramener à ce cas en décalant

²Remarquons qu'il existe d'autres fonctions de corrélations, telles que les moyennes de produits de fonctions de corrélations (en particulier les moments d'ordre supérieurs de leur loi de distribution) qui ne sont pas décrits par cette fonctionnelle génératrice. Voir à ce sujet la partie concernant les verres de spin.

l'origine des énergies). Cette égalité (4.13) ne permet pas de relier les deux modèles dans la limite au continu : elle permet simplement d'identifier le paramètre γ dans ce modèle d'Edwards. Il nous reste maintenant à montrer que le potentiel $V(\mathbf{r})$ obtenu dans la limite continue est bien gaussien si l'on suppose que les intensités U_i le sont également. Pour cela, il est commode de considérer la fonctionnelle $Z[\{j(\mathbf{r})\}]$ génératrice des moments. En supposant une répartition au hasard (distribution de Poisson) des positions \mathbf{r}_i des impuretés, celle-ci s'écrit

$$Z[\{j(\mathbf{r})\}] = \left\langle \exp \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} j(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \right\rangle_V \quad (4.14)$$

$$= \prod_{i=1}^{N_{imp}} \int \frac{d^d \mathbf{r}}{V} \left\langle \exp \left(\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} j(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right) \right\rangle_V \quad (4.15)$$

$$= \left(1 + \frac{\rho_{imp}}{N_{imp}} \int d^d \mathbf{r}' \left(\left\langle \exp \left(\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} j(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) \right\rangle_V - 1 \right) \right)^{N_{imp}} \quad (4.16)$$

$$\rightarrow_{N_i \rightarrow \infty} \exp \left(\rho_{imp} \int d^d \mathbf{r}' \left(\left\langle \exp \left(\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} j(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) \right\rangle_V - 1 \right) \right). \quad (4.17)$$

Les cumulants se déduisent donc de la fonctionnelle génératrice suivante

$$\ln Z[\{j(\mathbf{r})\}] = \rho_{imp} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^d \mathbf{r}' \left\langle \left(\int d^d \mathbf{r} j(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right)^n \right\rangle_V. \quad (4.18)$$

Ils s'expriment de façon explicite sous la forme

$$\langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \dots V(\mathbf{r}_n) \rangle_{V,c} = \rho_{imp} \int d^d \mathbf{r} \langle v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \dots v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \rangle_v \quad (4.19)$$

Nous voyons ici que la bonne limite à prendre pour obtenir le modèle gaussien à partir du modèle d'Edwards est celle où les intensités des impuretés U_i tendent vers 0 à $\gamma = N_{imp} \langle U_i^2 \rangle$ constant. Dans cette limite, seul le second cumulant survit, ce qui correspond bien à une loi limite gaussienne. Cette limite peut se comprendre à nouveau comme une nouvelle application du théorème de la limite centrale.

4.1.3 Diffusion d'ondes planes : les fonctions de Green

Dans le reste de ce chapitre, nous allons nous placer dans la limite (à définir ultérieurement) où nous pouvons supposer qu'une onde plane incidente ressort asymptotiquement, après diffusion par le désordre, sous la forme d'une onde plane. Cette limite correspond manifestement à une limite de désordre faible. Le formalisme naturel pour décrire cette diffusion d'onde plane est celui des fonctions de Green. Ces fonctions permettent de définir naturellement l'évolution d'une onde plane sous l'action du hamiltonien (4.2).

Définition formelle (conventions)

De façon formelle, la fonctions de Green pour un hamiltonien H est définie par l'équation

$$(E - H) \hat{G}(E) = \mathbf{I} \quad (4.20)$$

où \mathbf{I} est l'opérateur identité.

Le problème de la définition de G pour une valeur propre E du hamiltonien H est résolu en considérant la partie principale de Cauchy de \hat{G} , ou plus pragmatiquement les fonctions de Green retardées ou avancées $G^{R/A}$ (pour lesquelles les pôles sont déplacés de l'axe réel) :

$$\hat{G}^{R/A}(E) = (E - H \pm i\eta)^{-1} \quad (4.21)$$

où $\eta = 0^+$. Dans la suite, η apparaîtrait naturellement sous la forme d'un temps de vie (long) des excitations considérées. Nous pouvons *a priori* l'identifier avec l'inverse du temps de cohérence de phase : $\eta = \hbar/(2\tau_\phi)$. Sachant que H est hermitien, nous obtenons de la définition (4.20) en représentation position

$$G^A(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = [G^R(E, \mathbf{r}', \mathbf{r})]^*$$

Remarques

1. G^R peut être associé à la propagation des particules (électrons) au dessus de la surface de Fermi, et G^A à celle des trous. Voir à ce sujet le cours de problème à N corps.
2. Autre point de vue sur les fonctions de Green avancées/retardées : en dimension 1, le hamiltonien d'une particule libre s'écrit $H_{1d} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. La définition (4.20) implique que $G(E, x, x')$ soit continue en $x = x'$, et $\partial_x G(x, x')$ discontinue telle que $\partial G(x, x^+) - \partial G(x, x^-) = 2m/\hbar^2$. En dehors de $x = x'$ la solution est triviale, et nous obtenons donc deux solutions :

$$G(E, x, x') = \pm i \frac{m}{\hbar^2 k} e^{\pm k|x-x'|} ; \hbar k = \sqrt{2mE}$$

Ces deux solutions (retardées et avancées) correspondent aux deux conditions aux limites possibles (elles sont définies par une équation différentielle du second ordre) : ondes venant de l'infini, ou venant de la source en x .

3. Sens du η : en 1d (cf ci-dessus), $E \rightarrow E + i\eta$ correspond à $k \rightarrow k(1 + i\eta/2E)$. D'après la remarque précédente, G^R devient la seule solution acceptable (non divergente). η correspond alors à un temps de vie $\tau = \hbar/2\eta$ (donc grand si η est petit) des particules émises à la source. Dans la suite de notre discussion, ce η arbitraire acquiera souvent le sens physique du temps de perte de mémoire de phase (temps de déphasage) τ_ϕ . Il s'agit du temps de vie typique d'un état d'un électron du au couplage avec les autres électrons (basse température) ou les phonons (haute température).

Une expression utile des fonctions de Green ci-dessus est donnée par leur développement sur une base d'états propres $\psi_n(\mathbf{r})$ de H :

$$G^R(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n c_n(\mathbf{r}, E) \psi_n(\mathbf{r}')$$

En utilisant la définition (4.21) de \hat{G}^R dans cette équation, nous obtenons

$$\begin{aligned} \sum_n (E - E_n + i\eta) c_n(\mathbf{r}, E) &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \Rightarrow c_n(\mathbf{r}, E) &= \frac{\psi_n^*(\mathbf{r})}{E - E_n + i\eta} \end{aligned}$$

où le passage à la seconde équation se fait en intégrant avec la mesure $\int d^d\mathbf{r}\psi_n^*(\mathbf{r})$ la première équation. L'expression de $G^{R/A}$ ainsi obtenue est

$$G^{R/A}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}')}{E - E_n \pm i\eta} \quad (4.22)$$

Remarque Ce développement permet d'entrevoir pourquoi les fonctions de Green sont des objets intéressants qui codent le spectre lorsque le nombre d'états est très grand (cas des solides, des noyaux complexes, etc).

Une expression de $\hat{G}^{R/A}$ en temps (et non en énergie) est utile pour comprendre leur dénomination. Elle est définie comme la transformée de Laplace de $\hat{G}^{R/A}(E)$. Pour obtenir son expression, utilisons la représentation de la fonction

$$\theta(t) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iEt}}{E + i\eta}$$

où $\eta = 0^+$. A l'aide du développement (4.22), cette représentation nous permet d'obtenir

$$G^R(\tau = t' - t, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-iE\tau} G^R(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (4.23)$$

$$= \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}') \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iE\tau}}{E - E_n + i\eta} \quad (4.24)$$

$$= -i\theta(\tau = t' - t) \sum_n e^{-iE_n\tau} \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}') \quad (4.25)$$

De la même façon, la fonction de Green avancée s'écrit

$$G^A(\tau = t' - t, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\theta(-\tau) \sum_n e^{-iE_n\tau} \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}')$$

Les fonctions de Green retardées sont donc non nulles pour des temps t' postérieurs à t , et les fonctions de Green avancées pour des temps antérieurs. Cette propriété prendra du sens dans le paragraphes suivant.

Fonction de Green et propagation des états propres

Si nous reprenons l'expression (4.25) des fonctions de Green, nous en déduisons qu'elles ne sont rien d'autre que les éléments de matrices de l'opérateur d'évolution :

$$G^{R/A}(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mp i\theta(\pm\tau) \sum_n e^{-iE_n\tau} \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}') = \mp i\theta(\pm\tau) \langle \mathbf{r}' | e^{-iH\tau} | \mathbf{r} \rangle \quad (4.26)$$

où $e^{-iH\tau}$ est l'opérateur d'évolution d'un état en fonction du temps : $|\psi(\tau)\rangle = e^{-iH\tau}|\psi(0)\rangle$. Ces fonctions de Green décrivent donc l'évolution pour les temps positifs et négatifs d'un état créé en $t = 0$:

$$\hat{G}^{R/A}(\tau) = \mp i\theta(\pm\tau)e^{-iH\tau} \quad (4.27)$$

Fonction de Green d'électrons libres

Considérons le cas de particules libres : leur fonction de Green retardée s'expriment simplement comme

$$G^{R/A}(E, \vec{k}) = \frac{1}{E - \epsilon_{\vec{k}} \pm i\eta} \quad (4.28)$$

avec les énergies des états propres libres $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / (2m)$. En espace réel en dimension 3, ces fonctions de Green s'expriment dont comme (avec $(E = \hbar^2 k_0^2 / (2m))$ et $R = |\vec{r}' - \vec{r}|$)

$$G^{R/A}(\vec{r}, \vec{r}', E) = \frac{2m}{\hbar^2 (2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} \frac{1}{k_0^2 - k^2 \pm i\eta} \quad (4.29)$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2 (2\pi)^3} \int \frac{dk}{k} \frac{k^2}{ikR} \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{k_0^2 - k^2 \pm i\eta} \quad (4.30)$$

$$= \frac{m}{\hbar^2 (2\pi)^2 (iR)} \int_0^\infty dk \left(e^{ikR} - e^{-ikR} \right) \left(\frac{1}{k - k_0 \mp i\eta} + \frac{1}{k - +k_0 \pm i\eta} \right) \quad (4.31)$$

$$= \frac{m}{\hbar^2 (2\pi)^2 (iR)} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{k - k_0 \mp i\eta} \quad (4.32)$$

$$= -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{\pm ik_0 R}}{R}. \quad (4.33)$$

Fonction de Green et densité d'états.

Au delà des propriétés de transport, la fonction de Green permet également d'obtenir des quantités telle que la densité d'états. Celle-ci est définie par la relation

$$\nu(E) = \sum_n \delta(E - E_n), \quad (4.34)$$

dont on déduit la densité d'états par unité de volume : $\rho(E) = \nu(E)/V$. En utilisant l'identité

$$\frac{1}{x + i\eta} = pp \left(\frac{1}{x} \right) - i\pi \delta(x)$$

nous pouvons relier la densité d'états locale aux fonctions de Green :

$$\rho(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \delta(E - E_n) \quad (4.35)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}) \quad (4.36)$$

$$= \frac{i}{2\pi} (G^R(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}) - G^A(E, \mathbf{r}, \mathbf{r})) \quad (4.37)$$

De cette relation, nous pouvons tirer la densité d'états par unité de volume

$$\rho(E) = \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{r} \rho(E, \mathbf{r}, \mathbf{r})$$

Le résultat s'exprime simplement sous la forme

$$\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{ImTr} \hat{G}^R$$

Nous utiliserons cette relation dans la suite pour trouver la densité d'états moyenne dans un métal faiblement désordonné.

Conductivité et fonctions de Green : la formule de Kubo.

Nous ne redériverons pas ici la formule de Kubo pour la conductivité (voir la dérivation en annexe). Cette formule s'obtient dans le cadre de la réponse linéaire, et relie la fonction de réponse à un champ électrique aux fonctions de corrélations spontanée du courant (cas particulier du théorème de fluctuation-dissipation). Cette formule de Kubo pour la conductibilité $\sigma(\omega)$ s'écrit sous la forme³

$$\sigma_{ij}(\omega) = s \frac{\hbar}{2\pi V} \text{ReTr} \left(\hat{j}_i \hat{G}^R(E_F) \hat{j}_j \hat{G}^A(E_F - \hbar\omega) \right) \quad (4.38)$$

où $s = 2$ pour des spins 1/2, et \hat{j}_i est l'opérateur courant dans la direction i . Classiquement j_i vaut $-ev_i$ ($\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ la vitesse des électrons), et son analogue quantique est $\hat{j}_i = -\frac{e}{m} \hat{p} = -\frac{e}{m} \hbar k_i = i \frac{e}{m} \hbar \partial_i$. Selon la représentation utilisée, nous obtenons les deux expressions suivantes pour cette conductivité

$$\sigma_{ij}(\omega) = -s \frac{e^2 \hbar^3}{2\pi m^2 V} \int d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' \text{Re} \left(\partial_i G^R(E_F, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \partial_j G^A(E_F - \hbar\omega, \mathbf{r}', \mathbf{r}) \right) \quad (4.39)$$

$$= s \frac{e^2 \hbar^3}{2\pi m^2 V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} k_i k'_j \text{Re} \left(G^R(E_F, \mathbf{k}, \mathbf{k}') G^A(E_F - \hbar\omega, \mathbf{k}', \mathbf{k}) \right) \quad (4.40)$$

Il est également commode de considérer la conductivité non locale $\sigma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$, qui s'exprime en transformée de Fourier sous la forme

$$\sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = s \frac{e^2 \hbar^3}{2\pi m^2 V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} k_i k'_j \text{Re} K_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.41)$$

avec

$$K_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(q, \omega) = G^R(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, \mathbf{k}' + \mathbf{q}/2, E_F + \hbar\omega) G^A(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, \mathbf{k}' - \mathbf{q}/2, E_F) \quad (4.42)$$

4.1.4 Transport d'un électron : la probabilité de diffusion

Nous venons de voir comment le calcul des fonctions de Green permettait d'obtenir le comportement de la conductivité. Afin d'interpréter les résultats que nous allons obtenir, il est utile de considérer une autre grandeur, qui est la probabilité de diffusion d'un électron

³Nous avons négligé dans cette expression des termes de la forme $G^R G^R$ et $G^A G^A$ qui donnent des contributions sous dominantes pour notre étude.

d'un point \mathbf{r} à un point \mathbf{r}' pendant un temps t . Les similitudes et les différences entre cette probabilité de diffusion et la conductivité permettront de mieux interpréter nos calculs de corrections quantiques de localisation aux valeurs classiques de conductivité et de probabilité de diffusion.

Nous avons vu dans la partie 4.1.3 que la fonction de Green \hat{G}^R décrivait la propagation d'une onde plane. Pour décrire la propagation d'un électron dans ce formalisme, nous allons donc le décrire comme un paquet d'onde gaussien. Pour un électron situé en \mathbf{r} et d'énergie moyenne E_F , ce paquet d'onde est décrit par l'état

$$|\psi_{\mathbf{r}}\rangle = A \sum_n e^{-\frac{(E_n - E_F)^2}{4\sigma^2}} \langle \psi_n | \mathbf{r} \rangle |\psi_n\rangle, \quad (4.43)$$

où A est une constante de normalisation.

La probabilité de diffusion $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ de ce paquet d'onde d'un point \mathbf{r} à un point \mathbf{r}' pendant un temps t est reliée à l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution entre ces deux points :

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = |\theta(t) \langle \mathbf{r}' | e^{-iHt} | \psi_{\mathbf{r}} \rangle|^2 \quad (4.44)$$

L'élément de matrice qui intervient dans cette probabilité s'exprime à l'aide de la définition (4.43) sous la forme

$$\theta(t) \langle \mathbf{r}' | e^{-iHt} | \psi_{\mathbf{r}} \rangle = A \theta(t) \sum_n \langle \mathbf{r}' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathbf{r} \rangle e^{-\frac{(E_n - E_F)^2}{4\sigma^2}} e^{-iE_n t} \quad (4.45)$$

$$= iA \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \sum_n \frac{\langle \mathbf{r}' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathbf{r} \rangle}{\epsilon - E_n + i\eta} e^{-\frac{(\epsilon - E_F)^2}{4\sigma^2}} e^{-i\epsilon t} \quad (4.46)$$

$$= iA \int \frac{d\epsilon}{2\pi} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon) e^{-\frac{(\epsilon - E_F)^2}{4\sigma^2}} e^{-i\epsilon t} \quad (4.47)$$

A l'aide de cette dernière expression, la probabilité de diffusion s'exprime maintenant comme

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = A^2 \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon + \frac{\omega}{2}) G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon - \frac{\omega}{2}) e^{-\frac{(\epsilon + \omega/2 - E_F)^2}{4\sigma^2}} e^{-\frac{(\epsilon - \omega/2 - E_F)^2}{4\sigma^2}} e^{-i\omega t} \quad (4.48)$$

Nous voulons décrire le comportement diffusif des électrons sur des temps grand devant les temps microscopiques, ce qui en particulier implique que $\omega \ll \sigma$. Par ailleurs, dans un métal, pour des énergies d'excitations ϵ habituelles, la densité d'état au niveau de Fermi varie peu, ce qui nous permet d'écrire que

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon + \frac{\omega}{2}) G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \epsilon - \frac{\omega}{2}) \simeq G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_F + \frac{\omega}{2}) G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_F - \frac{\omega}{2}).$$

Il nous reste à effectuer l'intégrale sur ϵ dans les conditions $\omega \ll \sigma$:

$$A^2 \int \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{-\frac{(\epsilon + \omega/2 - E_F)^2}{4\sigma^2}} e^{-\frac{(\epsilon - \omega/2 - E_F)^2}{4\sigma^2}} \simeq A^2 \int \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{-\frac{(\epsilon - E_F)^2}{2\sigma^2}} = A^2 \sqrt{2\pi} \sigma = \frac{1}{\rho_0}$$

où ρ_0 est la densité d'états moyenne. L'expression finale ainsi obtenue est

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left(\frac{1}{2\pi\rho_0} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_F + \frac{\omega}{2}) G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_F - \frac{\omega}{2}) \right) \quad (4.49)$$

soit encore en transformée de Fourier en temps

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_F + \frac{\omega}{2}) G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E_F - \frac{\omega}{2}). \quad (4.50)$$

La comparaison avec l'expression de Kubo de la conductivité est simplifiée si nous considérons cette probabilité de diffusion en transformée de Fourier :

$$P(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0 V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G^R(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2, \mathbf{k}' + \mathbf{q}/2, E_F + \hbar\omega) G^A(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2, \mathbf{k}' - \mathbf{q}/2, E_F) \quad (4.51)$$

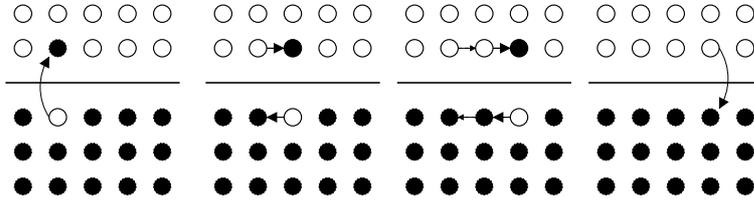


FIG. 4.1: Représentation schématique de la création et de la propagation d'une excitation de la mer de Fermi. L'excitation particule-trou est créée (à gauche), puis l'état occupé (particule) et l'état vide (trou) de propagent indépendamment jusqu'à l'état final (à droite). Ce schéma indique qu'intuitivement, la propagation du trou peut être représentée comme la propagation d'un état occupé (électron) en sens opposé à l'évolution du temps, ce qui justifie les conventions utilisées diagrammatiquement pour représenter les fonctions de Green avancées.

L'expression de cette probabilité de diffusion d'un électron en terme d'un produit de fonction de Green retardée et avancée est une propriété générale des fonction de transports dans un problème à N corps. Elle manifeste la propagation simultanée de l'état occupé et de l'état vide constituant l'excitation élémentaire du fondamental. Cette idée est illustrée sur la figure 4.1. Notons aussi que la propagation de l'état vide peut être vue comme une propagation d'un état occupé qui remonterait le temps.

En reportant l'expression de la fonction de Green libre (4.33) dans la formule (4.50), nous obtenons l'expression suivante (avec $E = \hbar vk$) :

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{m^2}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\frac{\omega R}{v}}}{R^2}, \quad (4.52)$$

qui s'exprime en temps réel sous la forme attendue du transport balistique :

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{\delta(R - vt)}{4\pi R^2}. \quad (4.53)$$

4.2 Développement perturbatif de la fonction Green moyenne

4.2.1 Développement de la fonction de Green : représentation diagrammatique

La fonction de Green retardée du hamiltonien perturbé s'exprime comme⁴ $G^R(E) = [E - H_0 - V + i\eta]^{-1}$. Elle peut donc se développer autour de la fonction de Green non perturbée $G_0^R(E) = [E - H_0 + i\eta]^{-1}$:

$$G^R = [(G_0^R)^{-1} - V]^{-1} \quad (4.54)$$

$$= [(G_0^R)^{-1}(I - G_0^R V)]^{-1} \quad (4.55)$$

$$= G_0^R + G_0^R V G_0^R + G_0^R V G_0^R + G_0^R V G_0^R G_0^R V G_0^R + \dots \quad (4.56)$$

Une représentation commode de ce genre de développement est de faire correspondre à chaque élément de base de ce développement un graphe. Les différents termes du développement sont alors donnés pas des graphes de plus en plus complexes.

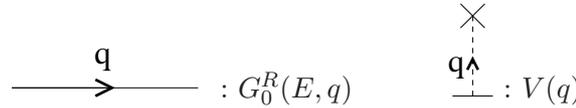


FIG. 4.2: Représentation des 2 graphes élémentaires du développement perturbatif de G^R .

Dans notre cas simple, les deux éléments de base sont représentés dans la figure 4.2 (on utilise le fait que G_0^R est diagonal en représentation \mathbf{q} : $G_0^R(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}(E - \epsilon_{\mathbf{q}} + i\eta)^{-1}$ avec $\epsilon_{\mathbf{q}} = \hbar^2 q^2 / 2m$).

A l'aide du dictionnaire de la figure 4.2, le développement (4.56) ci-dessus se représente sous la forme de la figure 4.3.

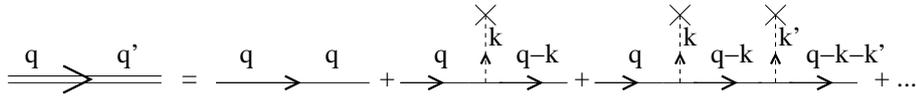


FIG. 4.3: Représentation diagrammatique du développement (4.56) de la fonction de Green G^R .

4.2.2 Fonction de Green moyennée et énergie propre

Afin d'exprimer le développement perturbatif de $\langle G^R \rangle_V$ (moyennée sur le désordre), nous devons moyenner à l'aide de la loi de distribution (4.3) le développement (4.56) de G^R . Pour cela, nous pouvons utiliser de théorème de Wick qui exprime les moments

⁴Les arguments de $G(E)$ non explicités peuvent être au choix les positions ou les moments. Dans la suite du paragraphe, des produits matriciels dans la représentation choisie s'entendent pour tous les produits de G .

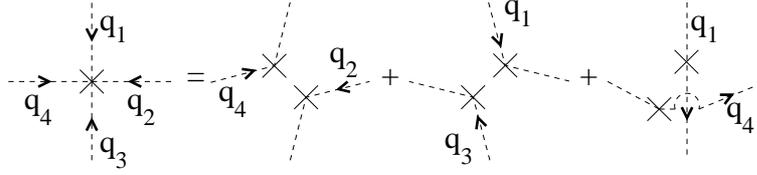
FIG. 4.4: Représentation diagrammatique du théorème de Wick pour la moyenne sur V .

FIG. 4.5: Représentation diagrammatique du corrélateur du désordre.

d'ordre $2n$ d'une distribution *gaussienne* en termes des moments d'ordre 2 ($\langle \exp(i\lambda V) \rangle = \exp -\frac{\lambda^2}{2} \langle V^2 \rangle$) : par exemple

$$\langle V_{\mathbf{q}_1} V_{\mathbf{q}_2} V_{\mathbf{q}_3} V_{\mathbf{q}_4} \rangle_V = \langle V_{\mathbf{q}_1} V_{\mathbf{q}_2} \rangle_V \langle V_{\mathbf{q}_3} V_{\mathbf{q}_4} \rangle_V + \langle V_{\mathbf{q}_1} V_{\mathbf{q}_3} \rangle_V \langle V_{\mathbf{q}_2} V_{\mathbf{q}_4} \rangle_V + \langle V_{\mathbf{q}_1} V_{\mathbf{q}_4} \rangle_V \langle V_{\mathbf{q}_2} V_{\mathbf{q}_3} \rangle_V \quad (4.57)$$

Cette propriété peut se représenter sous forme de diagramme comme le montre la figure (4.4) : elle se traduit par la règle suivante. La moyenne sur le désordre revient à appairer de toutes les façons possibles les insertions de V . Les diagrammes conservant des lignes d'insertion non appariés correspondent à un terme de moyenne nulle. Le diagramme obtenu par l'appariement de deux insertions correspond à $\langle V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \rangle$. Dans notre cas, il prend la valeur $\delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}',0} \gamma / L^2$.

L'application de ces règles sur les premiers termes du développement (4.56) est représentée diagrammatiquement sur la figure 4.6. L'intérêt d'une représentation diagrammatique apparaît dans le classement des différents termes. Seuls les termes d'ordre pair en V contribuent. Le développement à l'ordre γ^3 est représenté. On voit ici apparaître deux types de diagrammes : les diagrammes réductibles sont les diagrammes tels que (II-1), (III-1), (III-2), qui comportent deux parties reliés par un G_0 interne (lien simple sur la figure 4.6). Par définition, ces diagrammes peuvent être construits à partir des diagrammes irréductibles. Par exemple, le diagramme (II-1) de la figure 4.6 est obtenu par contraction de deux (I-1), (III-2) par contraction des diagrammes irréductibles (I-1) et (II-2), etc. Il est donc naturel d'organiser le développement perturbatif à partir des diagrammes irréductibles⁵ (les "briques élémentaires"). Ces diagrammes sont signalés par une étoile sur la figure 4.6.

La contribution de l'ensemble des diagrammes irréductibles à G^R est notée $G_0^R \Sigma G_0^R$ (les deux fonctions de Green G_0^R correspondent aux branches externes des diagrammes, qui sont communes à tous les diagrammes : voire la figure 4.6). Σ sera appelée énergie propre (self-energy en anglais). Il est aisé de réaliser que l'ensemble des contributions (diagrammes) du développement de $\langle G^R \rangle$ s'obtiennent par "contraction" de n diagrammes irréductibles,

⁵De plus, cette organisation permet de faire apparaître le bon paramètre perturbatif qui contrôle le développement.

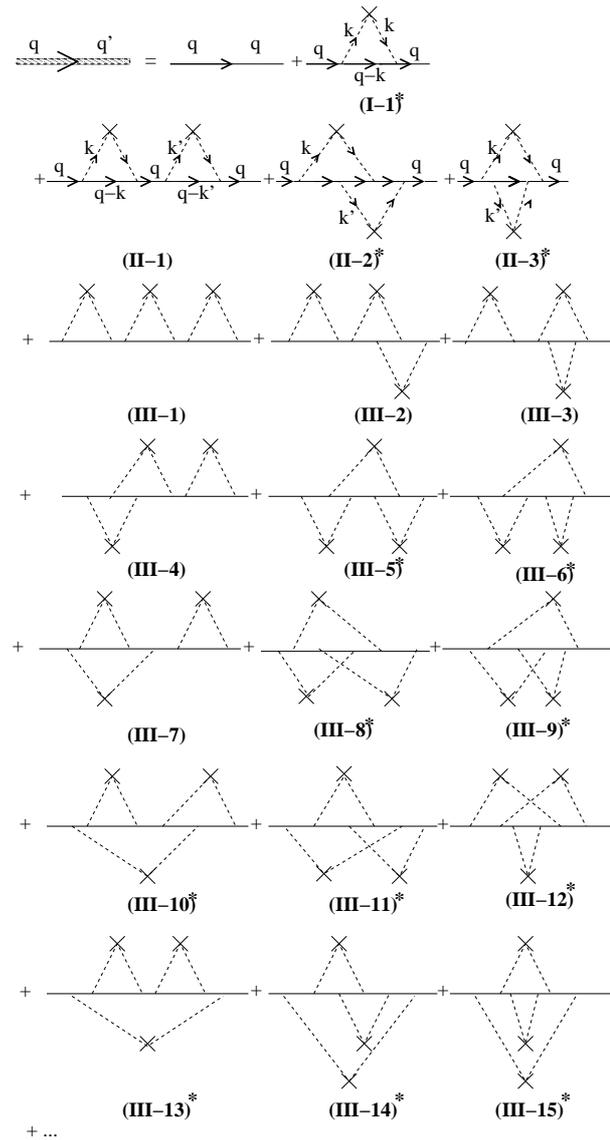


FIG. 4.6: Développement à l'ordre γ^3 de $\langle G^R \rangle$.

qui apparaissent comme des termes de Σ . Ainsi nous obtenons

$$\langle G^R \rangle = G_0^R + G_0^R \sum_{n=1}^{\infty} (\Sigma \Gamma_0^R)^n = G_0^R (I - \Sigma G_0^R)^{-1} \quad (4.58)$$

En inversant cette équation, nous obtenons l'équation de Dyson suivante

$$\langle G^R \rangle^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma \quad (4.59)$$

Remarques

1. Cette technique de l'énergie propre est très générale. Elle permet en effet de traiter de façon approchée de nombreuses perturbations telles que le couplage à un environnement extérieur (phonons, etc), les interactions entre électrons, voire même exactement les conditions aux bords imposées aux états d'un fil par des contacts électriques (couplage à des réservoirs).
2. en général, Σ est non réelle. Sa partie réelle correspond à un décalage des énergies, et sa partie imaginaire à un temps de vie pour les particules. Par exemple, si la contribution due au désordre s'écrit $\Sigma(\mathbf{k}) = \sigma(\mathbf{k}) + i\eta_{el}(\mathbf{k})$, nous obtenons pour la fonction de Green perturbée

$$\langle G^R \rangle^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t) = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} e^{i(\epsilon_{\mathbf{q}} + \sigma_{\mathbf{q}})t} e^{-(\eta_{ph} + \eta_{el})\frac{t}{\hbar}}$$

Ce qui nous montre le résultat attendu : les inverses des temps de vie s'ajoutent. Dans notre cas, $\eta_{\phi} \ll \eta_{el}$: le temps de vie des états des "particules" est celui donnée par la diffusion élastique sur les impuretés.

Nous allons maintenant calculer la première contribution à Σ , ce qui sera suffisant pour la discussion qui va suivre. Cette contribution $\Sigma^{(1)}$ est donnée par le diagramme (I-1) de la figure 4.6, qui s'exprime comme

$$\Sigma^{(1)}(E, \mathbf{k}) = \gamma \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} G_0^R(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = \gamma \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} G_0^R(\mathbf{q}). \quad (4.60)$$

Les états propres des particules libres pouvant être indexés par leur moments, la mesure sur \mathbf{q} peut alors s'exprimer à l'aide de la mesure sur l'énergie $\epsilon_q = \hbar^2 q^2 / 2m$:

$$\frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \rho(\epsilon) d\epsilon, \quad (4.61)$$

où $\rho(\epsilon)$ correspond à la densité d'états d'énergie ϵ (dégénérescence) :

$$\rho(\epsilon) = \begin{cases} \frac{mq}{2\pi^2 \hbar^2} & \text{en 3D, avec } \epsilon = \hbar^2 q^2 / 2m \\ \frac{m}{2\pi \hbar^2} & \text{en 2D} \\ \frac{m}{\hbar^2 q} & \text{en 1D} \end{cases}. \quad (4.62)$$

En utilisant l'égalité

$$\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) - i\pi \delta(x) \quad (4.63)$$

dans l'équation (4.60), nous obtenons⁶

$$\text{Im} \Sigma^{(1)} = \eta_{el} = \gamma \pi \int d\epsilon \rho(\epsilon) \delta(E - \epsilon) = \gamma \pi N_e \quad (4.64)$$

où N_e est le nombre de particule du gaz de Fermi. Ce résultat correspond à celui obtenu classiquement par la théorie de Drude

$$\frac{\hbar}{2\tau_{el}} = \pi \gamma N_e \quad (4.65)$$

⁶Nous ne nous intéressons dans la suite qu'à la partie imaginaire de $\Sigma^{(1)}$. La partie réelle, qui est formellement infinie, peut être absorbée dans une redéfinition globale des énergies.

Notons finalement que cette partie imaginaire à la self-énergie correspond à la modification suivante de la fonction de Green dans l'espace réel

$$k_e^2 = k^2 \pm i \frac{m}{\tau_e} \Rightarrow k_e \simeq k \left(1 \pm \frac{i}{2kl_e} \right) \quad (4.66)$$

$$\Rightarrow \overline{G^{R/A}}(R, E) = G_0^{R/A}(R, E) e^{(\pm i)(\pm iR/(2l_e))} = G_0^{R/A}(R, E) e^{-R/(2l_e)}, \quad (4.67)$$

ce qui correspond bien à une disparition des ces états propres sur une distance correspondant au libre parcours moyen.

4.3 Développement perturbatif de la conductibilité

Nous allons nous intéresser ici à la conductibilité locale ($q = 0$) moyenne. Pour cela il nous faut donc considérer la moyenne sur le désordre du produit de fonction de Green $\langle G^R G^A \rangle_V$. Le type de diagramme correspondant est représenté sur la figure 4.7.

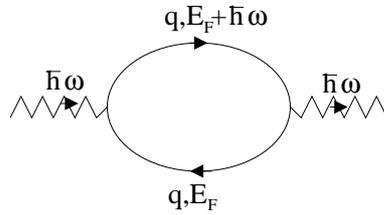


FIG. 4.7: Diagramme intervenant dans la conductibilité.

Pour cela, comme précédemment, nous devons appairer les insertions de V , et ne garder que les combinaisons dans lesquelles toutes les insertions de V sont appariées. Cela nous pousse à considérer trois types de diagrammes (voir Figure 4.8) : les diagrammes pour lesquels les moyennes sur le désordre sont faites indépendamment sur les deux branches (diagrammes (b,c,d)), les diagrammes en échelle (diagramme (a,e)), et les diagrammes maximalelement croisés (diag. (f)). Nous allons voir que les deux premiers types de diagrammes permettent de retrouver les résultats de la théorie de Drude, alors que les derniers types décrivent les premiers effets des interférences quantiques (première correction de localisation faible).

4.3.1 Conductivité de Drude

Ces diagrammes ne décrivent pas des effets d'interférence entre les propagateurs de particule et de trou : ils correspondent à l'approximation

$$\langle G^R G^A \rangle_V \rightarrow \langle G^R \rangle_V \langle G^A \rangle_V$$

Nous pouvons utiliser l'expression des propagateurs moyennés dans l'approximation de Born précédemment décrite : $\langle G^{R/A}(\mathbf{q}, E) \rangle_V = (E - \epsilon_q + i\eta_{el})^{-1}$. La contribution des

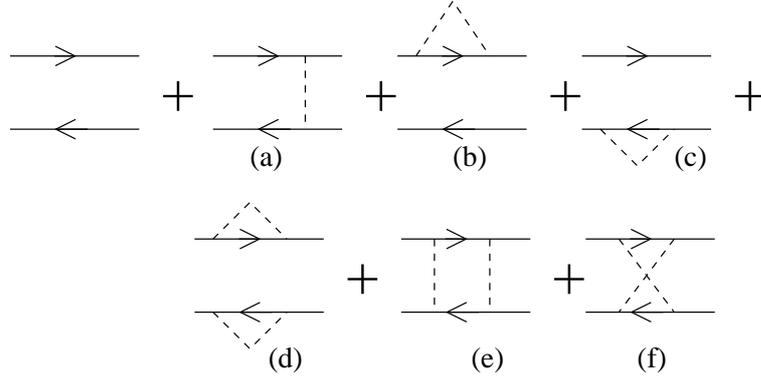


FIG. 4.8: Développement de la conductivité au second ordre en γ (densité d'impuretés).

diagrammes sans interférence peut donc s'écrire

$$\int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} k_i k_j \langle G^R(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, E_F + \hbar\omega) \rangle \langle G^A(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, E_F) \rangle_V \quad (4.68)$$

$$= \int \rho(\epsilon) d\epsilon \int \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} k_i k_j \frac{1}{E + \hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} + i\eta_{el}} \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - i\eta_{el}} \quad (4.69)$$

Remarques (apparté)

1. Densité d'états. Pour un gaz de Fermi, $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / (2m)$, ce qui correspond à une mesure $d\epsilon = (\hbar^2 k / m) dk$. L'angle solide total Ω_{tot} vaut 4π en 3D, π en 2D et 2 en 1D. En rassemblant ces résultats, nous trouvons

$$\frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \frac{k^2 dk}{2\pi^2} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \left(\frac{km}{2\pi^2 \hbar^2} \right) d\epsilon \quad (3D) \quad (4.70)$$

$$\frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \frac{k dk}{2\pi} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right) d\epsilon \quad (2D) \quad (4.71)$$

$$\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \frac{dk}{\pi} = \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \left(\frac{m}{\pi \hbar^2 k} \right) d\epsilon \quad (1D) \quad (4.72)$$

ce qui correspond à

$$\rho(\epsilon) = \frac{m^{\frac{3}{2}} (2\epsilon)^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (3D) \quad (4.73)$$

$$= \frac{m}{2\pi \hbar^2} \quad (2D) \quad (4.74)$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar (2m\epsilon)^{\frac{1}{2}}} \quad (1D) \quad (4.75)$$

D'après ces résultats, le nombre total $N_e = \int_0^{E_F} \rho(\epsilon) d\epsilon$ de fermions vaut à

température nulle

$$N_e = \frac{\rho(E_F)}{\sqrt{E_F}} \int_0^{E_F} \epsilon^{\frac{1}{2}} d\epsilon = \frac{2}{3} \rho(E_F) E_F \quad (3D) \quad (4.76)$$

$$= \rho(E_F) E_F \quad (2D) \quad (4.77)$$

$$= \rho(E_F) \sqrt{E_F} \int_0^{E_F} \epsilon^{-\frac{1}{2}} d\epsilon = 2\rho(E_F) E_F \quad (1D) \quad (4.78)$$

Nous en tirons la formule générale $N_e = \frac{2}{d} \rho(E_F) E_F$.

2. Cette expression rend plus explicite la formule de Drude. Bien que celle-ci fasse intervenir naïvement le nombre total d'électrons N_e , elle n'exprime en fait que le coefficient de transport électrique des électrons à la surface de Fermi. En effet, l'expression $N_e e^2 \tau / m$ se reexprime sous la forme $\rho(E_F) D e^2$ ou le coefficient de diffusion D s'exprime selon la relation d'Einstein $D = v_F^2 \tau / d$.

Nous pouvons maintenant reprendre la formule ci-dessus pour la conductivité. Commençons par la conductivité à fréquence nulle ($\omega = 0$). Dans ce cas, en utilisant la relation

$$\frac{\eta}{(E - \epsilon)^2 + \eta^2} \simeq \pi \delta(E - \epsilon) \quad (4.79)$$

nous obtenons l'expression $(\hbar / (2\tau_{el})) = \eta_{el}$

$$\sigma^{dc}(\omega = 0) = \frac{1}{d} \frac{e^2 \hbar \pi}{\pi m \eta} \rho(E_F) E_F = \frac{2}{d} \frac{e^2}{m} \rho(E_F) E_F \tau_{el} \quad (4.80)$$

Ce résultat prend donc la forme connue

$$\sigma^{dc}(\omega = 0) = \frac{2}{d} \frac{d}{2} N_e \frac{e^2 \tau_{el}}{m} = \frac{N_e e^2 \tau}{m} \quad (4.81)$$

Le calcul précédent nous enseigne que l'intégrale (4.69) est dominée par les énergies ϵ d'ordre E_F . Il en sera de même à fréquence ω faible. Nous utilisons cette propriété pour prolonger le domaine d'intégration des énergies ϵ jusqu'à $-\infty, +\infty$ et le fermer dans le demi-plan supérieur. Le théorème des résidus nous donne alors l'expression finale

$$\rho(E_F) E_F \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{1}{\epsilon - (E_F + \hbar\omega + i\eta)} \frac{1}{\epsilon - (E_F - i\eta)} \quad (4.82)$$

$$= E_F \rho(E_F) \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{1}{\hbar\omega + 2i\eta} \left(\frac{1}{\epsilon - (E_F + \hbar\omega + i\eta)} - \frac{1}{\epsilon - (E_F - i\eta)} \right) \quad (4.83)$$

$$= E_F \rho(E_F) 2i\pi \frac{1}{\hbar\omega + i\frac{2\hbar}{2\tau_{el}}} = E_F \rho(E_F) \frac{2\pi\tau_{el}}{\hbar} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \quad (4.84)$$

D'où l'expression habituelle de la conductivité de Drude à fréquence finie

$$\sigma_{ij}^{dc}(\omega) = \delta_{ij} \frac{D e^2 \rho(E_F)}{1 - i\omega\tau_{el}}. \quad (4.85)$$

Cette expression, et plus précisément celle de la conductivité locale $\sigma_{ij}^{dc}(q, \omega)$ fait apparaître un pôle de diffusion, relié au caractère dissipatif du transport de la charge dans l'approximation de Drude.

4.3.2 Corrections quantiques : image semi-classique

Dans une approche semi-classique, la probabilité pour un électron de passer d'un état (position) A à un état B donné par⁷

$$P_{A \rightarrow A} = \left| \sum_{\text{chemin}, i} A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^* \quad (4.86)$$

où la somme se fait sur les chemins géométriques dans l'espace des phases allant de A à B . Le premier terme correspond à la probabilité classique, le second aux corrections dues aux interférences quantiques. Pour des particules libres, la phase accumulée entre A et B le long d'un chemin i est donnée par (voir l'expression (4.33))

$$\phi_i = k_F \times \text{longueur du chemin } i = 2\pi \frac{\mathcal{L}_i}{\lambda_F}.$$

La longueur de Fermi λ_F étant très petite dans un bon métal, et en particulier bien plus petite que la distance moyenne entre défauts diffuseurs, le rapport \mathcal{L}_i/λ_F va fluctuer énormément entre deux chemins différents, mêmes très proches l'un de l'autre, et la phase correspondante va fluctuer entre 0 et 2π . Le terme d'interférence dans l'équation (4.86) ne contribuera pas.

Cependant, si deux chemins 1 et 2 sont absolument identiques, ce terme d'interférence peut contribuer, les deux phases étant maintenant exactement identiques. Nous allons voir qu'il s'agit des contributions dites du *diffuson*. Une deuxième contribution est possible si les deux chemins ont en commun une boucle identique. Cette boucle peut être maintenant parcourue soit dans le même sens pour le chemin 1 et 2, soit parcourue en sens opposé pour les deux chemins. Une interférence constructive apparaît en O : les deux phases accumulées dans un sens et dans l'autre (si la symétrie par renversement du temps présente) sont exactement opposées : $A_2^* = A_1$. Ainsi, en ne prenant en compte que ces deux chemins, la probabilité de présence en O comportera un terme

$$|A_1 + A_2|^2 = 2|A_1|^2 + 2|A_2|^2 = 4|A_1|^2$$

soit deux fois plus que la probabilité classique. Ce phénomène s'appelle la rétrodiffusion stimulé par le désordre. En particulier, elle implique une diminution de la probabilité d'être diffusé loin de l'une impureté (O), signe précurseur de la localisation. Les contributions correspondantes sont appelées *cooperon*.

Une représentation dans l'espace réel et diagrammatique de ces deux types de contribution est donnée dans la figure 4.9.

4.3.3 Corrections de vertex : le Diffuson

Diagrammes du type (e) dans la figure 4.8. Ces diagrammes peuvent tous se déduire de corrections de vertex de la forme (les moments restent égaux sur les deux branches) :

⁷Cette approche n'a aucune prétention de rigueur à cette étape.

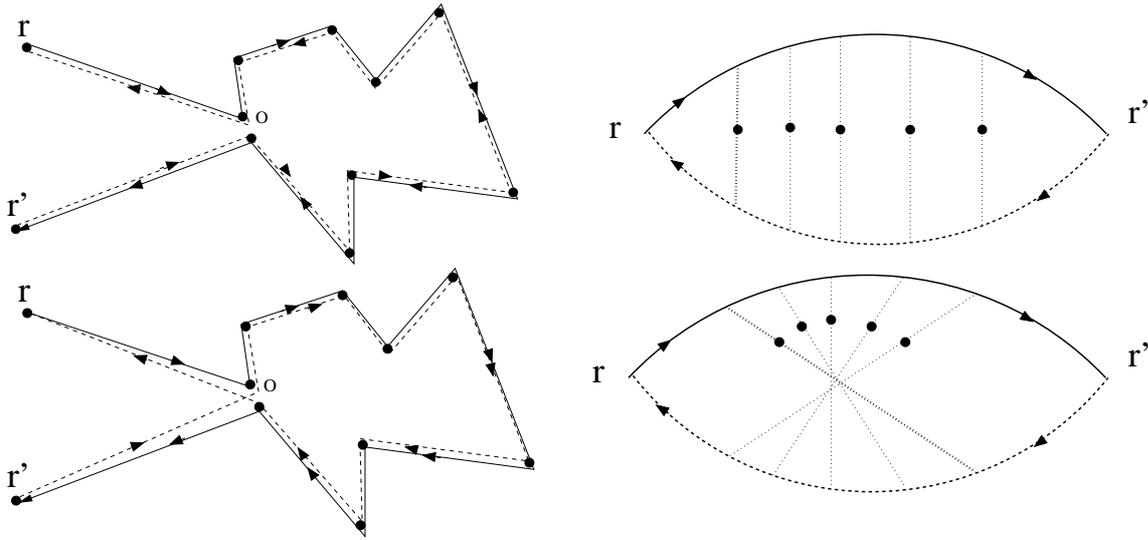
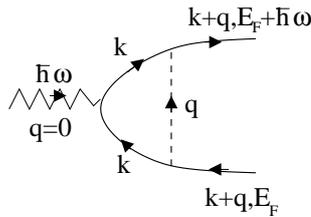


FIG. 4.9: Représentation de deux chemins de diffusion du trou et de l'électron (à gauche). Ces deux chemins comportent une boucle qui est parcourue soit dans le même sens (en haut) soit en sens opposé (bas) par l'électron et le trou.



Les corrections de vertex correspondantes peuvent s'écrire

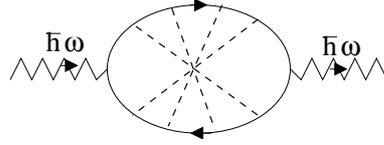
$$\gamma \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} G^R(E_F + \hbar\omega, \mathbf{k} + \mathbf{q}) G^A(E_F, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (4.87)$$

Cette correction ne dépend que de la somme des moments des deux propagateurs. Elle s'annule donc par intégration angulaire sur q . Ceci nous montre que la contribution du diffuson à la conductivité est nulle.

Remarque si la diffusion sur les impuretés n'est pas isotrope, ces diagrammes (corrections de vertex) sont non nuls, et contribuent à corriger τ_{el} dans la formule de Drude (temps de relaxation du moment k à la place du temps entre deux collisions). Exemple : $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = U^2 P(\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})$. Au lieu de $\tau^{-1} = \frac{2\pi N U^2}{\hbar}$, on obtient sans interférence $\tau^{-1} = \frac{N U^2}{\hbar} \int_0^{2\pi} d\theta P(\theta) d\theta$. Chaque diagramme d'échelle à n branches internes contribue un terme $\propto \tau \langle \cos \theta \rangle^n$. La sommation sur n donne le terme correct de Drude $\tau_{el} = \tau / (1 - \langle \cos \theta \rangle)$.

4.3.4 Diagrammes maximalelement croisés : le Cooperon

Nous considérons maintenant les diagrammes maximalelement croisés du type



Comme dans le calcul des corrections du propagateur, nous séparons les contributions des extrémités du reste Γ :

$$\langle G^R(E_F + \hbar\omega, \mathbf{k}) G^A(E_F, \mathbf{k}) \rangle = \langle G^R(E_F + \hbar\omega, \mathbf{k}) \rangle \langle G^A(E_F, \mathbf{k}) \rangle + \langle G^R \rangle \langle G^A \rangle \Gamma \langle G^R \rangle \langle G^A \rangle_V$$

N.B. : cf corrélation de densité.

Le Cooperon

Géométriquement : on renverse une des branches (G^A propagation de trou), si l'on a symétrie par renversement du temps, on trouve un propagateur analogue à celui d'une paire de particule, d'où le nom de Cooperon. Ces modes de fluctuations de densité diffusent.

Resommation

Il est possible de montrer que tous ces diagrammes maximalelement croisés sont tous du même ordre (cf Langer et Neal). Nous devons donc resommer la série entière de ces diagrammes. Pour cela, nous utilisons une équation de "récurrence", graphiquement représenté sur la figure 4.10. L'équation correspondante s'écrit

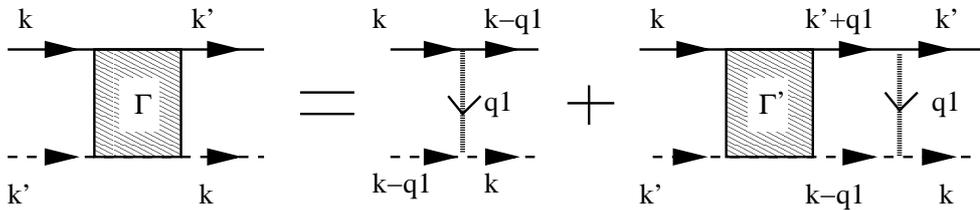


FIG. 4.10:

$$\Gamma'_\omega(\vec{k}, \vec{k}') = \gamma + \frac{\gamma}{V} \sum_{\vec{q}_1} \Gamma'_\omega(\vec{k}, \vec{k}' + \vec{q}_1, \vec{k}', \vec{k} - \vec{q}_1) \overline{G}^R(\vec{k}' + \vec{q}_1) \overline{G}^A(\vec{k} - \vec{q}_1). \quad (4.88)$$

Cette expression nous montre que $\Gamma'_\omega(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend que de $\vec{Q} = \vec{k} + \vec{k}'$. Nous pouvons utiliser cette information pour inverser la relation de récurrence précédente et obtenir

$$\Gamma'_\omega(\vec{Q}) = \frac{\gamma}{1 - \frac{\gamma}{V} \sum_{\vec{q}_1} \overline{G}^R(\vec{Q} + \vec{q}_1) \overline{G}^A(-\vec{q}_1)} \quad (4.89)$$

Considérons maintenant la limite diffusive correspondant à $R \gg l_e, Ql_e \ll 1$. Dans cette

limite, le dénominateur précédent se simplifie selon ($\epsilon_{\vec{k}-\vec{Q}} \simeq \epsilon_{\vec{k}} - \vec{v} \cdot \vec{Q}$) :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \overline{G}^R(\vec{Q} + \vec{q}) \overline{G}^A(-\vec{q}) \\ &= \int d\epsilon_{\vec{k}} d\Omega \rho(\epsilon_{\vec{k}}) \frac{1}{E - \epsilon_{\vec{k}} + \frac{i}{2\tau_e}} \frac{1}{E - \hbar\omega - \epsilon_{\vec{k}-\vec{Q}} - \frac{i}{2\tau_e}} \end{aligned} \quad (4.90)$$

$$\simeq \int d\epsilon_{\vec{k}} d\Omega \rho(\epsilon_{\vec{k}}) \frac{1}{\frac{i}{\tau_e} + \hbar\omega - \vec{v} \cdot \vec{Q}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - E + \frac{i}{2\tau_e}} - \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \dots} \right) \quad (4.91)$$

$$\simeq 2\pi\rho(E_F) \int \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \frac{\tau_e}{1 - i\omega\tau_e + i\vec{v} \cdot \vec{Q}} \quad (4.92)$$

$$\simeq 2\pi\rho(E_F) \int \frac{d\Omega}{\Omega_{tot}} \left(1 + i\omega\tau_e - i\vec{v} \cdot \vec{Q}\tau_e - \tau_e^2(\vec{v} \cdot \vec{Q})^2 + \dots \right) \quad (4.93)$$

$$= 2\pi\tau_e\rho(E_F) \left(1 + i\omega\tau_e - \frac{v_F^2\tau_e^2}{d} Q^2\tau_e \right). \quad (4.94)$$

En utilisant l'expression du coefficient de diffusion $D = v_F l_e / d$, ainsi que la relation $\tau_e = 1/(2\pi\rho(E_F))$ dérivée précédemment, nous obtenons l'expression du facteur de structure du Cooperon dans la limite diffusive :

$$\Gamma'(\vec{Q}, \omega) = \frac{\gamma}{\tau_e(-i\omega + DQ^2)}. \quad (4.95)$$

La correction de conductivité correspondante s'en déduit :

$$\begin{aligned} \sigma_{Cooperon}(\omega) &= \frac{\hbar e^2 E_F}{\pi m d} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{d^d \mathbf{k}'}{(2\pi)^d} k_x k'_x \\ & \left[\overline{G}^R(E_F + \hbar\omega, \mathbf{k}) G^A(E_F, \mathbf{k}) \right] \left[\overline{G}^R(E_F + \hbar\omega, \mathbf{k}') G^A(E_F, \mathbf{k}') \right] \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{1}{-i\omega + DQ^2}. \end{aligned} \quad (4.96)$$

Le facteur de structure Γ' étant dominé par les termes $\vec{Q} \simeq 0 \Leftrightarrow \vec{k} \simeq -\vec{k}'$ (ce qui correspond à l'augmentation de la rétrodiffusion), nous pouvons réécrire cette correction sous la forme

$$\sigma_{Cooperon}(\omega) = -\frac{\hbar e^2 E_F}{\pi m d} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} k_x^2 \left[\overline{G}^R(E_F + \hbar\omega, \mathbf{k}) G^A(E_F, \mathbf{k}) \right]^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{1}{-i\omega + DQ^2} \quad (4.97)$$

$$= -\frac{e^2 D}{\pi \hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{1}{-i\omega + DQ^2} \quad (4.98)$$

Lien avec la diffusion

$1/(-i\omega + DQ^2)$ est la fonction de Green de l'équation de diffusion $\partial_t P = D\nabla^2 P$. De plus, nous avons $\sum_{\mathbf{Q}} P(\mathbf{Q}, \omega) = P(0, \omega)$: la correction de localisation faible de la conductance (4.98) est proportionnelle à la probabilité de retour d'un processus diffusif. Nous venons de montrer que ces corrections pouvaient s'interpréter en terme de diffusion de processus cohérents : le cooperon. Une fois ce lien établi, nous pouvons utiliser toute notre connaissance de la diffusion classique. En particulier, la solution de cette équation satisfait

$$P(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \quad (4.99)$$

En reportant dans l'expression ci-dessus pour la correction de conductivité en courant continu, nous trouvons

$$\Delta\sigma(\omega = 0) = -\frac{e^2 D}{\pi\hbar} \int_{t_{min}}^{t_{max}} \frac{dt}{(4\pi Dt)^{d/2}} \quad (4.100)$$

En général, $t_{min} = \tau_{el}$, et le maximum est donné par le temps de cohérence de phase $t_{max} = \tau_\phi$. En utilisant $x^2 = Dt$, nous obtenons

$$\Delta\sigma = -\frac{e^2}{\pi^{3/2}\hbar} (L_\phi - l_{el}) \quad (1D) \quad (4.101)$$

$$= -\frac{e^2}{\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \ln\left(\frac{L_\phi}{l_{el}}\right) \quad (2D) \quad (4.102)$$

$$= +\frac{e^2}{\pi\hbar} \frac{2}{(4\pi)^{3/2}} (L_\phi^{-1} - l_{el}^{-1}) \quad (3D). \quad (4.103)$$

En utilisant le comportement algébrique de la longueur de cohérence de phase en fonction de la température $L_\phi \simeq T^{-p}$, nous obtenons le comportement logarithmique en température de la conductivité en dimension 2.

Interprétation quasi-classique

Nous venons de trouver que $\Delta\sigma$ est proportionnel à $\int_{t_{min}}^{t_{max}} dt P(0, t)$ soit la probabilité qu'une marche aléatoire revienne à l'origine en un temps compris entre t_{min} et t_{max} .

En, chaque chemin est associé à un volume *cohérent* de dimension transverse λ_F^{d-1} . Le volume dans la direction de propagation pendant une durée t est quant à lui $v_F t$. La correction de conductivité relative est ainsi donnée par

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \simeq - \int_{\tau_{el}}^{\tau_\phi} P(0, t) dt v_F \lambda_\phi^{d-1} \quad (4.104)$$

$$\Rightarrow \Delta\sigma \simeq \frac{De^2}{\hbar} \int_{\tau_{el}}^{\tau_\phi} P(0, t) dt \quad (4.105)$$

Où nous avons utilisé que $\sigma = \rho(E_F) De^2$, $v_F = \frac{\hbar}{m} k_F$, $\lambda_F = (2\pi/k_F)^{d-1}$.

Effet d'un champ magnétique : déphase les chemins les uns par rapport aux autres, et détruit donc ces effets de localisation faible.

4.4 Corrections quantiques à la probabilité de transmission

Revenons un instant sur la probabilité de transmission (diffusion) d'un électron $P(\vec{r}, \vec{r}', t)$. Son expression diffère principalement de celle de la conductivité σ par l'absence de terme angulaire $k_x k'_x$. Ainsi l'argument qui permettait d'annuler la contribution du diffuson à σ ne s'applique plus ici : la probabilité $P(\vec{r}, \vec{r}', t)$ est corrigée à la fois par les contribution de diffuson et de cooperon, qui s'écrivent

$$P_{Diffuson}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{2\pi\rho(E_F)} \int_{r_1, r_2} \bar{G}^R(\vec{r}, \vec{r}_1) \bar{G}^A(\vec{r}, \vec{r}_1) \Gamma_\omega(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \bar{G}^R(\vec{r}_2, \vec{r}') \bar{G}^A(\vec{r}_2, \vec{r}') \quad (4.106)$$

$$P_{Cooperon}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{2\pi\rho(E_F)} \int_{r_1, r_2} \bar{G}^R(\vec{r}, \vec{r}_1) \bar{G}^A(\vec{r}, \vec{r}_2) \Gamma_\omega(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \bar{G}^R(\vec{r}_2, \vec{r}') \bar{G}^A(\vec{r}_1, \vec{r}') \quad (4.107)$$

Le facteur de structure du diffuson se déduit de la structure récursive analogue à celle employée dans le cas du Cooperon, et représenté sur la figure 4.11. L'équation correspon-

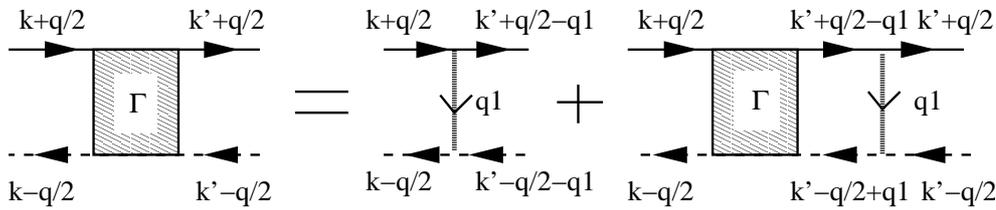


FIG. 4.11:

dante est

$$\Gamma_\omega(\vec{k}, \vec{k}') = \gamma + \frac{\gamma}{V} \sum_{\vec{q}_1} \Gamma_\omega(\vec{k}, \vec{k}' + \vec{q}_1) \bar{G}^R(\vec{k}' + \vec{q}_1) \bar{G}^A(\vec{k}' + \vec{q}_1). \quad (4.108)$$

Cette expression nous montre que $\Gamma_\omega(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend que de $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$. Les expressions de $\Gamma(\vec{q})$ et $\Gamma'(\vec{Q})$ apparaissent alors identiques. Nous pouvons alors montrer que la correction $P_{Diffuson}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ à la valeur de "Drude" de P permet de retrouver une solution de diffusion classique pour l'électron. Il s'agit donc de contributions classiques.

Par contre, la contribution du cooperon est de nature différente (intrinsèquement liée au régime cohérent de phase). Des expressions ci-dessus, nous montrons aisément que

$$P_{Diffuson}(\vec{r}, \vec{r}, t) = P_{Cooperon}(\vec{r}, \vec{r}, t). \quad (4.109)$$

Ceci implique que $P_{Cooperon}$ double la probabilité de l'électron de revenir à son point de départ au bout d'un temps quelconque. Il s'agit bien d'une correction de *localisation*. De plus, en utilisant les expressions explicites des fonctions de Green, nous obtenons que

$$P_{Cooperon}(\vec{r}, \vec{r}', t) = P_{Diffuson}(\vec{r}, \vec{r}', t) \frac{\sin^2(k_F R)}{(k_F R)^2} e^{-\frac{R}{l_e}}. \quad (4.110)$$

Ce dernier résultat nous montre que cette correction quantique disparaît très rapidement : au bout d'une distance l_e . Ce résultat est représenté schématiquement sur la figure 4.12

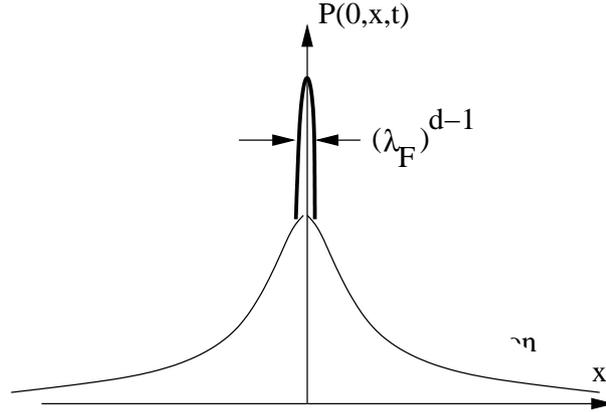


FIG. 4.12: Représentation schématique de la correction de cooperon à la probabilité de diffusion électronique.

4.5 Résultats expérimentaux dans le régime de localisation faible.

4.5.1 Effet d'un champ magnétique sur les corrections de localisation faible

Un très faible champ magnétique (tels que les effets orbitaux puissent être négligés) va déphaser les électrons et les trous les uns par rapport aux autres. Ce déphasage sera donné par

$$\overline{G}^{R/A}(\vec{r}, \vec{r}', B) = \overline{G}^{R/A}(\vec{r}, \vec{r}', B = 0) e^{\mp i e / \hbar \int_{\vec{r}}^{\vec{r}'} \vec{A} \cdot d\vec{l}}. \quad (4.111)$$

Le diffusion ne sera donc pas affecté par ce déphasage, par contre les contributions du cooperon seront détruites. Les contributions de Cooperon seront détruites dès que le flux à l'intérieur des chemins de diffusion est d'ordre le quantum de flux. Ceci fait intervenir une nouvelle longueur R_B et un temps τ_b tels que $R_B^2 = 4D\tau_b$ et $\phi_0 = h/2e = 4\pi DtB$, soit

$$\tau_B = \frac{\phi_0}{4\pi DB}. \quad (4.112)$$

Si $\tau_B \gg \tau_e$, les corrections induites par le champ magnétique seront faible. Par contre lorsque $\tau_B \simeq \tau_e$ (lorsqu'on augmente B), les corrections de cooperon sont tuées. Or ces corrections étaient négatives! Nous avons donc, fait plutôt rare, une magnétorésistance négative dans le régime mésoscopique.

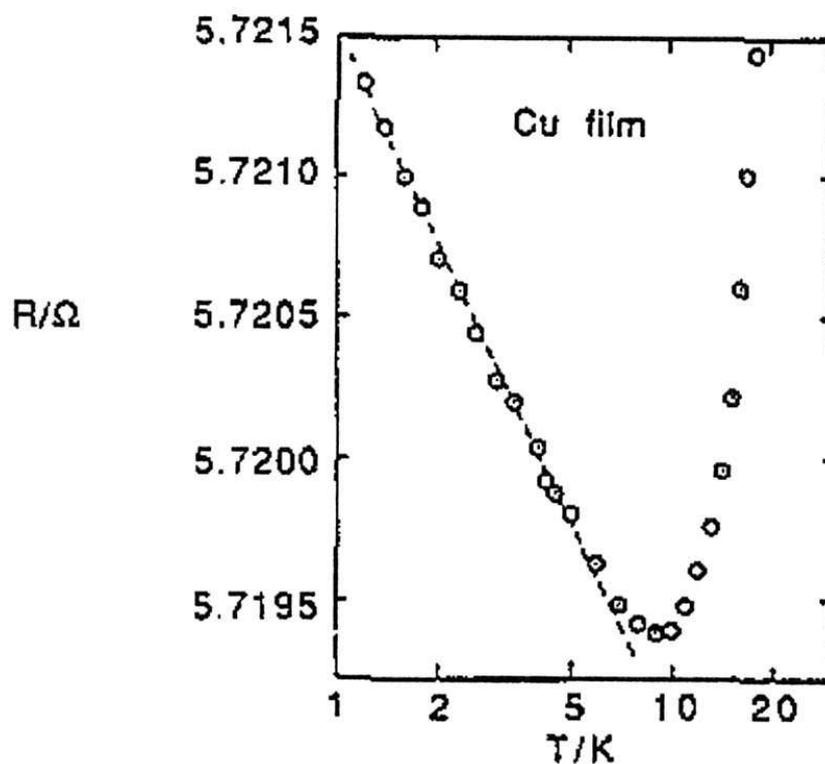


FIG. 4.13: Courbe expérimentale de la résistance d'un fil mince de cuivre. La dépendance logarithmique à basse température est bien visible. D'après van den Dries *et al.*, Phys. Rev. Lett., 46 (81), p.565

4.5.2 Fluctuations universelles de conductances dans les films mésoscopiques : données expérimentales

Universalité des fluctuations

Etude de la conductivité de fils de quelques μm (GaAs avec concentration de Si de $10^{18} cm^{-3}$, en fonction du champ magnétique B . De larges fluctuations reproductibles apparaissent. Lorsque l'échantillon est recuit (réorganisation des atomes de Si), ces fluctuations sont modifiées. Leur statistique reste cependant la même (universalité). On peut parler de signature magnétique de la configuration de désordre d'un échantillon.

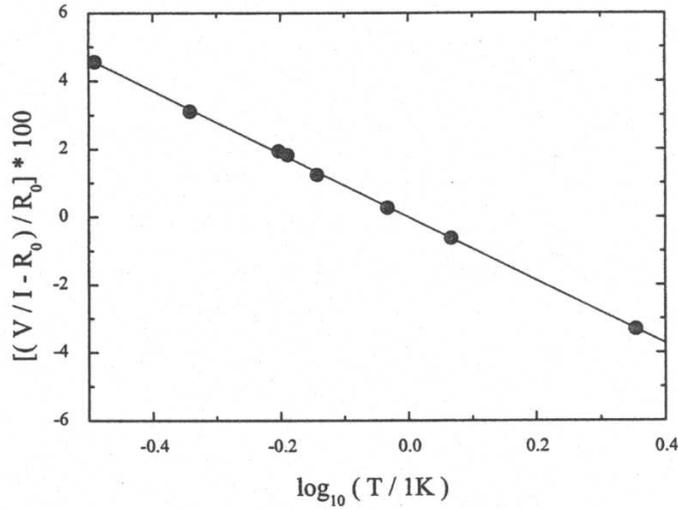


FIG. 4.14: Dépendance logarithmique de la résistivité en fonction de la température pour un film de PdAu (extrait de PRL, 43, 721 (1979))

4.6 Annexes

4.6.1 La formule de Kubo

Hypothèse : à $t = -\infty$, le système est à l'équilibre sans champ : $\vec{A} = \vec{0}$. Le champ électromagnétique, ici le potentiel \vec{A} , est ensuite perçu comme une perturbation adiabatique. Le but de cette dérivation, est de déterminer la réponse linéaire du système d'électrons à cette perturbation. Le champ considéré est un champ monochromatique dirigé selon l'axe x .

$$\vec{E}(\omega) = i\omega\vec{A}(\omega). \quad (4.113)$$

Le hamiltonien à une particule du système perturbé s'écrit

$$H = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (4.114)$$

Nous considérons une base d'états propres $|\alpha\rangle$ du hamiltonien non perturbé $H_0 = p^2/(2m) + V(\vec{r})$. Nous nous intéressons au calcul perturbatif en le champ \vec{A} du courant de charge $\vec{j} = Tr(\rho(t)\hat{j})$ où $\rho(t)$ est la matrice densité à une particule, et \hat{j} l'opérateur courant :

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\frac{e}{m} \left(\hat{n}(\vec{r})(\vec{p} + e\vec{A}) + (\vec{p} + e\vec{A})\hat{n}(\vec{r}) \right) \quad (4.115)$$

$$= -\frac{e}{2m} (\hat{n}\vec{p} + \vec{p}\hat{n}) - \frac{e^2}{2m} (\hat{n}\vec{A} + \vec{A}\hat{n}). \quad (4.116)$$

La matrice densité à une particule satisfait l'équation d'évolution $i\hbar\partial_t\rho = [H, \rho]$. Décomposons cette matrice densité autour de sa valeur sans champ électrique : $\rho =$

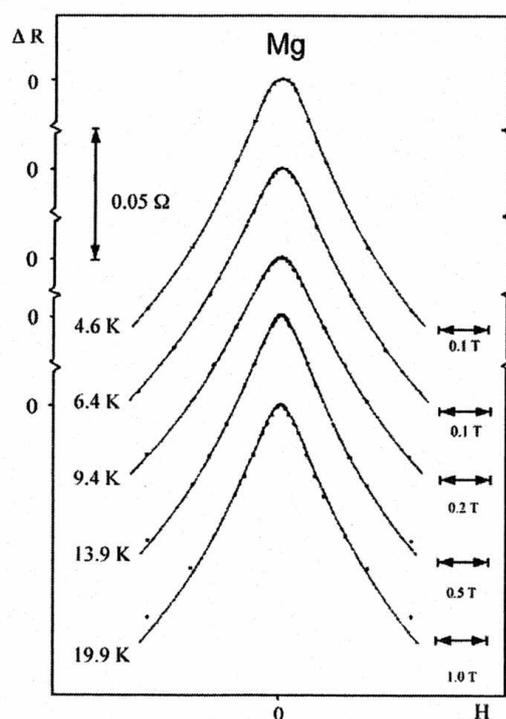


FIG. 4.15: Magnétorésistance d'un film de magnésium en fonction du champ H appliqué, pour différentes températures. Les courbes sont des ajustements théoriques (paramètre τ_ϕ). (extrait de Bergman, Phys. Rep. 107, 1 (1984))

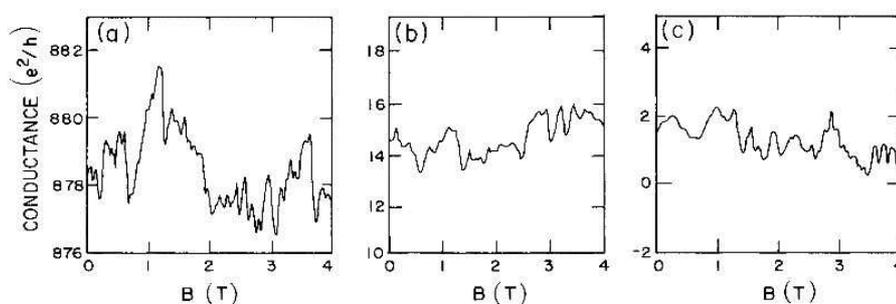


FIG. 4.16: Variations apériodiques de la magnéto-conductance de trois systèmes : a) un anneau d'or b) du Si-MOSFET c) résultats de simulations du modèle d'Anderson. Les fluctuations de G sont toutes d'ordre e^2/h , mais la valeur moyenne varie énormément entre les systèmes. Extrait de Lee, Stone et Fukuyama, Phys. Rev. B 35, 1039 (1987)

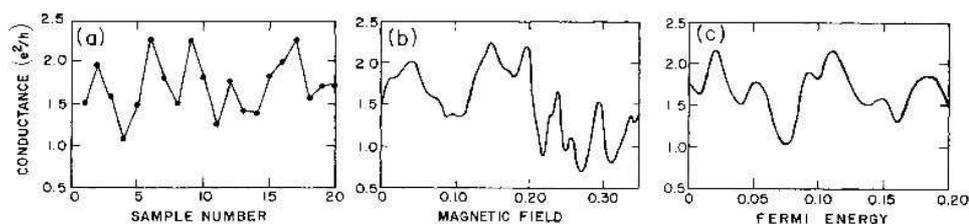


FIG. 4.17: Dépendance des fluctuations de G en fonction de différents paramètres : a) la config. de désordre b) le champ magnétique B appliqué c) l'énergie de Fermi. On vérifie bien l'hypothèse ergodique. Extrait de Lee, Stone et Fukuyama, Phys. Rev. B 35, 1039 (1987)

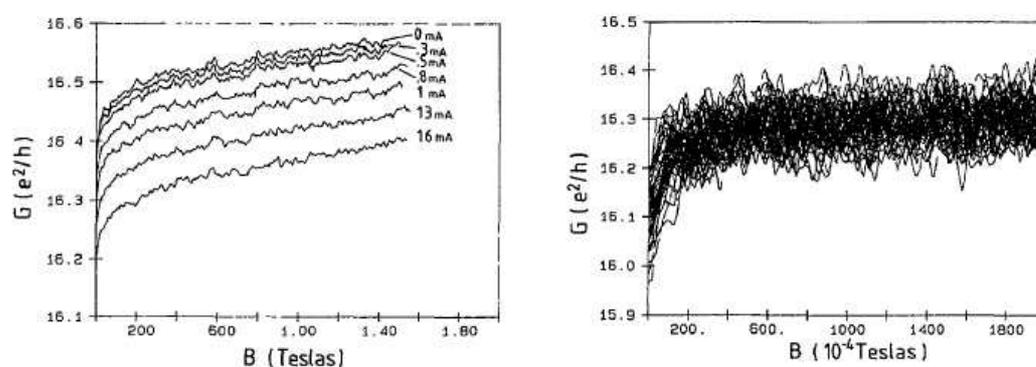


FIG. 4.18: Conductivité de 50 échantillons (à droite sans décalage des énergies de Fermi). (D'après Mailly et Sanquer, J. Phys. I (92), p.357)

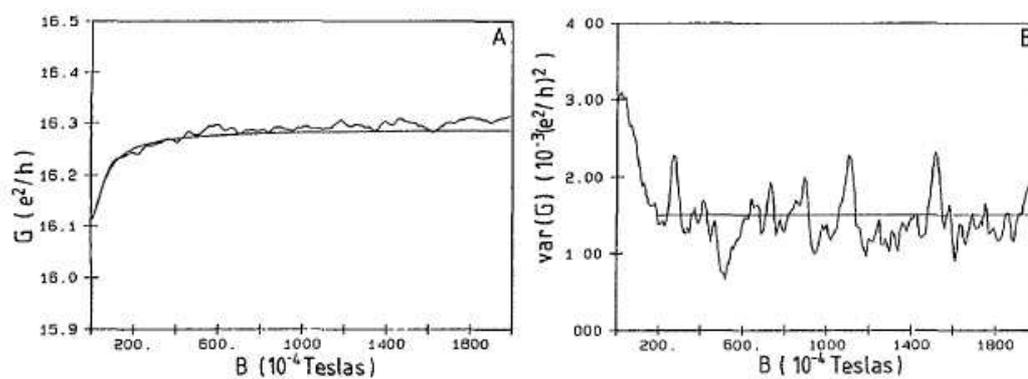


FIG. 4.19: Moyenne de G sur 50 échantillons (gauche), et variance en fonction de B .

$\rho_0 + \delta\rho$. La réponse linéaire s'écrit alors

$$i\hbar\partial_t\rho_0 = [H_0, \rho_0] - i\eta(\rho_0(t) - \rho_{eq}(t)) \quad (4.117)$$

$$i\hbar\delta\rho(t) = [H_1, \rho_0] + [H_0, \delta\rho] - i\eta(\delta\rho(t) - \delta\rho_{eq}(t)) \quad (4.118)$$

où nous avons introduit un petit η afin d'accélérer le régime transitoire. En transformée de Fourier, la deuxième relation s'écrit

$$\begin{aligned} \hbar\omega\langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle &= (f(E_\beta) - f(E_\alpha))\langle\alpha|H_1|\beta\rangle + (E_\alpha - E_\beta)\langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle \\ &\quad - i\eta\langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle + i\eta\langle\alpha|\delta\rho_{eq}(\omega)|\beta\rangle \end{aligned} \quad (4.119)$$

$$\Rightarrow \langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle = \frac{(f(E_\beta) - f(E_\alpha))\langle\alpha|H_1|\beta\rangle - i\eta\langle\alpha|\delta\rho_{eq}(\omega)|\beta\rangle}{E_\alpha - E_\beta - i\eta - \hbar\omega}. \quad (4.120)$$

La solution d'équilibre est une solution stationnaire dont la partie perturbative $\delta\rho_{eq}$ vérifie donc

$$(f(E_\beta) - f(E_\alpha))\langle\alpha|H_1|\beta\rangle + (E_\alpha - E_\beta)\langle\alpha|\delta\rho_{eq}(\omega)|\beta\rangle = 0 \quad (4.121)$$

$$\Rightarrow \langle\alpha|\delta\rho_{eq}(\omega)|\beta\rangle = \frac{f(E_\alpha) - f(E_\beta)}{E_\alpha - E_\beta}\langle\alpha|H_1|\beta\rangle, \quad (4.122)$$

ce qui, reporté dans (4.120), nous donne

$$\langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle = \frac{(f(E_\alpha) - f(E_\beta))(E_\alpha - E_\beta - i\eta)}{(E_\alpha - E_\beta - i\eta - \hbar\omega)(E_\alpha - E_\beta)}\langle\alpha|H_1|\beta\rangle. \quad (4.123)$$

L'élément de matrice de la perturbation du hamiltonien s'obtient simplement, en choisissant par exemple un potentiel vecteur aligné selon x :

$$\langle\alpha|H_1|\beta\rangle = \frac{e}{m}A_x\langle\alpha|p_x|\beta\rangle = -j_{\alpha\beta}^x A_x. \quad (4.124)$$

Revenons maintenant au calcul du courant de charge $Tr(\rho\vec{j}) = Tr(\rho_0\vec{j}_1) + Tr(\delta\rho\vec{j}_0)$ au premier ordre en perturbation. Nous avons ici défini

$$\vec{j}_0 = -\frac{e}{2m}(\hat{n}\vec{p} + \vec{p}\hat{n}) \quad (4.125)$$

$$\vec{j}_1 = -\frac{e^2}{2m}(\hat{n}\vec{A} + \vec{A}\hat{n}). \quad (4.126)$$

Nous obtenons maintenant aisément les traces suivantes

$$Tr(\rho_0\vec{j}_1) = -\frac{e^2}{2m}\sum_{\alpha}\langle\alpha|\rho_0(\hat{n}\vec{A} + \vec{A}\hat{n})|\alpha\rangle \quad (4.127)$$

$$= -\frac{e^2}{2m}\frac{1}{V}N2A_x = -\frac{ne^2}{m}A_x \quad (4.128)$$

$$Tr(\delta\rho\vec{j}_0) = \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle\langle\beta|j_0|\alpha\rangle \quad (4.129)$$

$$= -\frac{1}{V}\sum_{\alpha,\beta}\frac{(f(E_\alpha) - f(E_\beta))(E_\alpha - E_\beta - i\eta)}{(E_\alpha - E_\beta - i\eta - \hbar\omega)(E_\alpha - E_\beta)}|j_{\alpha\beta}|^2 A_x \quad (4.130)$$

où n est la densité électronique. En utilisant $A_x = E_x(\omega)/(i\omega)$, nous obtenons finalement

$$\sigma_{xx} = \frac{i}{\omega} \left(\frac{ne^2}{m} + \frac{1}{V} \sum_{\alpha,\beta} \frac{(f(E_\alpha) - f(E_\beta))(E_\alpha - E_\beta - i\eta)}{(E_\alpha - E_\beta - i\eta - \hbar\omega)(E_\alpha - E_\beta)} |j_{\alpha\beta}|^2 \right). \quad (4.131)$$

Nous avons ici besoin de la règle de somme suivante :

$$\frac{1}{V} \sum_{\alpha,\beta} \frac{f(E_\alpha) - f(E_\beta)}{E_\alpha - E_\beta} |j_{\alpha\beta}|^2 = -n \frac{e^2}{m}. \quad (4.132)$$

Pour montrer cette égalité, nous utilisons $i\hbar/m p_x = [x, H_0]$ et montrons que pour tout α , $\sum_{\beta \neq \alpha} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 = -m/2$. Nous avons alors $V^{-1} \sum_{\alpha} f(E_\alpha) \sum_{\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 / (E_\alpha - E_\beta) = -nm/2$, ce qui implique le résultat. L'utilisation de cette règle de somme nous donne donc le résultat final, appelé formule de Kubo :

$$\sigma_{xx} = \frac{i}{\omega} \frac{\hbar\omega}{V} \sum_{\alpha,\beta} \frac{f(E_\alpha) - f(E_\beta)}{(E_\alpha - E_\beta - i\eta - \hbar\omega)(E_\alpha - E_\beta)} |j_{\alpha\beta}|^2, \quad (4.133)$$

qui peut se réécrire en

$$\Re(\sigma_{xx}) = -\frac{\hbar\pi}{V} \sum_{\alpha,\beta} \frac{f(E_\alpha) - f(E_\beta)}{E_\alpha - E_\beta} |j_{\alpha\beta}|^2 \delta_\eta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (4.134)$$

où δ_η est une fonction δ élargie ($\eta/(\pi(x^2 + \eta^2))$).

Il nous reste maintenant à établir le lien avec les fonctions de Green. Pour cela, remarquons que $\delta_{\eta/2}(\epsilon - H_0) = \Im(G_\epsilon^R)$ pour écrire

$$\Re(\sigma_{xx}) = -\frac{\pi\hbar}{V} \sum_{\alpha,\beta} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon - \hbar\omega)}{\hbar\omega} |j_{\alpha\beta}|^2 \delta_{\eta/2}(\epsilon - E_\alpha) \delta_{\eta/2}(\epsilon - \hbar\omega - E_\beta) \quad (4.135)$$

$$= -\frac{\pi\hbar}{V} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \frac{1}{\pi^2} \text{Tr} \left(\hat{j}_x \Im G_\epsilon^R \hat{j}_x \Im G_{\epsilon - \hbar\omega}^R \right) \quad (4.136)$$

avec $G_\epsilon^{R/A} = (\epsilon - H_0 \pm i\eta/2)^{-1}$. A température nulle, et pour $\hbar\omega \ll E_F$, cette expression se simplifie en

$$\Re(\sigma_{xx}) = +\frac{\hbar}{\pi V} \text{Tr} \left(\hat{j}_x \Im G_{E_F}^R \hat{j}_x \Im G_{E_F - \hbar\omega}^R \right). \quad (4.137)$$

Ce produit des parties imaginaires des fonctions de Green fait apparaître toutes les combinaisons possibles de produits $G^R G^R$, $G^A G^A$ et $G^R G^A$. Dans le cas du calcul de la valeur moyenne sur le désordre de cette conductivité longitudinale, les produits de fonctions de Green retardés et avancés donnent les contributions dominantes, et nous obtenons le résultat annoncé

$$\Re(\overline{\sigma_{xx}}) = +\frac{e^2 \hbar^3}{2\pi m^2 V} \sum_{k,k'} k_x k'_x \overline{\Re G_{E_F}^R(k, k') G_{E_F - \hbar\omega}^A(k', k)}. \quad (4.138)$$

4.6.2 Coefficient de diffusion effectif

La relation d'Einstein relie la conductivité au coefficient de diffusion des ondes électroniques :

$$\sigma = e^2 D(E_F) \rho(E_F) \quad (4.139)$$

où $\rho(E_F)$ est la densité d'états au niveau de Fermi. Comment évaluer ce coefficient de diffusion D ?

Considérons pour cela une fonction d'onde électronique initialement (à $t = 0$) localisée en $x = 0$: $\psi(x, t = 0) = \delta(x, 0)$. Cette fonction d'onde évolue après un temps t en

$$\psi(x, t) = \langle x | e^{-itH} | 0 \rangle. \quad (4.140)$$

Classiquement, la densité de probabilité de l'électron diffuse, et vérifie (aux grand temps)

$$|\psi(x, t)|^2 \simeq \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \quad (4.141)$$

ce qui permet de définir le coefficient de diffusion correspondant

$$D(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_x x^2 |\psi(x, t)|^2 \quad (4.142)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{4\epsilon^2}{2d} \int_0^\infty dt e^{-2\epsilon t} \sum_x x^2 |\psi(x, t)|^2 \quad (4.143)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2\epsilon^2}{d} \int_0^\infty dt e^{-2\epsilon t} \sum_x x^2 \langle x | e^{-itH} | 0 \rangle \langle 0 | e^{+itH} | x \rangle \quad (4.144)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon^2}{\pi d} \int dE \int_0^\infty dt dt' e^{iE(t-t')} \sum_x x^2 \langle x | e^{-it(H+i\epsilon)} | 0 \rangle \langle 0 | e^{+it'(H+i\epsilon)} | x \rangle. \quad (4.145)$$

En utilisant la relation

$$\int_0^\infty dt e^{\pm i(H-E \mp i\epsilon)t} = \frac{1}{\pm i(H-E \mp i\epsilon)} \quad (4.146)$$

nous obtenons

$$D(E) \rho(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon^2}{\pi d} \sum_x x^2 \langle x | \frac{1}{H-E-i\epsilon} | 0 \rangle \langle 0 | \frac{1}{H-E+i\epsilon} | x \rangle \quad (4.147)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon^2}{\pi d} \sum_x x^2 G^R(0, x) G^A(x, 0). \quad (4.148)$$

En combinant ce résultat avec (4.139), nous obtenons la même expression que celle issue de l'approche de Kubo.

Notes

Au delà de la magnétorésistance négative des échantillons mésoscopiques, un autre effet remarquable de la localisation faible est celui des fluctuations universelles de conductance. Dans le formalisme développé dans ce chapitre, le calcul de ces fluctuations correspond à l'évaluation de diagramme à deux boucles indépendantes (une boucle pour chaque conductance). Les corrélations entre les deux conductances sont induites par le désordre, et le calcul consiste à considérer l'ensemble des diagrammes constitués de diffusion et cooperon appariant les configurations de désordre différentes. Ce calcul est assez fastidieux et va au delà de l'objectif de ce cours.

Un complément intéressant à l'approche perturbative de ce cours est l'approche de théorie des champs de la localisation. Le modèle σ -non linéaire correspondant permet de générer la série perturbative de la conductivité de façon systématique. Il permet de plus (au prix d'une extension non locale de l'action) d'obtenir l'ensemble des moments de la loi de distribution de la conductivité. Ce modèle σ -non linéaire peut également être appliqué à désordre plus fort et décrire la transition de localisation. Cependant, cette extension à ce régime n'est pas contrôlée et demeure controversée.

Finalement, mentionnons une dernière approche des problèmes de localisation, spécifique à la dimension 1. Il s'agit de toute la théorie des matrices aléatoires : si nous utilisons le formalisme des matrices de transfert au lieu des matrices de diffusion pour décrire un fil, les propriétés de transport du fil seront décrits par les propriétés statistiques du produit d'un grand nombre de matrices aléatoires. Ces produits possèdent des propriétés universelles qui correspondent aux différentes classes d'universalité de la localisation unidimensionnelle. Cette méthode a connu des développements récents sous la forme d'équation de diffusion DMPK.

5 Transport électronique dans un isolant : l'exemple des semi-conducteurs dopés

5.1 Introduction

Image intuitive de la localisation : à faible désordre, les électrons sont simplement diffusés par les impuretés, à fort désordre (très grande densité), les impuretés localisent les électrons en formant des états liés avec ceux-ci. Dans un métal, cette localisation forte demanderait une densité d'impuretés colossale. Une situation expérimentale correspondant à cette localisation forte est fournie par la physique des semi-conducteurs dopés.

Dans les semi-conducteurs, les électrons doivent franchir un "gap" d'énergie Δ (bande d'énergie interdite) pour être excités dans la bande de conduction. Cela conduit à température finie à une conductivité de bande par activation thermique qui se comporte selon

$$\rho(T) = \rho_0 e^{-\frac{\Delta}{kT}} \quad (5.1)$$

En dopant ces semi-conducteurs, on introduit d'une part des donneurs de charge qui apporte des électrons excédentaires, et d'autre part des accepteurs qui peuvent former un état lié avec des électrons. Ces donneurs et accepteurs sont a priori répartis aléatoirement dans l'échantillon. De plus, l'énergie d'un électron sur un site (accepteur) dépend de l'énergie de Coulomb (non écrantée) avec les électrons voisins répartis au hasard sur des sites accepteurs, et est donc elle-même aléatoire.

Expérimentalement, dans ces semi-conducteurs dopés, on voit apparaître à basse température un nouveau type de conduction, toujours activée thermiquement, mais qui dépend maintenant très fortement du dopage (densité de sites accepteurs/donneurs). Le but de ce chapitre est d'étudier cette "conductivité de saut". Remarquons également que lorsque la concentration en dopant augmente suffisamment, une transition métal-isolant se produit (Figure 2.3).

5.2 La conductivité de saut

5.2.1 Courant tunnel entre deux sites

Considérons deux sites (accepteurs) i et j distants de r_{ij} . Ces sites sont caractérisés par les deux énergies (aléatoires) E_i et E_j des états liés d'un électron respectivement sur le site i/j , en l'absence des autres sites. Le couplage entre les deux sites est caractérisé par l'énergie d'échange I qui est proportionnel au recouvrement des deux fonctions d'onde des états liés : $I \propto e^{-r_{ij}/a}$. En définissant $\Delta_{ij} = \epsilon_i - \epsilon_j$ et en prenant comme référence des

énergies $(\epsilon_i + \epsilon_j)/2$ on peut décrire le système des deux sites dans la base des orbitales ϕ_i, ϕ_j (états liés)

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\Delta_{ij}}{2} & I \\ I^* & -\frac{\Delta_{ij}}{2} \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

Les fonctions propres sont alors $\psi_{1,2} = c_1\phi_i \pm c_2\phi_j$, et les énergies correspondantes $E_{1/2} = \pm\sqrt{(\Delta_{ij}/2)^2 + |I|^2}$. Les coefficients c_1 et c_2 sont donnés par

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{I}{\frac{\Delta_{ij}}{2} \pm \sqrt{(\Delta_{ij}/2)^2 + I^2}} \quad (5.3)$$

Si $\Delta_{ij} \gg I$, $c_1 \simeq 1$ ou $c_2 \simeq 1$ et il n'y a pas d'hybridation des deux sites (pas de transfert de charge). Celle-ci peut se produire sous l'effet des fluctuations thermiques, qui apparaissent ici sous forme de phonons. Le problème revient alors à l'étude de transfert de charge entre les deux sites par absorption résonnante de phonon $\hbar\omega$ (ce qui réduit Δ_{ij}). On étudie alors le taux de transition γ_{ij} entre le site i et le site j , ainsi que le taux en sens inverse γ_{ji} . Ces taux peuvent être déterminés par exemple en utilisant la règle d'or de Fermi. On obtient

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ij}^0 e^{-2\frac{r_{ij}}{a}} \frac{1}{e^{\frac{\Delta_{ij}}{kT}} - 1} \quad (5.4)$$

Par ailleurs, pour qu'un électron puisse "sauter" du site i au site j , il faut que le site i soit occupé et le site j vide, autrement dit que les nombres d'occupation n_i, n_j satisfassent $n_i = 1, n_j = 0$. Le nombre moyen de transition de i à j vaut ainsi

$$\Gamma_{ij} = \gamma_{ij} \langle n_i(1 - n_j) \rangle \quad (5.5)$$

A l'équilibre, $\langle n_i^0(1 - n_j^0) \rangle = \langle n_i^0 \rangle \langle n_j^0 \rangle$ et (facteur 2 pour le spin)

$$n_{i/j}^0 = f_{i/j} = \frac{1}{\frac{1}{2}e^{\frac{\epsilon_{i/j} - \mu}{kT}} + 1} \quad (5.6)$$

On montre alors que $\Gamma_{12} = \Gamma_{21}$.

L'application d'un champ électrique E modifie cet équilibre en modifiant d'une part les énergies des sites (polarisation des sites voisins couplés par Coulomb au site i), *i.e* une modification $\delta\epsilon_i$ des énergies de site, d'autre part il modifie la statistique d'occupation des sites à travers un variation $\delta\mu$ du potentiel chimique. Le courant entre les deux sites i et j s'écrit alors $I_{12} = -e(\Gamma_{12} - \Gamma_{21})$, et la différence de potentiel $-e(U_i - U_j) = \delta(\epsilon_i + \mu_i) - \delta(\epsilon_j + \mu_j)$. En développant au premiers ordre I_{12} (*fastidieux*), on obtient la valeur de la résistance entre les deux sites

$$R_{ij} = \frac{kT}{e^2\Gamma_{12}^{(0)}} \quad (5.7)$$

avec

$$\Gamma_{ij}^{(0)} = \gamma_{12}^{(0)} e^{-2\frac{r_{ij}}{a}} \frac{f_i(1 - f_j)}{e^{\frac{\Delta_{ij}}{kT}} - 1} \quad (5.8)$$

A très basse température $kT \ll |\Delta_{ij}|, |\epsilon_i - \mu|, |\epsilon_j - \mu|$, cette résistance prend une valeur plus simple

$$R_{ij} \simeq R_{ij}^{(0)} e^{\xi_{ij}} \quad ; \quad \text{avec } \xi_{ij} = \frac{2r_{ij}}{a} + \frac{\tilde{\Delta}_{ij}}{kT} \quad (5.9)$$

où $\tilde{\Delta}_{ij} = |\Delta_{ij}| + |\epsilon_i - \mu| + |\epsilon_j - \mu|$. Ces ξ_{ij} étant aléatoires, on obtient (exponentiation) une distribution de résistances extrêmement large. Dans ce problème d'un réseau aléatoire de résistances aléatoires, une procédure de moyenne n'aurait donc aucun sens (voire la discussion de la localisation 1d). La bonne procédure à suivre est ici donnée par l'image de percolation.

5.3 Percolation de liens

A Faire :

Deuxième partie

**Solides Amorphes : l'Exemple des
Verres de Spins**

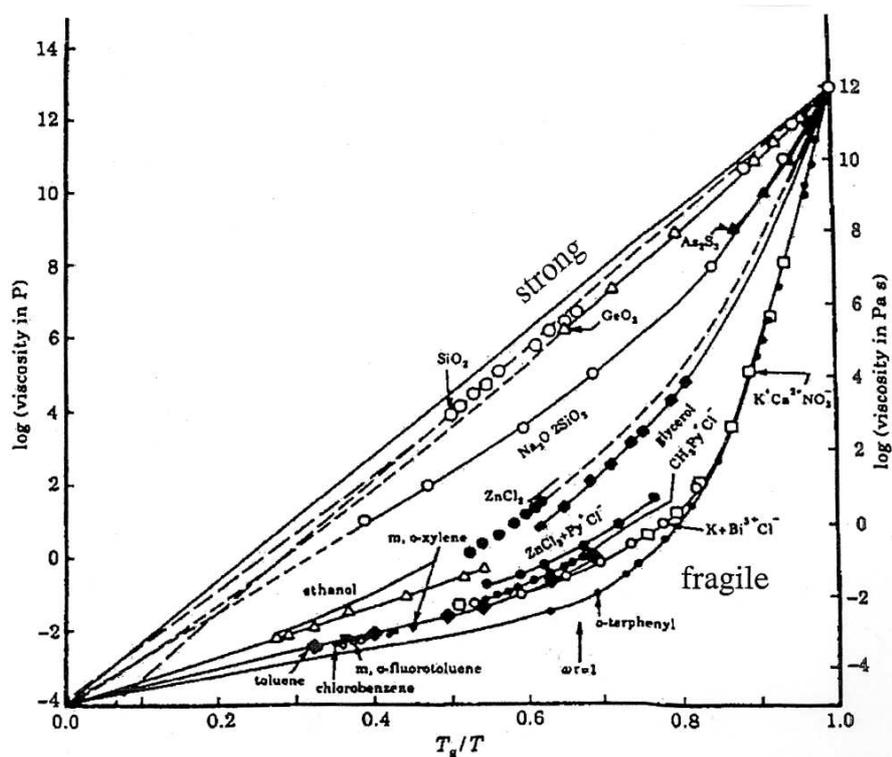


FIG. 6.2: Viscosité de différents verres en fonction de T_g/T . Deux grandes classes de verres peuvent être mise en évidence d'après ce graphique : les verres fragiles et les verres forts. En supposant que la viscosité est induite par un processus d'Arrhénius activé thermiquement $\eta(T) \simeq \exp E(T)/kT$, ces courbes nous donnent l'évolution des barrières d'énergie typiques en fonction de la température (pour les verres fragiles).

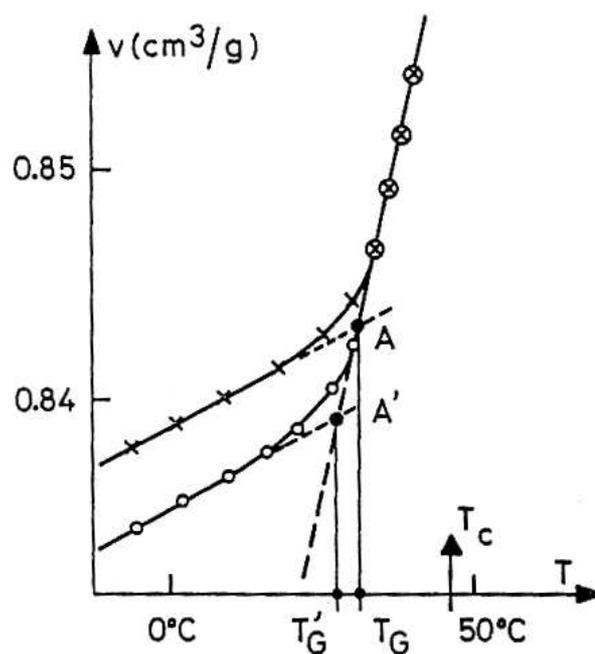


FIG. 6.3: Volume spécifique (enthalpie) d'un verre (PVA) en fonction de la température. Les deux courbes correspondent à deux vitesses de refroidissement, et T_G à la température de transition vitreuse.

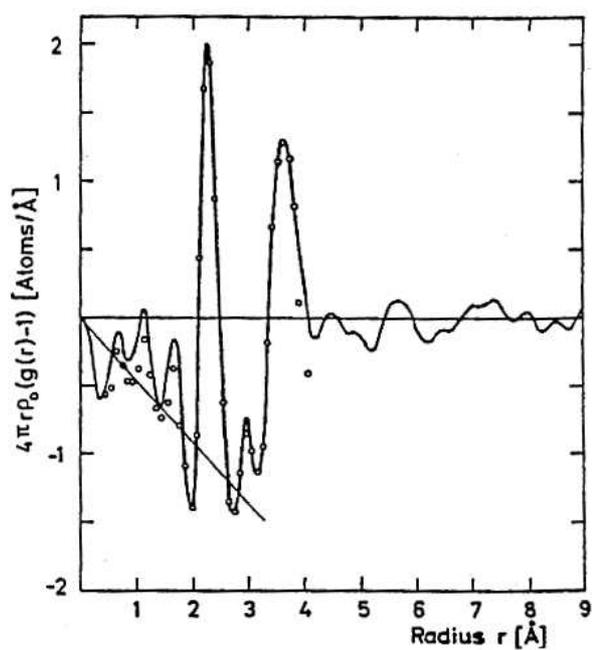


FIG. 6.4: $g(r)$ est la fonction de paire du milieu amorphe (elle mesure les corrélations spatiales à deux points). La courbe continue représente des données expérimentales dans un verre, montrant l'absence de corrélations spatiales à longue portée.

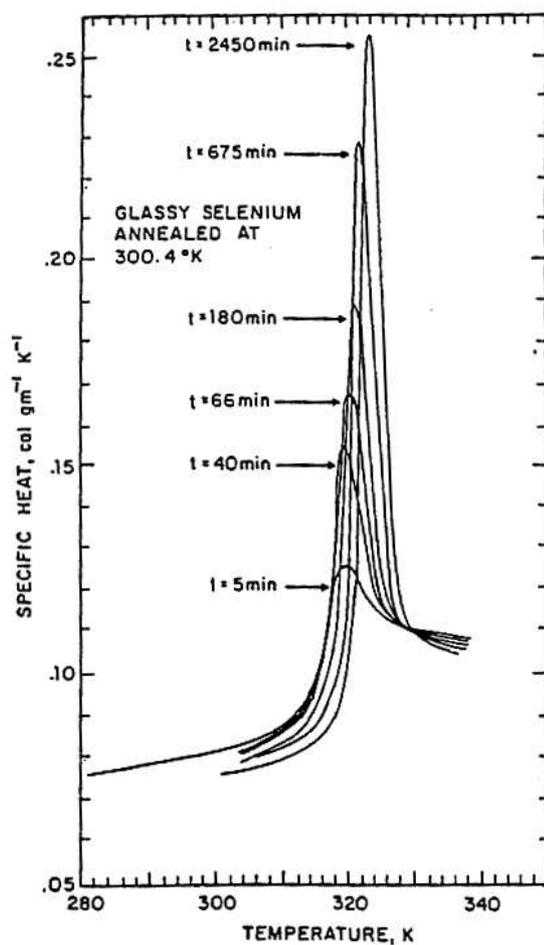


FIG. 6.5: Chaleur spécifique du Sélénium autour de la température de transition vitreuse . Les différentes courbes correspondent à différents temps de recuit (attente) à la température $T \simeq 300K$. Le pic de chaleur spécifique autour de la transition est d'autant plus prononcé que le système a passé de temps dans la phase amorphe.

7 Les verres à basse température et le modèle de systèmes à deux niveaux

Chapitre à reprendre et finir.

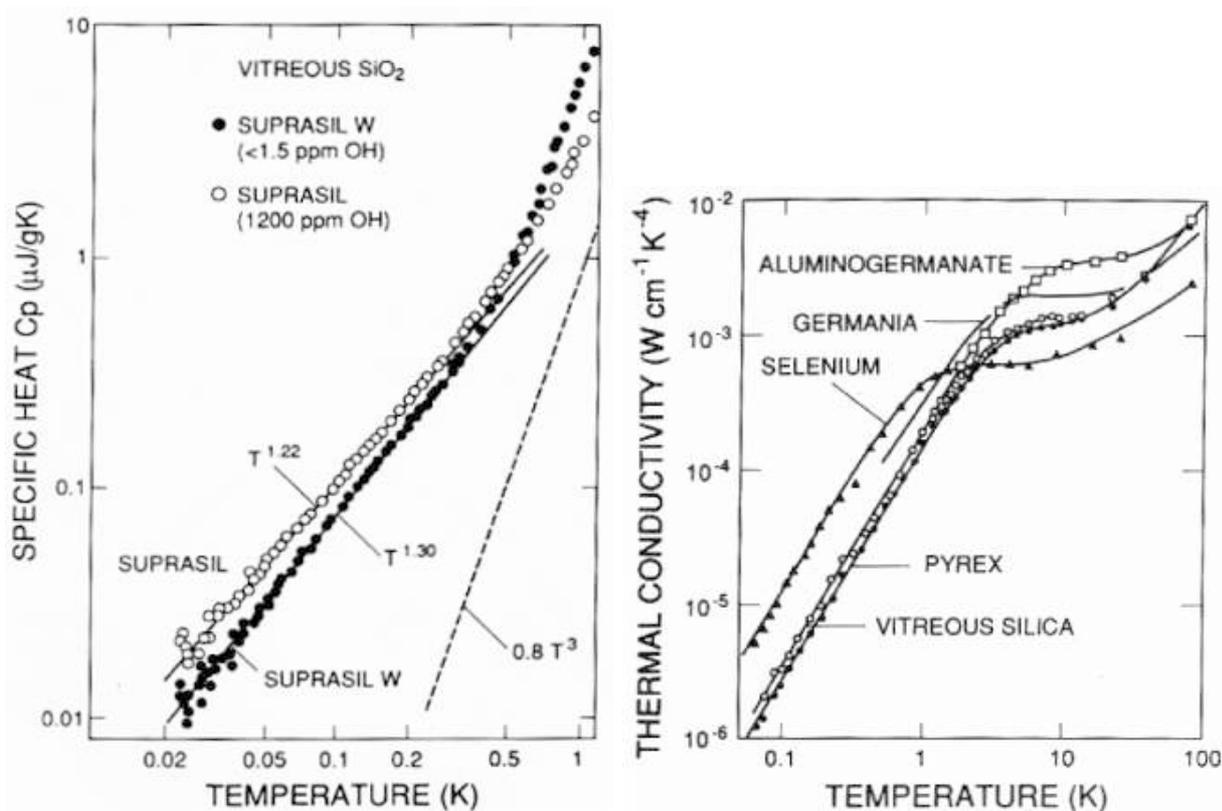


FIG. 7.1: Chaleur spécifique de silicate vitreux en dessous du Kelvin (à gauche) et conductivité thermique de différents matériaux amorphes en dessous de quelques Kelvin (à droite).

7.1 Le modèle de systèmes à deux niveaux

Le modèle des systèmes à deux niveaux (TLS) explique, dans sa forme standard[6, 15], à la fois la dépendance linéaire en température T de la chaleur spécifique de matériaux

amorphes en dessous du Kelvin, ainsi que la dépendance en T^2 de la conductivité thermique $\kappa(T)$. Son succès est dû à la vérification expérimentale de sa prédiction concernant l'atténuation de l'absorption ultra-sonique lorsque l'intensité de l'onde est augmentée. Dans quelques cas, ces TLS ont été identifiés physiquement, mais leur nature demeure incertaine en général.

7.1.1 Un système à deux niveaux (TLS) unique

Nous commençons par postuler l'existence dans le solide amorphe de degrés de liberté (atomes, groupes d'atomes, dislocations, etc) possédant deux états de quasi-équilibre local, par exemple deux positions, ou deux orientations. Dans la discussion qui suit, nous ne considérerons que ces deux positions d'équilibre. Elles constitueront le système à deux niveaux local. Nous choisissons la convention de la figure 7.2 pour la paramétrisation du potentiel à deux puits correspondant.

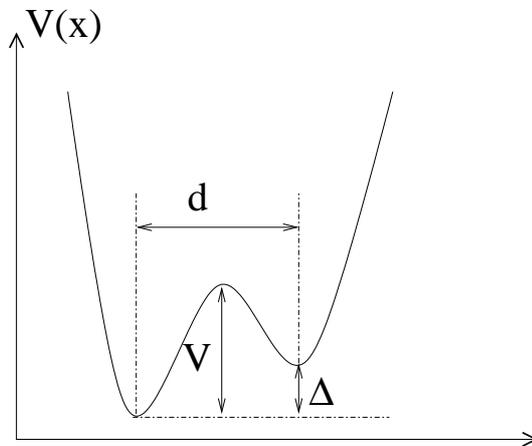


FIG. 7.2: Convention for the parametrization of the two-level systems.

Bien que le détail des états propres (overlap entre fonctions propres des deux puits, etc) dépendent des détails de ce potentiel, la plupart de la discussion qui suit en restera indépendante. Dénotons par E_1 et E_2 les deux énergies propres des “états propres” des puits 1 et 2 de la figure 7.2. Le hamiltonien du TLS correspondant peut être paramétrisé par le gap en énergie $\Delta \simeq E_2 - E_1$ et l'amplitude tunnel $\Delta^0 = \hbar\omega e^{-\lambda}$ où $\lambda = d/\xi$ et ξ est la longueur de pénétration dans la barrière tunnel :

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV}},$$

V est la hauteur de la barrière (Fig 7.2), et $\hbar\omega$ est approximativement l'énergie du point zéro $(E_1 + E_2)/2$. Le hamiltonien du TLS s'écrit alors

$$\mathcal{H}_{TLS} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \Delta^0 \\ \Delta^0 & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\Delta}{2} \sigma^z + \frac{\Delta^0}{2} \sigma^x \quad (7.1)$$

On le diagonalise aisément en

$$\tilde{\mathcal{H}}_{TLS} = \frac{E}{2} \sigma^z \text{ avec } E = \sqrt{\Delta^2 + (\Delta^0)^2}.$$

Remarquons que les valeurs propres de la matrices (7.1) sont $\pm E$ et que le système d'états propres s'écrit

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

avec $\tan 2\theta = \Delta_0/\Delta$. Cette diagonalisation peut donc s'écrire comme la transformation suivante

$$\sigma^z \rightarrow \frac{\Delta}{E} \sigma^z + \frac{\Delta^0}{E} \sigma^x \quad ; \quad \sigma^x \rightarrow \frac{\Delta^0}{E} \sigma^z - \frac{\Delta}{E} \sigma^x \quad (7.2)$$

7.1.2 Distribution des paramètres

Dans un solide amorphe, ces TLS sont supposés être réalisés avec des gap d'énergie Δ et des amplitudes tunnel Δ^0 aléatoires : l'environnement de ces TLS varie dans un matériau désordonné, et le potentiel à deux puits est censé être aléatoire dans un échantillon pour les différents TLS considérés.

- La contribution à $C(T)$ et $\kappa(T)$ va provenir des TLS qui peuvent être excités thermiquement aux températures considérées, c'est-à-dire donc le gap Δ est d'ordre kT . La modèle standard des TLS suppose que la distribution de Δ est une distribution plate sur le domaine de températures considérées ($10mK < T < 1K$).
- La distribution de Δ^0 dépend de la distributions des barrières d'énergie V de de leur largeur d , qui *a priori* sont difficiles à deviner. La modèle de TLS standard suppose que le paramètre λ (lié aux temps de relaxation tunnel) est uniformément distribué entre deux bornes λ_{min} et λ_{max} .
- Les couplages γ de ces TLS avec le bain de phonons (ou d'ondes électromagnétiques) sont supposé constant (uniformes).

Remarques

- L'uniformité des γ est une hypothèse questionnable. En particulier, le temps de relaxation des TLS dépend de ce couplage γ . Il est possible d'imaginer que dans un échantillon, deux types de TLS existent : les "normaux" assez couplés au bain, et les anormaux faiblement couplés qui contribueraient à la chaleur spécifique à long temps, mais pas à d'autres quantités [7]
- Question des interactions entre ces TLS. cf Yu+Leggett. Couplage au bain :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_i \Delta_i \sigma_i^z + \frac{1}{2} \sum_i \Delta_i^0 \sigma_i^x + \sum_{i \neq j} \frac{V_{ij}^{\alpha\beta}}{\gamma_{ij}^d} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\beta \quad (7.3)$$

7.2 Transport de la chaleur

Nous allons nous intéresser dans la suite de ce chapitre aux isolants amorphes, afin de négliger toute contribution électronique au transport de la chaleur.

7.2.1 Transport de la chaleur dans les isolants conventionnels

Chaleur spécifique $C_V(T)$ à basse T

Dans le régime classique (à haute température), la chaleur spécifique est constante et donnée par $3nk_B$ (Loi de Dulong & Petit : k_B par degré de liberté). Lorsqu'on baisse la température, il convient de prendre en compte des effets quantiques. Pour une collection de phonons, la dérivation de $C_V(T)$ est simple. Les phonons sont caractérisés par des lois de dispersions $\omega_s(\mathbf{k})$ pour les différentes branches s . L'énergie libre f s'écrit

$$f = \frac{1}{V} \log \sum e^{-\beta V_\alpha} \quad (7.4a)$$

$$= \frac{1}{V} \log \prod_{\mathbf{k},s} \sum_n e^{-\beta(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_s(\mathbf{k})} \quad (7.4b)$$

$$= \frac{1}{V} \log \prod_{\mathbf{k},s} \frac{e^{-\beta\frac{\hbar}{2}\omega_s(\mathbf{k})}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_s(\mathbf{k})}}. \quad (7.4c)$$

De cette expression, nous obtenons la chaleur spécifique

$$C_V(T) = \frac{\partial^2 f}{\partial T \partial \beta} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar\omega_s(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\mathbf{k})} - 1}. \quad (7.5)$$

Seuls les modes de phonons tels que $\omega_s(\mathbf{k}) \leq \mathbf{kT}$ contribuent significativement à cette expression. Ainsi, à très basse température nous pouvons négliger les modes optiques et ne garder que les branches acoustiques ($\omega_s(\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{0}$ lorsque $T \rightarrow 0$). De plus, dans cette limite les lois de dispersions peuvent être linéarisées¹ : nous obtenons l'expression suivante pour C à très basse température :

$$C_V(T) \simeq \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\Omega dk}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c_s(\hat{k}) k^3}{e^{\beta\hbar c_s(\hat{k})k} - 1} \quad (7.6a)$$

$$= T^3 \int \frac{d\Omega}{(2\pi)^3} \sum_s \frac{4}{(\hbar c_s(\hat{k}))^3} \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x - 1} \quad (7.6b)$$

La constante de proportionnalité, non universelle, ne nous intéresse pas ici. Nous remarquons par contre que la dépendance en T^3 ne dépend que de la dimension spatiale de l'échantillon. Ce résultat est donc valable dans tous les solides, cristallins ou non, puisque dans cette limite de basse température, seuls les phonons de grande longueur d'onde contribuent.

Conductivité thermique $\kappa(T)$

Nous pouvons utiliser la théorie de Drude naïve pour décrire le transport électrique ou thermique dans les solides. La différence entre les solides viendra de la nature des particules

¹Il n'y a ici aucune hypothèse. Mais à plus haute T , un modèle pour la loi de dispersion est nécessaire : Debye/Einstein

transportant la chaleur à basse température : phonons ou électrons (quasi-particules de Landau). Nous allons nous intéresser plus particulièrement aux isolants ici.

Considérons par simplicité le cas 1D pour commencer. Une des hypothèses de la théorie de Drude est qu'après chaque collision au point x , l'énergie moyenne des phonons est proportionnelle à $T(x)$, la température locale en ce point. Considérons maintenant un gradient uniforme en température selon x . En un point x donné, chaque phonon arrivant du côté chaud transportera un courant thermique $v \times e[T(x - v\tau)]$ où $e[T]$ est la densité d'énergie, τ est le temps moyen entre deux collisions, et v est la vitesse moyenne des phonons (nous ne considérons qu'une branche pour l'instant). Les phonons du côté froid transportent un courant $(-v) \times e[T(x + v\tau)]$. Le courant total en ce point est donc (n est la densité de phonons) :

$$\begin{aligned} j &= \frac{n}{2} v \times (e[T(x - v\tau)] - e[T(x + v\tau)]) \\ &= -nv^2\tau \frac{de}{dT} \frac{dT}{dx}. \end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi pour la conductivité thermique :

$$\kappa = nv^2\tau \frac{de}{dT} = v^2\tau C_V,$$

qui se généralise aisément au cas 3D :

$$\kappa = \frac{1}{3}v^2\tau C_V = \frac{1}{3}vlC_V \quad (7.7)$$

où l est le libre parcours moyen. Cette relation implique que κ et C_V ont la même dépendance en température, à moins que la variation de l ne puisse être négligée. A très basse température, l est supposée ne dépendre que de la diffusion des phonons de grande longueur d'onde sur les imperfections de surface, et ne dépendre que très faiblement de T (à plus haute T , l est dominé par la diffusion phonon-phonon).

Ainsi, dans le cas des verres, expliquer le comportement de C_V et κ en fonction de T suppose i) d'identifier de nouveaux degrés de liberté qui contribuent à C_V plus significativement que les phonons, et ii) expliquer la diffusion anormale des phonons sur ces degrés de liberté.

7.2.2 Relaxation de chaleur dans les verres en dessous de 1K

Expériences

A FAIRE

Exp. de relaxation thermique \rightarrow correction logarithmique du comportement de T qui dépend de la durée de l'expérience t_{exp} .

Chaleur spécifique dans le modèle des TLS

Pour un système possédant deux énergies propres $\pm E$, l'énergie libre s'écrit $f = -\frac{1}{V} \log(e^{\beta E} + e^{-\beta E})$, ce qui correspond à l'énergie libre

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{\partial^2}{\partial T \partial \beta} f = -\frac{\partial}{\partial T} \left(E \tanh \left(\frac{E}{kT} \right) \right) \\ &= \frac{E^2}{kT^2} (1 - \tanh^2(E/kT)) = \frac{E^2}{kT^2} \operatorname{sech}^2(E/kT) \end{aligned}$$

Ainsi, pour une collection de TLS, nous devons moyenner cette expression sur une loi de distribution de ΔE , choisie plate entre 0 et T : (n_0 est la densité de TLS) :

$$\begin{aligned} C_V &= n_0 \int_0^\infty dE \frac{E^2}{kT^2} \operatorname{sech}^2(E/kT) \\ &= n_0 k^2 T \int_0^\infty dx x^2 \operatorname{sech}^2(x) = \frac{\pi^2}{12} n_0 k^2 T. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Remarques

1. toute fonction de E/kT donnerait la même dépendance en T .
2. Cette expression est une façon d'extraire la densité n_0 de TLS qui contribuent dans un échantillon. $\pi^2/12 \simeq 0.8$

7.2.3 Conductivité thermique des TLS

C'est un peu moins simple à obtenir...

Couplage faible au phonon

Considérons un unique TLS de valeurs propres $\pm E$ couplé à un bain de phonon. $\psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ sont les fonctions d'onde des deux états $\pm E$ du TLS. La fonction d'onde générale du TLS s'écrit comme

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a_{\uparrow}(t) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\uparrow} t} + a_{\downarrow}(t) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\downarrow} t}$$

où les $a_{\uparrow\downarrow}$ sont les amplitudes d'occupation des deux états, avec les probabilités d'occupation correspondantes $p_{\uparrow\downarrow} = |a_{\uparrow\downarrow}|^2$.

Nous allons considérer l'équation maîtresse suivante[?], valable si nous pouvons négliger le déphasage des fonctions d'onde des TLS induit par le couplage aux phonons (limite de couplage faible). Dans cette approche, nous nous concentrons sur l'évolution des probabilités $p_{\uparrow\downarrow}$ (pas de terme croisé $a_{\uparrow} a_{\downarrow}$), données par

$$\frac{dp_{\downarrow}}{dt} = -\frac{dp_{\uparrow}}{dt} = -\omega_{\uparrow\downarrow} p_{\downarrow} + \omega_{\downarrow\uparrow} p_{\uparrow} \quad (7.9a)$$

Les $\omega_{\uparrow\downarrow}$ sont les probabilités de transition. Nous avons également la relation évidente $p_{\downarrow} + p_{\uparrow} = 1$.

Nous nous intéressons au transport de l'énergie (chaleur) par les phonons : nous devons donc considérer une équation complémentaire, qui décrit l'évolution de la densité de phonons :

$$g(\omega) \frac{dn(\omega)}{dt} = \frac{dp_{\downarrow}}{dt} \quad (7.9b)$$

où $n(\omega)$ est le nombre d'occupation (d'énergie $\hbar\omega$). $g(\omega)$ est la densité spectrale de phonons (dégénérescence des états d'énergie $\hbar\omega$), qui peut s'évaluer dans le modèle de Debye selon

$$g(\omega, s) = \int_{k < k_D} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - c_s k) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_s^3} \theta(\omega_D - \omega).$$

Cette expression est valable pour chaque branche de phonons acoustiques, indexée par s ci-dessous.

Évaluons maintenant les probabilités de transitions $\omega_{\downarrow\uparrow}, \omega_{\uparrow\downarrow}$. Au deuxième ordre en perturbation

$$\omega_{\downarrow\uparrow} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_s g(\omega) n(\omega) |\langle \psi_{\downarrow} | \tilde{H}_{int} | \psi_{\uparrow} \rangle|^2 \quad (7.10a)$$

$$\omega_{\uparrow\downarrow} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_s g(\omega) n(\omega) (n(\omega) + 1) |\langle \psi_{\uparrow} | \tilde{H}_{int} | \psi_{\downarrow} \rangle|^2. \quad (7.10b)$$

Afin d'évaluer les éléments de matrice ci-dessus, nous devons préciser la forme de l'interaction H_{int} entre les TLS et le bain de phonons. Dans la base originale du TLS, on suppose habituellement que ce couplage est diagonal, et s'écrit selon

$$H_{int} = \gamma e \sigma_z \quad (7.11)$$

où e est le champ de contrainte local induit par le champ de phonons. Après diagonalisation du TLS, nous obtenons la contribution

$$\tilde{H}_{int} = \gamma e \left(\frac{\Delta}{E} \sigma^z + \frac{\Delta^0}{E} \sigma^x \right). \quad (7.12)$$

Seul le terme non-diagonal nous intéresse ici.

Les éléments de matrice de l'équation (7.9a) s'expriment alors comme

$$\langle \psi_{\uparrow} | \tilde{H}_{int} | \psi_{\downarrow} \rangle = \gamma e \frac{\Delta^0}{E} = \gamma \frac{\Delta^0}{E} k \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega}} \quad (7.13)$$

où nous avons utilisé l'expression classique du champ de contraintes ku (sans complications tensorielles ici), et u est évaluée en comparant l'énergie d'un phonon $\hbar\omega$ avec son analogue classique $2\rho u^2 \omega^2$ (modulation périodique de la densité).

Revenons maintenant à l'équation maîtresse pour la densité de phonon. En combinant les équations s (7.9a, 7.9b) avec l'équation (7.10), nous obtenons

$$g(\omega) \frac{dn(\omega)}{dt} = -\omega_{\downarrow\uparrow} p_{\downarrow} + \omega_{\uparrow\downarrow} p_{\uparrow} \quad (7.14)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} g(\omega) |\langle \psi_{\uparrow} | \tilde{H}_{int} | \psi_{\downarrow} \rangle|^2 \times [n(\omega)(n(\omega) + 1)p_{\uparrow} - n(\omega)p_{\downarrow}]. \quad (7.15)$$

Cette dernière équation définit un taux de diffusion

$$\tau_{ph}^{-1}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{\uparrow} | \tilde{H}_{int} | \psi_{\downarrow} \rangle|^2 (p_{\downarrow} - p_{\uparrow}) \quad (7.16)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \left(\frac{\Delta^0}{E} \right)^2 \left(\frac{\omega}{c_s} \right)^2 \frac{\hbar}{2\rho\omega} [p_{\downarrow} - p_{\uparrow}]. \quad (7.17)$$

La différence entre les probabilités d'occupation s'évalue à l'équilibre en utilisant $p_{\uparrow}^0/p_{\downarrow}^0 = e^{-\frac{E}{kT}}$ et $p_{\uparrow} + p_{\downarrow} = 1$: $p_{\uparrow}^0 - p_{\downarrow}^0 = \tanh \frac{E}{2kT}$. L'ensemble de ces résultats nous permet d'obtenir

$$\tau_{ph}^{-1}(\omega) = \frac{\pi\gamma^2}{\hbar^2\rho c_s^2} \frac{\Delta_0^2}{\omega} \tanh \frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (7.18)$$

Ce résultat est valable pour un TLS unique. Pour obtenir le taux moyen de diffusion des phonons, nous devons prendre la moyenne de ce taux pour une collection d'amplitudes tunnel Δ^0 à l'énergie $E = \hbar\omega$, distribuées selon la loi définie dans la partie 7.1.2 :

$$P(\Delta, \Delta^0) = P/\Delta^0 \quad (7.19)$$

qui correspond à

$$P(E, \Delta^0) = \frac{PE}{2\Delta^0 \sqrt{E^2 - (\Delta^0)^2}} \quad (7.20)$$

En effectuant la moyenne de (7.18) avec cette distribution, nous obtenons le taux moyen

$$\tau_{ph}^{-1}(\omega) = \frac{\pi\gamma^2 P}{\rho c_s^2} \omega \tanh \frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (7.21)$$

En supposant que les TLS sont la source dominante de diffusion des phonons, et en utilisant la formule de Drude (7.7), nous obtenons

$$\kappa = \frac{1}{3} \sum_s \int_0^{\infty} d\omega C_s(\omega) c_s^2 \tau_{ph}(\omega). \quad (7.22)$$

En utilisant $C_s(\omega) = g(\omega)k(\hbar\omega/kT)^2 \text{sech}^2(\hbar\omega/kT)$ (dérivée plus haut) nous obtenons (attentions E à la place de $2E$ un peu partout)

$$\kappa = \frac{1}{3} \sum_s \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\omega^2}{2\pi^2 c_s^3} \left[\frac{\hbar^2 \omega^2}{kT^2} \text{sech}^2 \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \right] c_s^2 \quad (7.23)$$

$$\begin{aligned} & \times \left[\frac{\pi\gamma_s^2 P}{\rho c_s^2} \omega \tanh \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \right]^{-1} \\ & = T^2 \frac{\rho k_B^3}{6\pi^3 \hbar^2} \frac{\pi^2}{64} \sum_s \frac{c_s}{P\gamma_s^2}. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Cette expression nous fournit le facteur T^2 escompté.

A finir

8 Introduction aux verres de spins

Verres de spin : analogue des verres structurels. Avantage : degrés de liberté connus, désordre d'origine contrôlée (à la différence des verres), restriction aux propriétés magnétiques. ordre magnétique \leftrightarrow ordre positionnel/orientationnel : phénoménologie similaire ?

8.1 Le modèle d'Edwards-Anderson

Une impureté dans un métal est écrantée par un nuage d'électrons de conduction. Pour l'interaction magnétique, le potentiel écranté est caractérisé par la susceptibilité χ_0 qui oscille spatialement :

$$\chi_0(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{r^3} \cos(k_F r) \quad (8.1)$$

Ces oscillations de Friedel sont le reflet de la singularité de la densité électronique au niveau de Fermi. L'interaction oscillante entre impuretés magnétiques qui s'en déduit s'appelle l'interaction de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY). Pour des impuretés réparties aléatoirement dans l'échantillon, la distance r varie et il est légitime de penser que les interactions entre spins vont avoir un signe aléatoire. Il s'agit là d'une propriété essentielle du désordre dans le problème des verres de spin.

Dans le modèle d'Edwards-Anderson, les spins des impuretés sont placés sur un réseau ordonné :

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j \quad (8.2)$$

Les fluctuations quantiques sont négligées ici, et dans la suite du cours. Le désordre est pris en compte à travers les interactions aléatoires entre ces spins J_{ij} . Deux distributions sont habituellement considérées par simplicité : la distribution gaussienne

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} e^{-\frac{J_{ij}^2}{2\Delta}} \quad (8.3)$$

et la distribution bi-modale

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} \left[\delta(J_{ij} - \sqrt{\Delta}) + \delta(J_{ij} + \sqrt{\Delta}) \right] \quad (8.4)$$

Dans les deux cas, l'intensité du désordre est donnée par le nombre Δ . Pour des interactions décroissant suffisamment vite, il est aussi possible de ne conserver que les couplages entre plus proches voisins sur le réseau.

Une dernière hypothèse brutale permet d'obtenir le modèle d'Edwards et Anderson : elle consiste à ne garder de chaque spin que sa composante selon le champ magnétique z

(hypothèse de spins d'Ising). Il conviendra de se souvenir de l'aspect arbitraire de cette hypothèse dans la confrontation des théories avec les expériences. Le modèle que nous avons ainsi obtenu s'écrit

$$H_{EA} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (8.5)$$

où $\sigma = \pm 1$ est un spin d'Ising.

8.2 Un peu d'expériences...

8.2.1 Susceptibilité magnétique

Les verres de spins correspondent à des métaux (*Au*, *Cu*) comprenant une faible concentration x d'impuretés magnétiques (*Fe*, *Mn*). Ces impuretés sont *a priori* réparties au hasard dans l'échantillon (au moins à faible concentration, sans effet de formation d'agrégat). A très faible concentration, les impuretés ne se voient quasiment pas : la phase magnétique correspondante est une phase paramagnétique de moments libres. Lorsque la concentration augmente et que l'on atteint le "seuil de percolation"¹ au delà duquel un ensemble macroscopique de spins interagissent mutuellement, nous nous attendons à l'apparition d'un ordre magnétique à basse température ($T \simeq 0$). Les fluctuations thermiques tendent à détruire cet ordre. Le diagramme des phases naïf ainsi obtenu est représenté sur la partie gauche de la figure 8.1.

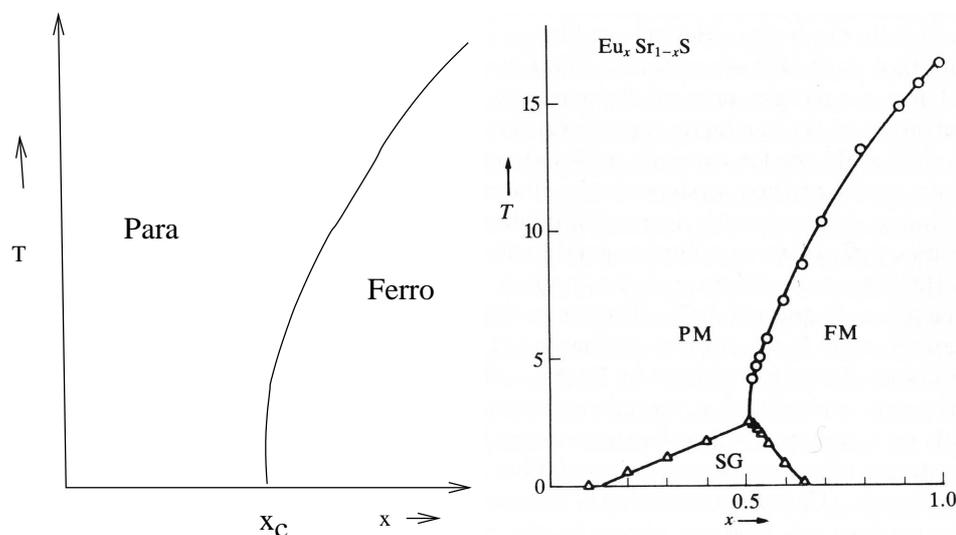


FIG. 8.1: Diagramme des phases d'un verre de spin naïf (à gauche) est expérimental (à droite). x correspond à la concentration en impuretés magnétiques (ici *Eu*), et T la température.

¹Voir à ce sujet la discussion de la conductivité d'un semi-conducteur dopé.

La partie droite de la figure 8.1 montrent l'apparition d'une nouvelle phase magnétique dans le composé étudié autour des concentrations x_c (quelqu'en soit la signification).

La caractérisation des propriétés de cette phase magnétique passe naturellement par l'étude de la susceptibilité (réponse à un très petit champ)

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{ij} \chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \frac{\partial m_i}{\partial h_j}$$

où m_i est la magnétisation locale $\langle S_i \rangle$. A haute température (dans la phase paramagnétique) χ suit la loi de Curie-Weiss qui décrit la réponse d'un ensemble de spins libres

$$\chi(T) \propto \frac{N}{kT} \quad (8.6)$$

où N est le nombre de spins libres (impuretés). Cependant, à une température T_{SG} un maximum apparaît pour χ (voir la Figure 8.2). En dessous de T_{SG} , la magnétisation $\chi(T)$ diminue.

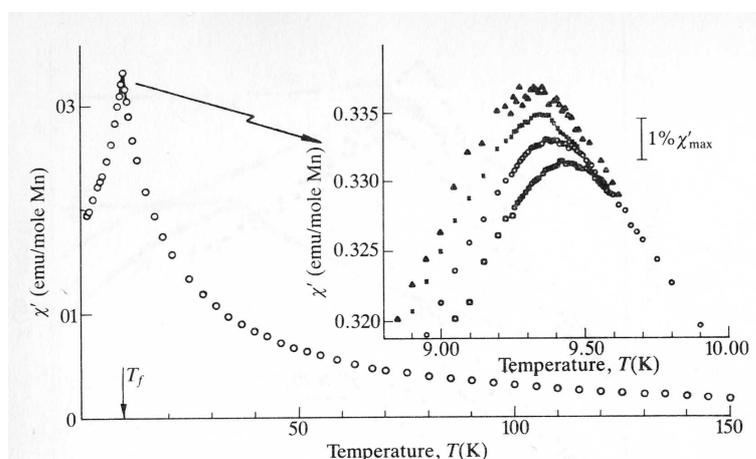


FIG. 8.2: Susceptibilité (ac) du $CuMn$ pour une concentration $x = 0.9\%$ en fonction de la température. Les courbes de l'encart correspondent à différentes fréquences de champ magnétique : $1330Hz$ (\square), $234Hz$ (\circ), $10.4Hz$ (\times), $2.6Hz$ (\blacktriangle).

Comme pour l'apparition d'un ordre magnétique conventionnel, cette diminution de χ s'interprète comme l'apparition de moments magnétiques gelés. En effet, d'après la formule de Curie-Weiss (8.6) ci-dessus, une diminution de χ peut s'interpréter comme une diminution du nombre N de spins libres susceptibles de contribuer à χ .

Ceci se voit plus précisément en calculant la magnétisation locale (avec le théorème FDT)

$$\chi_{ii} = \frac{\partial m_i}{\partial h_i} = \frac{1}{T} \langle (S_i - \langle S_i \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{T} (1 - m_i^2) \quad (8.7)$$

$$\Rightarrow \chi_{loc} = \frac{1}{N} \sum_i \chi_{ii} = \frac{1}{T} \left(1 - \frac{1}{N} \sum_i m_i^2 \right) \quad (8.8)$$

N.B : on peut aussi montrer que $\chi_{ij} = 0$ si la distribution des J_{ij} est symétrique, ce qui permet d'égaliser χ_{loc} et χ .

La dépendance de χ en ω à basse température est intrigante, et différente de celle d'un antiferro ($\chi'(\omega) = \chi_0 - a \ln \omega$). Elle implique *a priori* l'existence d'une grande plage de temps de relaxation $\tau \propto 1/\omega$. L'idée naïve est d'associer ces temps de relaxation à des barrières d'énergies aléatoires ΔE entre des états successifs :

$$\tau \simeq e^{\beta \Delta E} \quad (8.9)$$

8.2.2 Chaleur spécifique

Par contre, cet apparition de moments gelés à basse température ne se voit pas sur la chaleur spécifique : Figure 8.3. Ceci est en contradiction avec la phénoménologie habituelle des transitions de phase qui prédisent une singularité de C_V à la transition.

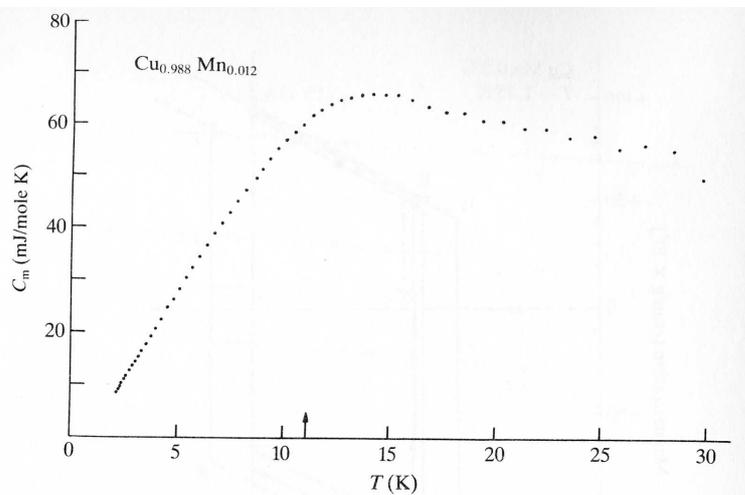


FIG. 8.3: Chaleur spécifique du $Cu_{1-x}Mn_x$ pour une concentration $x = 1.2\%$. La température de transition verre de spin (cf. susceptibilité) est indiquée par une flèche.

8.2.3 Effet d'histoire / Rémanence

La susceptibilité de la phase de basse température dépend de la façon avec laquelle le champ magnétique a été branché. Plus précisément, deux procédures sont habituellement utilisées pour mesurer $\chi(\omega = 0)$:

1. *Zero field cooled* (ZFC) : on refroidit de $T_A > T_{SG}$ à $T_B < T_{SG}$ puis on branche le champ magnétique H . On mesure alors la susceptibilité $\chi(\omega = 0)$ qui saute à une valeur finie et augmente avec la température jusqu'à T_{SG} .
2. *Field Cooled* (FC) : on branche le champ H avant de refroidir. La courbe d'aimantation obtenue sous T_{SG} est à peu près constante, et différente de celle obtenue par ZFC. Cette différence apparaît pour des champs très faible (qqes Gauss).

Ces résultats sont présentés sur la figure 8.4. L'interprétation est qu'un très petit champ suffit à perturber sérieusement l'état du verre de spin. Cette extrême sensibilité aux perturbations externes est un signe caractéristique des phases vitreuses.

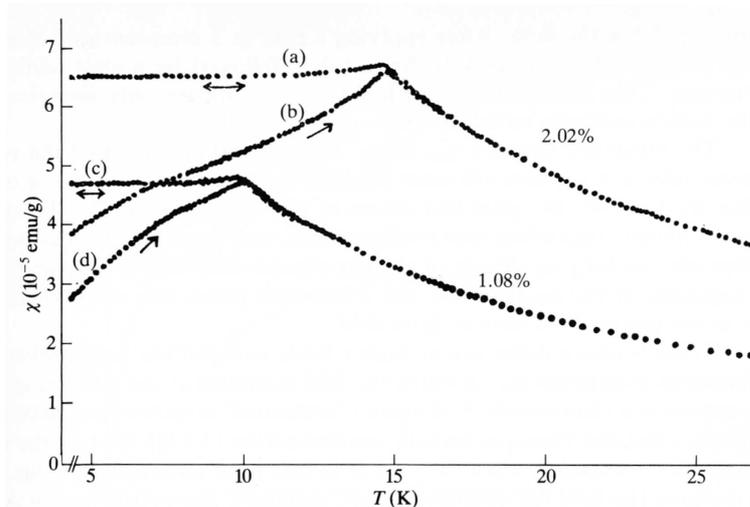


FIG. 8.4: Susceptibilité obtenue dans les procédures “zero field cooled” ((c) et (d)) et “field cooled” pour deux verres de spin différents. Voir le texte pour la signification des 2 procédures.

8.3 Phénoménologie : fragmentation de l'espace des phases

8.3.1 Rappels de physique statistique

Rappels succincts de physique statistique : considérons une observable O qui dépend de l'état s du système. On ne mesure jamais une valeur instantanée, mais plutôt une moyenne sur un court interval de temps $[0, t]$:

$$\frac{1}{t} \int_0^t dt' O[s(t')]$$

La détermination de l'évolution dans l'espace des phase d'un système macroscopique est un problème insoluble. L'approche statistique consiste à remplacer cette moyenne temporelle par une moyenne d'ensemble

$$\int d[s] P[s] O[s],$$

moyenne sur l'espace des phases muni d'une mesure $d\mu[s] = dP[s]ds$ adéquate. Ce remplacement correspond à faire une hypothèse d'ergodicité. Celle-ci revient à dire qu'au cours du temps, ma trajectoire $s[t']$ que parcourt le système dans l'espace des phases passe arbitrairement près de tout point de l'espace des phases accessibles. Et ceci, sur des durées

relativement courtes à l'échelle macroscopiques. Autrement dit, l'échantillonnage de l'espace des phases accessibles par la trajectoire $s[t]$ est excellent. Faute de quoi, il convient sans doute de réduire le volume de l'espace des phases accessible.

La détermination de cet espace des phases et de la mesure associée constitue le domaine de la physique statistique. Une règle fondamentale est que l'entropie

$$S = - \langle \ln P[s] \rangle = - \int d[s] P[s] \ln P[s] \quad (8.10)$$

doit être maximale. La normalisation de P implique en particulier que S est positive. Par ailleurs, si P est uniforme, cet axiome implique de maximiser l'espace des phases accessible ($S \propto \ln V$). Des contraintes extérieures (nombre de particules, etc) permettent de déterminer l'espace des phases.

8.3.2 Vallées et barrières d'énergie : une image de champ moyen

Considérons l'exemple d'un système d'états indexés par α , d'énergie moyenne constante E . La maximisation de l'entropie avec les paramètres de Lagrange adéquats conduit aux poids statistiques de Boltzmann :

$$S_{\beta\gamma}[P] = - \sum_{\alpha} P_{\alpha} \ln P_{\alpha} - \beta (\sum_{\alpha} E_{\alpha} P_{\alpha} - E) - \gamma (\sum_{\alpha} P_{\alpha} - 1) \quad (8.11)$$

$$\Rightarrow - \ln P_{\alpha} - 1 - \beta E_{\alpha} - \gamma = 0 \quad (8.12)$$

$$\Rightarrow P_{\alpha} = e^{-1-\gamma} e^{-\beta E_{\alpha}} \quad ; \quad \sum_{\alpha} P_{\alpha} = e^{-1-\gamma} \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} = 1 \quad (8.13)$$

$$\Rightarrow P_{\alpha} = \frac{e^{-\beta E_{\alpha}}}{Z} \quad (8.14)$$

Un mécanisme de réduction de l'espace des phases est celui de la brisure de symétrie (spontanée ou pas). Nous illustrons notre rappel à ce sujet sur le modèle d'Ising

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (8.15)$$

Au niveau du champ moyen, la distribution de probabilité se factorise en

$$P[s] = \prod_i P_i(\sigma_i)$$

Les distributions de site $P(\sigma_i)$ sont paramétrisées par un nombre m_i selon

$$P_i(\sigma_i) = \frac{1 + m_i}{2} \delta(\sigma_i - 1) + \frac{1 - m_i}{2} \delta(\sigma_i + 1) \quad (8.16)$$

Dans cette approximation de champ moyen, l'énergie moyenne s'écrit selon

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle - h \sum_i \langle \sigma_i \rangle \quad (8.17)$$

Par ailleurs, il est aisé de montrer que $\langle \sigma_i \rangle = \frac{1+m_i}{2} - \frac{1-m_i}{2} = m_i$. En exprimant de même l'entropie S en fonction des m_i , nous obtenons l'expression de l'énergie libre

$$F = E - TS = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} m_i m_j - h \sum_i m_i + T \sum_i \left(\frac{1+m_i}{2} \ln \frac{1+m_i}{2} + \frac{1-m_i}{2} \ln \frac{1-m_i}{2} \right)$$

La condition d'équilibre $\partial_{m_i} F = 0$ s'écrit

$$m_i = \tanh \left(\beta \sum_j J_{ij} m_j + h \right)$$

Pour un système Ferro (J uniforme positif) et en 3D, cette équation se réécrit

$$m = \tanh(\beta 6Jm)$$

La condition de minimum $\partial_{m_i}^2 F > 0$ implique que $6\beta J = T/T_c < 1/(1-m^2)$. On trouve donc deux types de solutions selon que T soit supérieur ou non à T_c . Pour $T > T_c$, la solution de ces équation est unique $m = 0$, alors que pour $T < T_c$ apparaissent deux solutions $m = \pm m(T, h)$. Ces deux solutions sont séparées par une barrière d'énergie. Il est aisé de montrer que cette barrière d'énergie est proportionnel à N (le nombre de spin), car son franchissement implique de retourner tous les spins. Elle diverge donc dans la limite thermodynamique, ainsi qu'à température nulle. En baissant brutalement la température, il est donc possible de piéger le système dans un état métastable qui n'est pas son fondamental. On voit donc apparaître la dépendance de l'état du système en la vitesse de trempe, comme pour un verre.

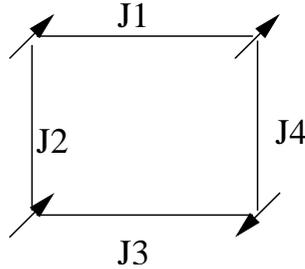
8.3.3 Image (très floue) des verres

Une idée répandue sur les verres est que leur espace des phases est fractionné en un grand nombre de vallées d'énergie libre, séparés par des barrières d'énergie importantes. Certaines de ces barrières peuvent être franchies en des temps accessibles expérimentalement, d'autres pas. On aboutit alors à une physique sensible aux perturbations externes (petites barrières d'énergies), et très dépendantes de l'histoire du système est des conditions de préparation (grandes barrières d'énergie). Ce piégeage du système dans certaines vallées d'énergie libre donne naissance à une brisure d'ergodicité dans un verre. Nous reviendrons plus tard sur cette notion. Par ailleurs, l'existence d'une grande diversité de temps caractéristiques pour franchir ces barrières peut expliquer la physique du vieillissement observée dans les verres. Le principal problème ici, en comparaison avec l'exemple précédent du modèle d'Ising, est qu'il n'y a pas de symétrie évidente qui puisse être brisée dans la phase vitreuse.

8.3.4 La frustration

L'existence de nombreux états quasi-dégénérés peut être rendue "vraisemblable" par la présence de frustration dans le problème. Que veut-on dire exactement pas là ? Rappelons

que les couplages J_{ij} sont de signe aléatoire. Considérons ainsi une boucle à l'intérieur du système :



Si le produit des J_{ij} est positif le long de la boucle, il est possible de trouver une (deux) configurations de spins qui minimise l'énergie le long de la boucle. Dans le cas opposé, le problème n'est pas soluble trivialement. Plusieurs configurations d'énergies (le long de la ligne) très proches existent pour un ensemble de J_{ij} donné. La complexité du problème peut se voir à travers le nombre de contraintes non triviales à satisfaire dans ce problème (le long de chaque boucle).

8.3.5 Paramètre d'ordre

Habituellement, lorsque l'on étudie une transition associée à une brisure de symétrie, nous commençons par définir un paramètre d'ordre qui prend deux valeurs bien distinctes selon que la symétrie est brisée ou non. Dans l'exemple ci-dessus du modèle d'Ising, c'est la symétrie Z_2 qui est brisée, et le paramètre d'ordre associé est la magnétisation $m = N^{-1} \sum_i \langle \sigma_i \rangle$.

Dans le présent problème, il n'y a pas de symétrie apparente qui soit brisée à la transition vitreuse. L'image d'un ensemble de moments magnétiques gelés dans des positions aléatoires n'aide pas à identifier une ordre spatial à longue portée. L'idée d'Edwards et Anderson et d'utiliser l'image précédente de système piégé dans une partie de l'espace des phases, autrement dit la brisure d'ergodicité, pour définir un paramètre d'ordre adéquat. Ceci nécessite bien sûr de réintroduire des quantités dépendant du temps. Ce paramètre s'exprime selon

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \langle S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \rangle \rangle_{des} \quad (8.18)$$

Ce paramètre d'ordre mesure la mémoire du spin S_i à $t_0 + t$ de son état à la date t_0 . S'il est libre de fluctuer, cette fonction de corrélation se moyenne à 0, si le spin est dans une configuration gelée, ce paramètre ne s'annule pas dans la limite $t \rightarrow \infty$.

En termes de "vallées d'énergie libre" : si l'on associe à ces différents états une énergie libre F_α et une magnétisation m_α . D'après les rappels de physique statistique qui précèdent, le poids statistique de chaque états est bien $P_\alpha = e^{-\beta F_\alpha} / Z$. Le paramètre d'Edwards-Anderson s'exprime alors selon

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \sum_i (m_i^{\alpha})^2,$$

sans corrélation entre les magnétisations correspondants à différents états. Par contre, la

magnétisation moyenne fait intervenir des corrélations qui annulent l'ensemble :

$$\langle m_i^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_{\alpha} P_{\alpha} m_i^{\alpha} \right)^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha, \beta} P_{\alpha} P_{\beta} m_i^{\alpha} m_i^{\beta} \right\rangle$$

Afin d'aller plus loin dans cette image, il est évidemment nécessaire de donner un sens plus précis à cette notion de "vallée d'énergie" ou de portion d'espace des phases. La question naturelle qui vient à l'esprit est celle de la structure spatiale de ces états. La dynamique quant à elle fait intervenir des caractéristiques plus fines (et complexes) du paysage d'énergie libre, telles que les barrières d'énergie, les problèmes de topologie, etc.

9 Le modèle d'énergies aléatoires

Modèle introduit et résolu par B. Derrida en 1981[11]. Il est transposable à de nombreuses situations en dehors des verres de spins.

9.1 Définition du modèle

Dans le cas du modèle d'Edwards-Anderson (connectivité finie) comme dans celui du modèle champ moyen de Sherrington-Kirkpatrick, l'énergie des états est distribuée selon la loi de distribution

$$P(E) = \frac{1}{\sqrt{N\pi J^2}} e^{-\frac{E^2}{NJ^2}}. \quad (9.1)$$

L'hypothèse fondamentale du modèle d'énergies aléatoires (REM) est de supposer les énergies associées à différentes configurations indépendantes les unes des autres. En dimension finie, cette approximation apparaît grossière : deux configurations qui diffèrent par le retournement d'un spin ont des énergies très corrélées. Cette approximation n'apparaît exacte (dans la limite de grand p) que pour le modèle dit p - spins dans lequel le terme d'interaction est un terme à p spin (voir le chapitre suivant) :

$$H_{p\text{-spin}} = \sum_{\{i_1 \dots i_p\}} J_{i_1 \dots i_p} \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_p}$$

Le REM est donc défini par le tirage de $M = 2^N$ énergies indépendantes selon la loi (9.1). Le but est bien sûr d'en tirer la thermodynamique (aucune dynamique ici), et en particulier l'énergie libre

$$F = -T \langle \ln Z \rangle = -T \int \prod_{\alpha} P(E_{\alpha}) dE_{\alpha} \ln Z[\{E_{\alpha}\}] \quad (9.2)$$

où

$$Z = \sum_{\alpha=1}^M e^{-\beta E_{\alpha}} \quad (9.3)$$

9.2 Solution microneononique

L'idée directrice est de tirer partie de l'indépendance des énergies en utilisant le théorème de la limite centrale.

Considérons donc $n(E)$, la densité d'états d'énergie E telle que $n(E)dE$ corresponde au nombre de niveaux d'énergie compris entre E et $E + dE$. Nous pouvons écrire $n(E) =$

$\sum_{\alpha=1}^M y_{\alpha}$ où y_{α} vaut 1 si $E < E_{\alpha} < E + dE$, et 0 sinon. La valeur moyenne s'obtient aisément

$$\langle n(E) \rangle dE = M \langle y_{\alpha} \rangle = M \frac{1}{\sqrt{N\pi J^2}} e^{-\frac{E^2}{NJ^2}}$$

Soit dans la limite de grand N :

$$n(E) \simeq e^{N \left(\ln 2 - \frac{e^2}{J^2} \right)} \quad (9.4)$$

avec $e = \frac{E}{N}$ la densité d'énergie par spin. D'après l'expression ci-dessus, $n(E)$ est une somme de nombre indépendants "bien distribués", qui est donc automoyennante d'après le théorème de la limite centrale. Ainsi $n(E) \simeq \langle n(E) \rangle$. Définissons alors l'énergie critique e_c par

$$e_c^2 \equiv \frac{E^2}{N^2} = J^2 \ln 2 \quad (9.5)$$

La densité d'états s'exprime alors selon

$$n(e) \simeq e^{N \frac{e_c^2 - e^2}{J^2}}$$

Ainsi si $|e| < e_c$, il y a un nombre thermodynamique ($\propto N$) d'états d'énergie correspondante, par contre si $|e| > e_c$, $n(E)$ est exponentiellement faible, ce qui nous assure qu'avec probabilité 1, il n'y a qu'un nombre fini d'états ayant une telle énergie.

L'entropie microcanonique s'écrit simplement

$$S(e) = \ln n(e) = \frac{N}{J^2} (e_c^2 - e^2) \Rightarrow s(e) = \ln 2 - (e/J)^2 \quad (9.6)$$

Cette entropie est nulle en dehors de l'intervalle $-e_c, e_c$ (voir figure 9.1).

Pour en déduire l'énergie libre, nous devons d'abord exprimer la température du système en fonction de la densité d'énergie e . Pour cela, écrivons que¹

$$\beta = \frac{1}{T} = \frac{dS}{dE} = -\frac{2E}{NJ^2} = -\frac{2}{J^2}e \text{ pour } -e_c < e < 0$$

Ceci nous permet d'exprimer la température critique du système

$$\beta_c = \frac{1}{T_c} = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{J}$$

La densité d'énergie libre $f = e - Ts$ s'exprime alors selon

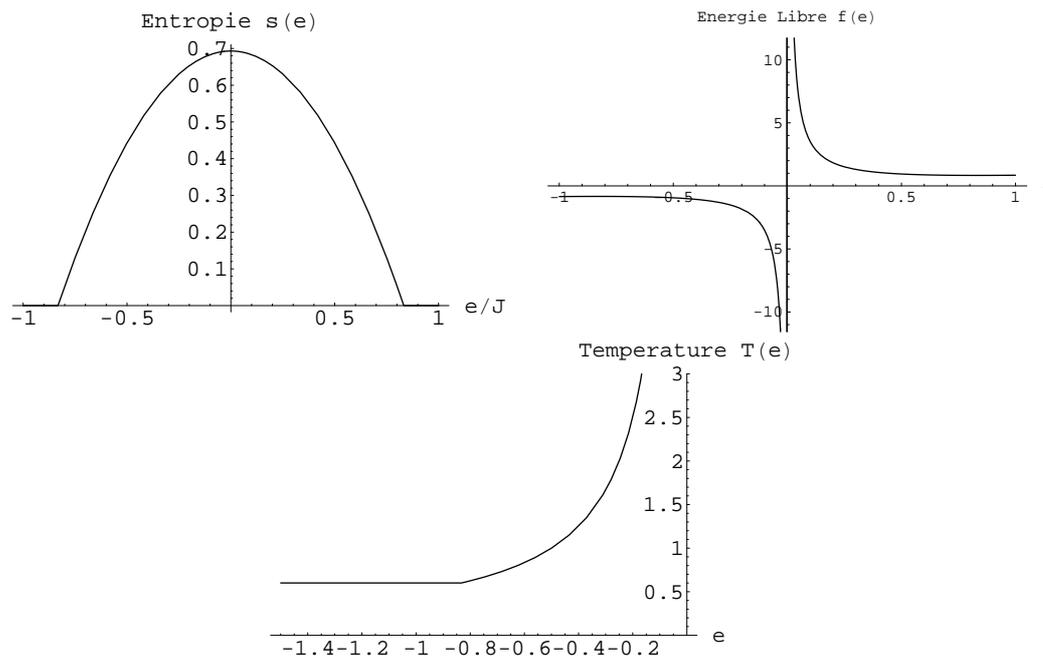
$$f = e + \frac{J^2}{2e} \frac{e_c^2 - e^2}{J^2} = \frac{e}{2} + \frac{e_c^2}{2e}, \quad (9.7)$$

soit en fonction de la température

$$f(T) = -\frac{J^2}{4T} \left(1 + \frac{T^2}{T_c^2} \right) \quad T \geq T_c \quad (9.8)$$

$$= -\frac{J^2}{2T_c} = e_c \quad T \leq T_c \quad (9.9)$$

¹l'énergie doit être négative!

FIG. 9.1: Entropie $s(e)$, énergie libre, et température $T(e)$ du REM, avec $J = 1$.

De même pour l'entropie

$$s(T) = \frac{S(T)}{N} = \frac{J^2}{2} \left(\frac{1}{T_c^2} - \frac{1}{T^2} \right) \quad T \geq T_c \quad (9.10)$$

$$= 0 \quad T \leq T_c \quad (9.11)$$

Ces fonctions sont représentées sur la figure 9.2. Le comportement de l'énergie libre ne particulier est assez inhabituel : sa valeur à basse température est *supérieure* au prolongement de la courbe de haute température. La raison en est le gel du système dans un état d'énergie plus haute que ce prolongement naïf.

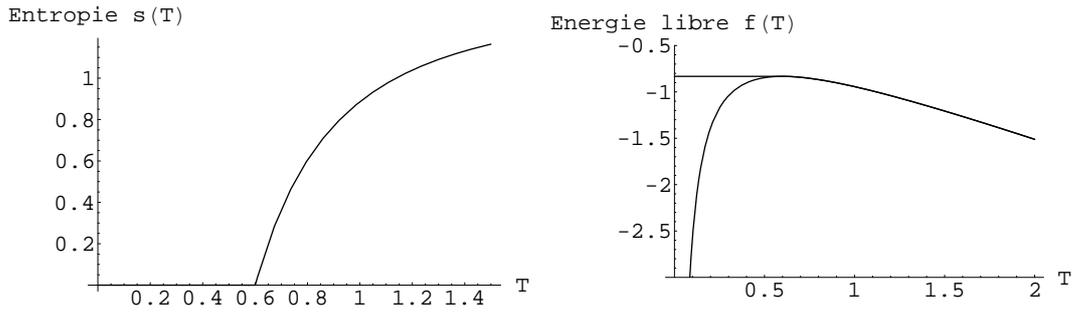
Remarque libre La solution de Derrida[11] utilise l'astuce suivante pour moyennner l'énergie

$$\langle \ln Z \rangle = \int_0^\infty dt \frac{e^{-t} \langle e^{-tZ} \rangle}{t}.$$

9.3 Lien avec la statistique des extrêmes

A basse température, la fonction de partition $Z = \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha}$ est dominée par l'énergie minimale (alors que tous les états contribuent un poids similaire à haute température). De $Z \simeq \exp(-E_{min}/T)$ nous tirons $\langle F \rangle = -\beta \langle \ln Z \rangle \simeq \langle E_{min} \rangle$.

La détermination des propriétés statistiques du minimum E_{min} d'un ensemble de M tirages d'une loi de distribution s'appelle *la statistique des extrêmes*. Nous allons voir que

FIG. 9.2: Entropie et énergie libre $s(T)$, $f(T)$ ($J = 1$).

les propriétés de la phase de basse température du REM sont en grande partie reliée à des propriétés de statistique d'extrêmes[8].

9.3.1 Rappels sur les statistiques d'extrêmes

Considérons une loi de distribution $P(E)$ dont la queue "gauche" (du côté de $-\infty$, ce choix étant ici sans importance) est de la forme

$$P(-E) \simeq_{E \rightarrow \infty} \frac{A}{E^\lambda} e^{-BE^\delta} \quad ; \quad B, \delta > 0. \quad (9.12)$$

A est une constante arbitraire. Définissons $E_{min}^{(M)} = \min(E_\alpha, \alpha = 1, \dots, M)$ où les E_α sont tirés selon la loi (9.12). Rappelons que la densité de probabilité des valeurs plus petite (ou plus grande) que E est définie par

$$P_{<}(E) = \int_{-\infty}^E dE' P(E') = 1 - P_{>}(E), \quad (9.13)$$

qui satisfait

$$\frac{dP_{<}(E)}{dE} = -\frac{dP_{>}(E)}{dE} = P(E). \quad (9.14)$$

Pour qu'une valeur de E_{min} apparaisse, il faut qu'elle soit tirée selon la loi $P(E)$, et que $M - 1$ valeurs supérieures soient tirées selon cette même loi. La loi de distribution de E_{min} satisfait donc (en utilisant (9.14))

$$P_M(E_{min}) = MP(E_{min}) (P_{>}(E))^{M-1} = -\frac{d}{dE_{min}} (P_{>}(E_{min}))^M \quad (9.15)$$

Pour une loi non bornée² telle que (9.12), et dans la limite de grand M , E_{min} est négative et $|E_{min}| \gg 1$, ce qui nous autorise l'approximation suivante

$$(P_{>}(E_{min}))^M = (1 - P_{<}(E_{min}))^M \simeq \exp(-MP_{<}(E_{min})) \quad (9.16)$$

²Il existe d'autres lois pour les extrêmes de variables bornées, ou distribuées selon une loi algébrique.

Définissons maintenant l'échelle d'énergie E_c telle que

$$MP_{<}(E_c) \simeq 1 \quad (9.17)$$

Pour des énergies plus petite que E_c , $P_M(E_{min})$ devient exponentiellement petite, et donc négligeable. A des corrections logarithmiques près, on trouve pour la loi (9.12)

$$\ln M - \ln P_{<}(E_c) \simeq \ln M - \ln P(E_c) \simeq \ln M - B(-E_c)^\delta = 0 \quad (9.18)$$

$$\Rightarrow E_c \simeq - \left(\frac{\ln M}{B} \right)^{\frac{1}{\delta}}. \quad (9.19)$$

Etudions maintenant le comportement de $P_M(E_{min})$ autour de E_c en définissant $E_{min} = E_c + \epsilon$. Dans la limite $|\epsilon| \ll -E_c$, et en utilisant $M \simeq \exp(B(-E_c)^\delta)$, nous obtenons d'après (9.16)

$$(P_{>}(E_{min}))^M \simeq e^{-e^{B(-E_c)^\delta}} e^{-B(-E_c+\epsilon)^\delta} \simeq e^{-e^{B\delta(-E_c)^{\delta-1}\epsilon}}. \quad (9.20)$$

Soit en posant $u = B\delta(-E_c)^{\delta-1}\epsilon$, et à une constante de normalisation près :

$$P_{>}^*(u) = P_{>}(E_c + u/(B\delta(-E_c)^{\delta-1})) \simeq e^{-e^u}$$

En utilisant $P^*(u) \propto \frac{d}{du} P_{>}^*(u)$, nous trouvons une loi de distribution du minimum E_{min} autour de E_c ($e^u = MP(E_{min})$) de la forme

$$P^*(u) = \lambda e^{u-e^u} \quad (9.21)$$

La constante λ est donnée par normalisation. Cette loi de distribution s'appelle la loi de Gumbell. Elle est universelle au sens où elle ne dépend pas des détails de la loi (9.12). Un parallèle peut être fait avec le théorème de la limite centrale, ainsi d'autres classes d'universalité existent. Remarquons pour finir que le maximum de $P^*(u)$ est bien 0, ce qui implique que E_c est la valeur la plus probable du minimum E_{min} .

9.3.2 Retour au REM

Revenons maintenant à notre modèle initial pour lequel $\delta = 2$ et $B = (NJ^2)^{-1}$. La valeur la plus probable du minimum est ainsi

$$E_c = - \left(\frac{\ln M}{B} \right)^{\frac{1}{\delta}} = - (N^2 J^2 \ln 2)^{\frac{1}{2}} = -NJ\sqrt{\ln 2} = Ne_c \quad (9.22)$$

qui est la valeur de l'énergie critique trouvée précédemment. Cette valeur est celle de l'énergie libre dans la phase gelée : ainsi, dans la phase gelée, le système reste piégé dans la configuration d'énergie minimale. Ceci nous permet déjà d'entrevoir le lien avec les statistiques d'extrêmes.

Pour aller plus loin, exprimons la fonction de partition sous la forme

$$Z = \sum_{\alpha=1}^M z_\alpha \quad ; \quad z_\alpha = e^{-\frac{E_\alpha}{T}} \quad (9.23)$$

Dans le régime dominé par les énergies minimales (basse température), nous pouvons approximer $P(E < 0)$ par

$$P(E = E_c + \epsilon) \propto \exp\left(-B(-E_c - \epsilon)^\delta\right) \simeq \exp\left(-B(-E_c)^\delta\right) \exp\left(+B\delta|E_c|^{\delta-1}\epsilon\right) \quad (9.24)$$

$$\propto \exp\left(-B\delta|E_c|^{\delta-1}E\right) \quad (9.25)$$

$$= \text{cte} \exp\left(-\mu\frac{E}{T}\right) \quad (9.26)$$

avec

$$\mu = TB\delta|E_c|^{\delta-1} = 2T\frac{|E_c|}{NJ^2} = \frac{T}{T_c} \text{ avec } \delta = 2, B = (NJ^2)^{-1}. \quad (9.27)$$

La loi correspondante pour z s'obtient à partir de $E = -T \ln z, dz/z = -dE/T$ soit

$$P(z) \simeq_{z \gg 1} \frac{1}{z^{1+\mu}} \quad (9.28)$$

La transition à T_c apparait alors comme la température à laquelle $P(z)$ cesse d'avoir une valeur moyenne. L'écart entre son minimum et le second minimum commence est alors important (du même ordre que ce minimum lui-même) et la somme Z est alors dominée uniquement par cet extremum³ : le système se gèle dans un état unique.

La loi de Gumbell ci-dessus permet également de dériver les corrections de taille finie N de l'énergie libre [8, 11] :

$$\langle e(N) \rangle = \frac{1}{N} \langle E \rangle = -e_c + \frac{B\delta|E_c|^{\delta-1}}{N} \langle u \rangle \simeq -e_c + \frac{2\sqrt{\ln 2}}{NJ} \langle u \rangle. \quad (9.29)$$

9.3.3 Localisation dans l'espace des énergies

D'après ce qui précède, les propriétés de la phase de basse température du REM sont reliées à un problème de localisation dans l'espace des M énergies qui définissent une configuration. Une analogie formelle existe donc avec un problème de localisation d'une particule sur des sites dans l'espace réel. La caractérisation de cette localisation peut donc se faire de façon analogue : un outil utilisé dans le contexte de la localisation électronique est celui des rapports de participation R_q . Si $\psi_{\mathbf{r}}$ est la valeur de la fonction d'onde électronique au site \mathbf{r} , la probabilité de présence de l'électron au site \mathbf{r}_α est donnée par

$$p_{\mathbf{r}_\alpha} = \frac{|\psi_{\mathbf{r}_\alpha}|^2}{\sum_{\mathbf{r}} |\psi_{\mathbf{r}}|^2} \quad (9.30)$$

Cette probabilité est un objet aléatoire, qui possède une probabilité, *a priori* indépendante du site considéré. Les rapports de participation correspondent simplement aux moments de cette loi de distribution :

$$R_q(M) = \langle p_{\mathbf{r}_\alpha}^q \rangle = \left\langle \left(\frac{|\psi_{\mathbf{r}_\alpha}|^2}{\sum_{\mathbf{r}} |\psi_{\mathbf{r}}|^2} \right)^q \right\rangle \quad (9.31)$$

³Voir à ce sujet la discussion des lois de Lévy dans le contexte du théorème de la limite centrale.

L'étude des propriétés des $R_q(M)$ en fonction de la taille du système permet de différencier les différents comportements de la fonction d'onde. En effet, pour une fonction d'onde étendue, $p_{\mathbf{r}_\alpha}$ à un poids équivalent sur chaque site, et vaut donc $p_{\mathbf{r}_\alpha} \simeq M^{-1}$. Les rapports de participation s'annulent alors dans la limite thermodynamique comme $R_q(M) \simeq M^{-q}$. Dans le cas opposé où la fonction d'onde est localisée (fonction δ) sur un seul site \mathbf{r}_0 , les moments $R_q(M)$ deviennent indépendants de q . De façon plus générale, les exposants $\tau(q) = -\ln(R_q(M))/\ln(M)$ permettent de caractériser les cas intermédiaires entre la localisation exponentielle et les fonctions étendues⁴.

Remarque Les rapports de participation sont parfois définis comme la somme sur \mathbf{r} des rapports $R_q(M)$ définis plus haut. Ceci ne fait qu'incrémenter les exposants $\tau(q)$ de 1.

De façon analogue à ce problème de localisation, nous pouvons considérer dans le contexte du REM les grandeurs

$$w_\alpha = \frac{z_\alpha}{\sum_\beta z_\beta} \quad (9.32)$$

et les moments de leur loi de distribution

$$Y_q(M) = \sum_\alpha \langle w_\alpha^q \rangle \quad (9.33)$$

Afin d'utiliser les résultats précédents sur la statistique d'extrêmes, réécrivons w_α sous la forme $w_\alpha = z_\alpha/(z_\alpha + Z_\alpha)$ où $Z_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} z_\beta$. Cette dernière quantité est statistiquement indépendante de z_α , ce qui nous autorise à relier les deux lois de distribution $P(w)dw = P(z)dz$ avec $w^{-1} = 1 + Zz^{-1}$, soit $dw/w^2 = Zz^{-2}dz$. Nous obtenons alors comme loi de distribution de w (en utilisant l'expression asymptotique $P(z) \simeq z^{-1-\mu}$) :

$$P(w) \simeq \lambda(1-w)^{-2} \left(\frac{w}{1-w} \right)^{-1-\mu} = \lambda w^{-1-\lambda} (1-w)^{\mu-1} \quad (9.34)$$

où λ est définie en normant $P(w)$: $M \int_0^1 dw P(w) w = 1$. De (9.34) nous tirons (pour $q > \mu$)

$$Y_q = M \int_0^1 dw P(w) w^q = \frac{\Gamma(q-\mu)}{\Gamma(q)\Gamma(1-\mu)} \simeq 1 - \frac{\Gamma'(q) - \Gamma'(1)}{\Gamma(q)} \frac{T}{T_c} \quad (9.35)$$

Etc. A Finir.

9.4 Solution par la méthode des répliques

9.4.1 La méthode des répliques

La méthode des répliques est une technique, introduite dans ce contexte par Edwards en 75, qui est abondamment employée pour effectuer la moyenne sur le désordre $\langle \ln Z \rangle_d$. L'idée de base de cette méthode consiste à utiliser la propriété

$$\langle \ln Z \rangle_d = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\langle Z^n \rangle_d - 1) \quad (9.36)$$

⁴On parle en particulier de fonction d'onde critique multifractale...

Nous considérons alors les moments $\langle Z^n \rangle_d$ pour tous les n entiers, et prolongeons ensuite le résultat obtenu à $n \rightarrow 0$ (prolongement analytique). Cette limite (non contrôlée) est parfois problématique comme nous le verrons⁵

Cette technique des répliques permet d'aller bien au delà du calcul de $\langle \ln Z \rangle_d$, et de calculer également des valeurs moyennes d'observables. Considérons une grandeur physique (observable) $O[\sigma]$. Sa fonction de corrélation s'exprime selon

$$\langle \langle O[\sigma] \rangle_{th} \rangle_d = \left\langle \frac{\sum_{[\sigma]} O[\sigma] e^{-\beta H[\sigma]}}{\sum_{[\sigma]} e^{-\beta H[\sigma]}} \right\rangle_d \quad (9.37)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \left\langle \sum_{[\sigma]} O[\sigma] e^{-\beta H[\sigma]} \left(\sum_{[\sigma]} e^{-\beta H[\sigma]} \right)^{n-1} \right\rangle_d \quad (9.38)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} O[\sigma^1] \left\langle e^{-\beta \sum_{a=1}^n H[\sigma^a]} \right\rangle_d \quad (9.39)$$

Définissons maintenant le hamiltonien effectif $\tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]$, fonction de la configuration de spins σ_i^a à n composantes ($a = 1, \dots, n$), par

$$e^{-\beta \tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} \equiv \left\langle e^{-\beta \sum_{a=1}^n H[\sigma^a]} \right\rangle_d \quad (9.40)$$

En remarquant que

$$\sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} \left\langle e^{-\beta \sum_{a=1}^n H[\sigma^a]} \right\rangle_d = \sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} e^{-\beta \tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} = 1 + \mathcal{O}(n) \quad (9.41)$$

L'expression de la fonction de corrélation (9.39) prend alors la forme :

$$\langle \langle O[\sigma] \rangle_{th} \rangle_d = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} O[\sigma^1] e^{-\beta \tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]}}{\sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} e^{-\beta \tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]}} \equiv \langle O[\sigma^1] \rangle_{\tilde{H}_n} \quad (9.42)$$

où nous avons défini une notation $\langle \dots \rangle_{\tilde{H}_n}$ pour les fonctions de corrélations du hamiltonien répliqué.

De la même façon, la valeur moyenne sur le désordre de fonction de corrélation disjointe (qui mesurent les fluctuations d'échantillon à échantillon) prend la forme de la limite pour

⁵Il est déjà possible de réaliser ici que le passage des moments $\langle Z^n \rangle_d$ à $\langle \ln Z \rangle_d$ peut se faire lorsque la loi de distribution $P(Z)$ n'est pas trop large. Nous avons vu que dans ce cas elle peut être entièrement décrite par ses moments, et sa connaissance permet de calculer $\langle \ln Z \rangle_d$. Cependant, Z étant une grandeur multiplicative, la prudence est de mise. Nous verrons dans le chapitre suivant des techniques développées pour traiter le cas des lois $P(Z)$ larges.

$n \rightarrow 0$ d'une fonction de corrélation du hamiltonien effectif \tilde{H}_n :

$$\langle\langle O[\sigma] \rangle_{th} \langle O[\sigma] \rangle_{th} \rangle_d = \left\langle \frac{\sum_{[\sigma]} O[\sigma] e^{-\beta H[\sigma]} \sum_{[\sigma]} O[\sigma] e^{-\beta H[\sigma]}}{\sum_{[\sigma]} e^{-\beta H[\sigma]} \sum_{[\sigma]} e^{-\beta H[\sigma]}} \right\rangle_d \quad (9.43)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \sum_{[\sigma^1, \sigma^2]} O[\sigma^1] O[\sigma^2] \left\langle e^{-\beta H[\sigma^1]} e^{-\beta H[\sigma^2]} \left(\sum_{[\sigma]} e^{-\beta H[\sigma]} \right)^{n-2} \right\rangle_d \quad (9.44)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} O[\sigma^1] O[\sigma^2] e^{-\beta \tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]}}{\sum_{[\sigma^1, \dots, \sigma^n]} e^{-\beta \tilde{H}_n[\sigma^1, \dots, \sigma^n]}} \quad (9.45)$$

$$= \langle O[\sigma^1] O[\sigma^2] \rangle_{\tilde{H}_n} \quad (9.46)$$

La formule ci-dessus s'exprime également sous la forme $\lim_{n \rightarrow 0} \langle O[\sigma^a] O[\sigma^b] \rangle_{\tilde{H}_n}$ où a et b sont deux indices de répliques différents. Nous verrons dans la suite qu'il est souvent préférable de considérer des expressions qui font clairement apparaître la symétrie de permutation entre les répliques. Les deux expressions ci-dessus pour les fonctions de corrélation s'expriment alors selon

$$\langle\langle O[\sigma] \rangle_H \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n \langle O[\sigma^a] \rangle_{\tilde{H}_n} \quad (9.47a)$$

$$\langle\langle O[\sigma] \rangle_H \langle O[\sigma] \rangle_H \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{n(n-1)} \sum_{a < b}^n \langle O[\sigma^a] O[\sigma^b] \rangle_{\tilde{H}_n} \quad (9.47b)$$

Les expressions ci-dessus se généralisent aisément aux valeurs moyennes de fonctions de corrélations à plusieurs points.

9.4.2 Solution naïve du REM par les répliques

Le but est donc de calculer les moments de la loi de distribution $P(Z)$:

$$\overline{Z^n} = \overline{\left(\sum_{i=1}^M e^{-\frac{E_i}{T}} \right)^n} \quad (9.48)$$

Exemples. Commençons par regarder le comportement des premiers moments :

$$\overline{Z} = M \overline{e^{-\frac{E}{T}}} = M \int dE (\pi N J^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{E^2}{N J^2}} e^{-\frac{E}{T}} \quad (9.49)$$

$$= e^{N(\ln 2 + \frac{\tilde{\beta}^2}{4})} \text{ avec } \tilde{\beta} = \frac{J}{T} \quad (9.50)$$

De façon similaire, nous obtenons pour les deux moments suivants

$$\overline{Z^2} = \overline{\sum_{i_1, i_2=1}^M e^{-\frac{E_{i_1} + E_{i_2}}{T}}} = M e^{N \tilde{\beta}^2} + M(M-1) e^{N \frac{\tilde{\beta}^2}{2}} \quad (9.51)$$

$$\simeq e^{N(\ln 2 + \tilde{\beta}^2)} + e^{N(2 \ln 2 + \frac{\tilde{\beta}^2}{2})} \quad (9.52)$$

et

$$\overline{Z^3} = M e^{N \frac{9\tilde{\beta}^2}{4}} + 3M(M-1) e^{N \frac{5\tilde{\beta}^2}{4}} + M(M-1)(M-2) e^{N \frac{3\tilde{\beta}^2}{4}} \quad (9.53)$$

$$\simeq e^{N \left(\ln 2 + \frac{9\tilde{\beta}^2}{4} \right)} + e^{N \left(2 \ln 2 + \frac{5\tilde{\beta}^2}{4} \right)} + e^{N \left(3 \ln 2 + \frac{3\tilde{\beta}^2}{4} \right)} \quad (9.54)$$

De façon générale, nous allons utiliser la forme de grand N de $\overline{Z^n}$:

$$\overline{Z^n} \simeq_{N \rightarrow \infty} \exp \left(N G(n, \tilde{\beta}) \right), \quad (9.55)$$

soit une énergie libre

$$f(\beta) = F(\beta)/N = -\frac{1}{N\beta} \langle \ln Z \rangle_{\text{des}} \simeq_{N \rightarrow \infty} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{-1}{n\beta} G(n, \tilde{\beta}). \quad (9.56)$$

Méthode générale

On introduit la fonction caractéristique de la distribution $P(E)$:

$$e^{g(\lambda)} = \int_{-\infty}^{+\infty} P(E) dE e^{-\lambda E} = e^{\frac{NJ^2}{4} \lambda^2}. \quad (9.57)$$

Les valeurs moyennes des $z_i = e^{-E_i/T}$ s'expriment alors en fonction de g :

$$\overline{z_{i_1} \dots z_{i_k}} = \overline{e^{-\beta \sum_{i=1}^M E_i \sum_{\alpha=1}^k \delta(i, i_\alpha)}} = \exp \left[\beta^2 \sum_{i=1}^M g \left(\sum_{\alpha=1}^k \delta(i, i_\alpha) \right) \right] \quad (9.58)$$

Cette formule permet d'exprimer formellement le n ème moment de la fonction de partition :

$$\overline{Z^n} = \sum_{i_1 \dots i_n=1}^M \exp \left[\beta^2 \sum_{i=1}^M g \left(\sum_{\alpha=1}^n \delta(i, i_\alpha) \right) \right] \quad (9.59)$$

$$= \sum_{i_1 \dots i_n=1}^M \exp \left[\frac{N\tilde{\beta}^2}{4} \sum_{i=1}^M \sum_{\alpha, \gamma=1}^n \delta(i, i_\alpha) \delta(i, i_\gamma) \right] \quad (9.60)$$

$$= \sum_{i_1 \dots i_n=1}^M \exp \left[\frac{N\tilde{\beta}^2}{4} \sum_{\alpha, \gamma=1}^n Q_{\alpha\gamma} \right] \quad (9.61)$$

Pour analyser cette somme, nous avons introduit la notation habituelle dans les solutions de champ moyen de modèle de verres de spins :

$$Q_{\alpha\gamma} = \delta(i_\alpha i_\gamma). \quad (9.62)$$

Cette matrice est appelée *matrice de recouvrement* entre deux répliques (configuration) du système, ici caractérisée par une seule énergie indexée par i_α . Cette matrice est de taille $n \times n$, symétrique, est ici à valeur 0 ou 1. Nous pouvons exprimer la somme (9.61) ci-dessus

en fonction du nombre $\mathcal{N}(N, Q)$ de configurations $i_1 \dots i_n$ correspondant à une matrice de recouvrement Q donnée :

$$\overline{Z}^n = \sum_Q \mathcal{N}(N, Q) \exp \left[\frac{N\tilde{\beta}^2}{4} \sum_{\alpha, \gamma=1}^n Q_{\alpha\gamma} \right] \quad (9.63)$$

Nous allons utiliser une méthode de point col à grand N , en utilisant la propriété $\mathcal{N}(N, Q) \simeq \exp N\lambda(Q)$. En effet à n fixé, le nombre de matrices Q possibles est $2^{n(n-1)/2}$, pour un nombre exponentiel en N de configurations possibles : $M^n = 2^{Nn}$.

Solution symétrique.

La solution la plus simple à chercher consiste à se restreindre aux matrices Q pour lesquelles toutes les répliques sont équivalentes, c'est-à-dire

$$Q_{\alpha\alpha} = 1 \quad ; \quad Q_{\alpha\neq\gamma} = q_0. \quad (9.64)$$

Il nous reste donc à considérer les deux solutions $q_0 = 0, 1$.

- Solution $q_0 = 0$. Dans ce cas, il a $\mathcal{N}_0(N) = M(M-1)\dots(M-n+1) \simeq 2^{Nn}$ configurations correspondantes, et $\sum_{\alpha, \gamma} Q_{\alpha, \gamma} = n$. Nous en tirons le poids correspondant dans la somme (9.63) :

$$G_0(n, \tilde{\beta}) = n \left(\ln 2 + \frac{\tilde{\beta}^2}{4} \right) \quad (9.65)$$

- Solution $q_0 = 1$. Cette solution correspond au cas où toutes les configurations sont identiques, donc $\mathcal{N}_0(N) = M = 2^N$, et $\sum_{\alpha, \gamma} Q_{\alpha, \gamma} = n^2$, d'où nous tirons

$$G_1(n, \tilde{\beta}) = \ln 2 + n^2 \frac{\tilde{\beta}^2}{4} \quad (9.66)$$

Définissons la température critique $\tilde{\beta}_c(n) = 4 \ln 2 / n$ telle que $G_0(n, \tilde{\beta}_c) = G_1(n, \tilde{\beta}_c)$, nous obtenons aisément que pour $n \geq 1$, $G_0(n, \tilde{\beta})$ domine à haute température et $G_1(n, \tilde{\beta})$ à basse température $\tilde{\beta} > \tilde{\beta}_c(n)$ (voir la figure 9.3). Cette solution est intuitivement acceptable car elle correspond à des répliques libres les unes par rapport aux autres (solution “recuite”) à haute température, et des répliques corrélées les unes aux autres par le désordre à basse température. Par contre, la situation est inversée dans la limite $n \rightarrow 0$: pour $n < 1$, c'est maintenant $G_0(n, \tilde{\beta})$ qui domine à basse température. Cette solution n'a donc pas de sens physique.

De plus, nous sommes en face d'un autre problème technique : dans la limite $n \rightarrow 0$, $\tilde{\beta}_c(n) \rightarrow 0$, autrement dit, la seule solution qui survit est celle de “haute température” $G_1(n, \tilde{\beta})$. Or cette solution ne correspond pas à une continuation analytique définie ($\overline{Z}^n - 1 \rightarrow 1$ et non 0). La solution à ce problème consiste à conserver, dans la limite $n \rightarrow 0$, les solutions de point col minimales, au lieu des maximales. Cela revient à dire que la somme (9.63) sera dominée dans la limite $n \rightarrow 0$ par les solutions qui minimisent l'exponentiel. Cette convention inhabituelle, imposée par la technique des répliques, doit être reliée

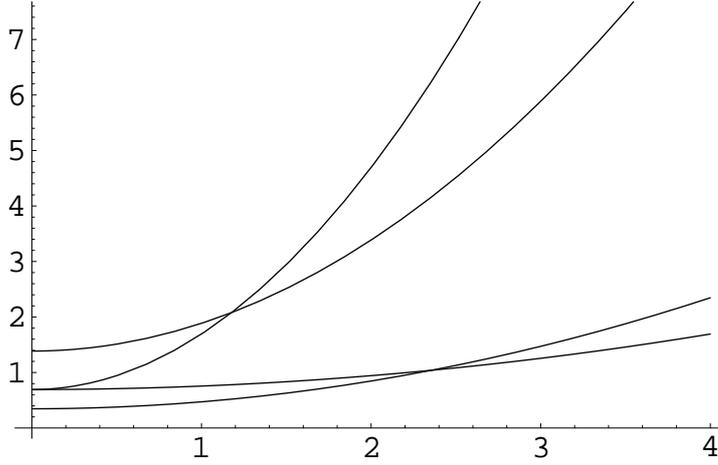


FIG. 9.3: Fonctions $G_0(n, \tilde{\beta})$ et $G_1(n, \tilde{\beta})$ correspondant aux solutions symétriques du REM, tracées pour $n > 1$ et $n < 1$. Alors que la solution G_1 domine à basse température $\tilde{\beta} \geq \tilde{\beta}_c(n)$ tant que $n > 1$, c'est la solution G_1 qui devient dominante pour $n < 1$, conduisant à un aberration physique et technique dans la limite $n \rightarrow 0$.

à la particularité de la limite $n \rightarrow 0$ de “matrices” à n composantes (correspondant à $n(n-1)/2 < 0$ directions possibles autour de chaque point col). Dans notre exemple, cela revient à supposer que les solutions acceptables à $n > 1$, le demeurent dans cette limite. Avec cette convention, la seule solution qui survit dans la limite $n \rightarrow 0$ est maintenant une solution acceptable de “haute température” : $G_0(n, \tilde{\beta})$. En intervertissant les limites $N \rightarrow \infty$ et $n \rightarrow 0$, nous obtenons l'expression de l'énergie libre :

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\ln Z} = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} (\overline{Z^n} - 1) \quad (9.67)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{nN} (\overline{Z^n} - 1) \quad (9.68)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (G_0(n, \tilde{\beta}) - 1) \quad (9.69)$$

$$= \ln 2 + \frac{\tilde{\beta}^2}{4}. \quad (9.70)$$

Nous retrouvons donc la bonne solution du REM à haute température, ce qui valide la convention adoptée ci-dessus. Par contre, la transition vitreuse associée au gel du système dans les états d'énergies extrêmes n'est pas capturé par cette solution symétrique. Il faut pour cela chercher une solution qui brise la symétrie des répliques, selon l'ansatz de Parisi.

9.4.3 Brisure de symétrie des répliques

Formalisme général.

La solution correcte de basse température est obtenue par l'ansatz de Parisi[14]. Au lieu de considérer des matrices Q^{ab} symétriques, on va considérer des matrices définies par bloc. Dans la structure la plus simple, dite à 1 pas de brisure, chaque bloc aura une taille m_1 . Il y en a donc n/m_1 . Un exemple de telle matrice est donné par l'exemple suivant :

$$Q = \begin{pmatrix} \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & q_1 \\ q_1 & 1 \end{bmatrix}}^{m_1} & q_0 & q_0 \\ q_0 & \begin{bmatrix} 1 & q_1 \\ q_1 & 1 \end{bmatrix} & q_0 \\ q_0 & q_0 & \begin{bmatrix} 1 & q_1 \\ q_1 & 1 \end{bmatrix} \end{pmatrix} \quad (9.71)$$

Il convient ici de réaliser que cette représentation simple représente également toutes les matrices obtenues à partir de celle-ci par permutation des indices $a = 1, \dots, n$. Une façon de se représenter ces matrices est de réaliser que la structure ci-dessus est obtenue en partitionnant l'ensemble des indices $1 \dots n$ en n/m groupes de taille m . Q^{ab} vaut alors q_1 si a et b appartiennent au même groupe, q_0 sinon.

Cette structure peut ensuite être complétée de manière récursive : chaque bloc diagonal est ainsi divisée en m_1/m_2 groupes de tailles m_2 . Et le processus peut être ainsi conduit jusqu'au niveau k , caractérisé par les tailles $m_i : 1 \leq m_k \leq m_{k-1} \leq \dots \leq m_1 \leq n$ et les $k+1$ valeurs q_0, q_1, \dots, q_k . Ceci revient donc à partitionner l'ensemble des indices $1 \dots n$ en une série de groupes emboîtés de "profondeur" maximale k . La valeur de Q^{ab} est donnée par q_{k_0} où k_0 est la profondeur maximale des groupes contenant a et b . Un exemple de matrice à 2 pas de brisure de symétrie des répliques est donné par

$$Q = \begin{pmatrix} \overbrace{\begin{bmatrix} \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & q_2 \\ q_2 & 1 \end{bmatrix}}^{m_2} & q_1 \\ q_1 & \begin{bmatrix} 1 & q_2 \\ q_2 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix}}^{m_1} & q_0 & q_0 \\ q_0 & \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & q_2 \\ q_2 & 1 \end{bmatrix} & q_1 \\ q_1 & \begin{bmatrix} 1 & q_2 \\ q_2 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} & q_0 \\ q_0 & q_0 & \underbrace{\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & q_2 \\ q_2 & 1 \end{bmatrix} & q_1 \\ q_1 & \begin{bmatrix} 1 & q_2 \\ q_2 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix}}_{m_1} \end{pmatrix} \quad (9.72)$$

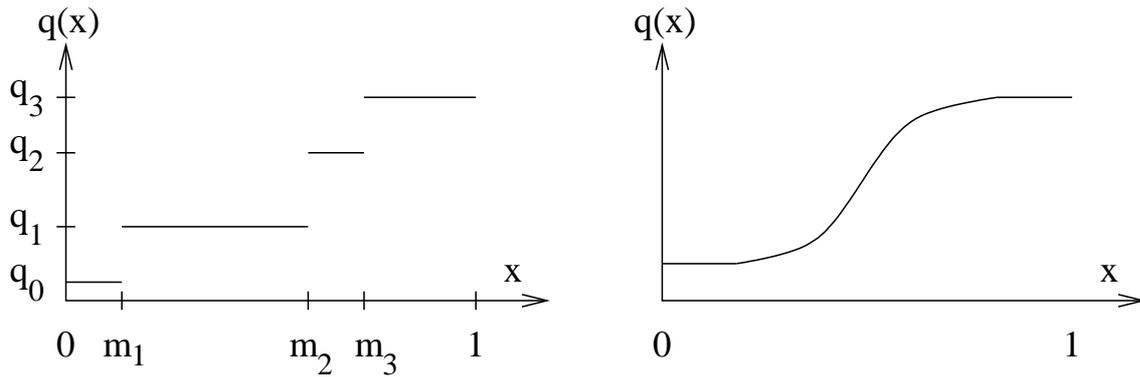


FIG. 9.4: Représentation de la fonction $q(x)$ dans le cas d'une brisure de symétrie des répliques à $k = 3$ pas (à gauche), et pour une brisure continue de symétrie des répliques (à droite).

La partie délicate et déroutante de cette technique est la limite $n \rightarrow 0$. En effet, après s'être restreint aux séries d'entiers $m_0 = n, m_1, \dots, m_k$ multiples les uns des autres, nous devons considérer la limite opposée de n petit. Nous nous reposons alors sur une série de techniques dues en grande partie à Parisi, et qui permettent d'obtenir des résultats pour le champ moyen, qui ont été confirmés par des techniques exactes récemment. Bien évidemment, ces techniques ne sont pas rigoureuses, mais elles ont l'énorme avantage de permettre de dériver des résultats sur ce problème complexe. Nous allons commencer par considérer ces techniques avant de leur trouver une interprétation par la suite.

Dans la limite $n \rightarrow 0$, la suite $1 \leq m_k \leq m_{k-1} \leq \dots \leq m_1 \leq n$ doit être remplacée par $1 \geq m_k \geq m_{k-1} \geq \dots \geq m_1 \geq n = 0$. Une façon commode de représenter les paramètres $\{m_i, q_i\}$ de la matrice Q dans cette limite $n \rightarrow 0$ est d'introduire la fonction $q(x)$ définie sur l'intervalle $[0, 1]$, et définie par

$$q(x) = q_i \text{ si } m_{i-1} \leq x \leq m_i \quad (9.73)$$

avec la convention $m_0 = 0$.

La limite de $k \rightarrow \infty$, dite de brisure continue de symétrie des répliques, est aisément représentée avec cette fonction $q(x)$: dans cette limite, la fonction en escalier devient une fonction continue (Fig. 9.4).

Solution du REM à basse température.

Nous allons chercher une solution du REM à un 1 pas de brisure de symétrie des répliques. La matrice Q est maintenant paramétrée par la taille m des sous groupes de répliques, et les valeurs q_0, q_1 des éléments de la matrice Q respectivement entre sous groupes, et à l'intérieur d'un groupe. Par définition $q_0 \neq q_1$ sinon nous retrouvons une solution symétrique, et dans le cas présent $q_0, q_1 = 0, 1$. Nous devons donc considérer le cas $q_1 = 1$ et $q_0 = 0$. $\mathcal{N}(Q)$ compte le nombre de choix de n/m énergies, correspondant

aux sous-groupes de répliques, parmi les $M = 2^N$ énergies possibles, soit

$$\mathcal{N}(Q) = M(M-1) \dots \left(M - \frac{n}{m} + 1\right) \simeq e^{N \frac{n}{m} \ln 2}. \quad (9.74)$$

La somme de éléments de Q donne $\tilde{\beta}^2/4 \sum_{\alpha, \gamma} Q^{\alpha\beta} = nm\tilde{\beta}^2/4$, ce qui nous donne

$$G_{RSB}(n, m, \tilde{\beta}) = \frac{n}{m} \ln 2 + mn \frac{\tilde{\beta}^2}{4}. \quad (9.75)$$

Nous devons maintenant chercher le minimum de cette fonction, dans la limite $n \rightarrow 0$, qui correspond à $0 < m < 1$. Ce minimum est atteint pour

$$m_c^2 = \frac{4 \ln 2}{\tilde{\beta}^2} = \left(\frac{\beta_c}{\beta}\right)^2 \text{ avec } \beta_c = J2\sqrt{\ln 2}. \quad (9.76)$$

La température critique ainsi définie est bien celle du REM. Nous obtenons ainsi pour le minimum :

$$G_{RSB}(n, m_c, \tilde{\beta}) = nm_c \left(\frac{\ln 2}{m_c^2} + \frac{\tilde{\beta}^2}{4} \right) = nm_c \frac{\tilde{\beta}^2}{2} = \sqrt{\ln 2} \tilde{\beta}. \quad (9.77)$$

L'énergie libre correspondante $f = J\sqrt{\ln 2}$ est bien celle de la phase vitreuse. De plus, cette solution est valable pour $m < 1$, qui correspond bien à la région de basse température $\beta > \beta_c$. Ceci démontre que le gel du système à basse température est bien capturé par l'ansatz de Parisi de brisure des répliques.

Complément Solution originale de Derrida[11]. Considérons la somme (9.59) qui exprime le moment n de $P(Z)$. Cette somme est dominée par des termes différents selon la température.

- A haute température ($T > T_c$), cette somme est dominée par le terme naturel $i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n$. On trouve aisément

$$\overline{Z^n} \simeq M(M-1) \dots (M-n+1) e^{ng(\beta)} \simeq e^{n(\ln M + g(1/T))} \quad (9.78)$$

d'où l'on tire

$$\overline{f} = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\overline{Z^n} - 1) = - \frac{T}{N} (\ln M + g(1/T)) \quad (9.79)$$

En explicitant la fonction g , on retrouve $f = -\frac{J^2}{4T} \left(1 + \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)$. On remarquera que dans ce cas, d'après le calcul de \overline{Z} précédent, nous avons l'égalité (dans la limite thermodynamique) $\overline{\ln Z} = \ln \overline{Z}$. Le désordre peut donc être considéré comme une variable dynamique (et non plus gelé). Ceci signifie que la frustration est non pertinente.

- Pour trouver le terme dominant à basse température, revenons sur l'expression générale (9.59). Introduisons ν_p le nombre de groupes de p indices identiques $i_{\alpha_1}, \dots, i_{\alpha_p}$ parmi $i_1 \dots i_n$. Cette variable vérifie les indentités suivantes :

$$\sum_{p=0}^n p\nu_p = n \text{ et } \sum_{p=0}^n \nu_p = M \quad (9.80)$$

Ces égalités impliquent naturellement que ν_0 est d'ordre M , ce qui autorise à écrire :

$$\overline{Z}^n \simeq \sum_{\{\nu_p\}} \frac{M!}{\prod_{p=0}^n \nu_p!} \frac{n!}{\prod_{p=0}^n (p!)^{\nu_p}} \exp\left(\frac{NJ^2}{4T^2} \sum_{p=1}^n p^2 \nu_p\right) \quad (9.81)$$

$$= \sum_{\{\nu_p\}} \frac{n!}{\prod_{p=0}^n \nu_p! \prod_{p=0}^n (p!)^{\nu_p}} \exp\left(N \sum_{p=1}^n \nu_p \left(\ln 2 + \frac{J^2}{4T^2} p^2\right)\right) \quad (9.82)$$

Pour trouver le terme dominant de cette somme dans la limite thermodynamique, nous devons donc maximiser la somme $\sum_{p=1}^n \nu_p \left(\ln 2 + \frac{J^2}{4T^2} p^2\right)$ avec la contrainte $\sum_{p=1}^n \nu_p p = n$. On montre alors que les extrema correspondent aux solutions pour lesquelles un seul des ν_p est non nul⁶. Deux cas doivent alors être considérés :

- A haute température : $T > \sqrt{n}T_c$ le maximum est atteint pour $\nu_1 = n$ et $\nu_{p \neq 1} = 0$. Le comportement dominant vaut alors

$$\overline{Z}^n \simeq \exp\left(nN \ln 2 \left(1 + \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)\right) \quad (9.83)$$

- A basse température : $T < \sqrt{n}T_c$ le maximum est atteint pour $\nu_n = 1$ et $\nu_{p \neq n} = 0$. De la croissance avec n du moment

$$\overline{Z}^n \simeq \exp\left(N \ln 2 \left(1 + n^2 \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)\right), \quad (9.84)$$

nous comprenons l'origine du problème à basse température : les moments de la distribution de la fonction de partition $P(Z)$ croissent trop vite pour pouvoir caractériser de manière non-univoque celle-ci. Le prolongement analytique $n \rightarrow 0$ pose donc problème. Nous allons voir plus loin cependant qu'il existe une façon de retrouver le bon résultat par un ansatz astucieux.

Ce calcul par la méthode des répliques permet donc d'obtenir facilement le bon comportement de l'énergie libre f à haute température. Il permet également d'obtenir des informations plus fines telles que ...

A finir.

⁶On peut trouver cette solution en recherchant le maximum naïvement pour une variable continue. En posant $\nu_p = n/p = 1/x$, le maximum de la fonction $1/x + n^2 x (T_c/T)^2$ est obtenu pour $x^* = T/(nT_c)$. Il correspond à la solution $p = T/T_c, \nu_p = nT_c/T$.

10 Solution du champ moyen des verres de spins d'Ising

Le but de ce chapitre est de présenter la technique de la brisure de symétrie des répliques de Parisi sur un exemple où elle permet d'obtenir la solution exacte. Nous étudierons donc la solution de champ moyen du modèle dit de "p-spin", c'est-à-dire avec une interaction à p spins au lieu de 2 dans le modèle de Sherrington-Kirkpatrick. Nous verrons que l'intérêt dans ce modèle vient de ce qu'il fournit une formulation du REM dans laquelle les degrés de liberté sont des spins. Les techniques d'analyses seront donc similaires à celles utilisables sur le modèle de Sherrington-Kirkpatrick.

10.1 Modèles de champ moyen

Le modèle naturel de verres de spin sur réseau (avec interaction de courte portée) est le modèle d'Edwards-Anderson[3] :

$$H_{EA} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \text{ avec } P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} e^{-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}} \quad (10.1)$$

Une approche de champ moyen de ce modèle revient à trouver la solution du modèle dans lequel les spins sont tous connectés les uns aux autres, dit modèle de Sherrington-Kirkpatrick[16] :

$$H_{SK} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \text{ avec } P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} e^{-\frac{J_{ij}^2 N}{2J^2}}. \quad (10.2)$$

Le facteur N dans la loi de distribution est introduit pour conserver une énergie intensive dans ce modèle. En effet, la variance de l'énergie est donnée par (l'énergie moyenne d'une configuration est nulle)

$$\langle E^2 \rangle = \sum_{ijkl} \langle J_{ij} J_{kl} \rangle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l = \langle J_{ij}^2 \rangle \frac{N(N-1)}{2}. \quad (10.3)$$

Or pour une grandeur extensive, cette variance devrait être d'ordre N . Il est donc d'usage de choisir une variance des couplages

$$\langle J_{ij}^2 \rangle = \frac{J^2}{N}, \quad (10.4)$$

soit pour une distribution gaussienne

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} e^{-\frac{J_{ij}^2 N}{2J^2}}. \quad (10.5)$$

Une extension naturelle de ce modèle de Sherrington-Kirkpatrick est le modèle dit p-spin :

$$H_{p\text{-spin}} = - \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_p} - h \sum_i \sigma_i \quad (10.6)$$

avec

$$P(J_{i_1 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi J^2 p!}} e^{-\frac{J_{i_1 \dots i_p}^2 N^{p-1}}{J^2 p!}}. \quad (10.7)$$

Ce modèle extrapole entre le modèle SK pour $p = 2$, et le modèle d'énergies aléatoires (REM) pour $p = \infty$. Dans cette limite, la solution est connue exactement (voir le chapitre précédent). Nous verrons comment obtenir une solution de ce modèle à p grand, qui redonne la solution exacte du REM lorsque $p \rightarrow \infty$. Cette méthode de la brisure de symétrie des répliques nous permettra alors de trouver la solution du modèle SK.

10.2 Lien entre le modèle p-spin et le REM

Commençons par considérer les énergies E des différentes configurations de spins dans le modèle p-spin. Ces énergies sont évidemment de moyenne nulle, et de variance (les $J_{i_1 \dots i_p}$ sont indépendants les uns des autres) :

$$\overline{E^2} = \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} \frac{J^2 p!}{N^{p-1}} = \frac{J^2 p!}{N^{p-1}} \frac{N^p}{p!} = NJ^2. \quad (10.8)$$

Notons que ce résultat est indépendant de p . Ce qui n'est pas le cas des corrélations entre énergies de 2 configurations différentes. En effet, considérons deux configurations $\{\sigma_i^{(1)}\}$ et $\{\sigma_i^{(2)}\}$ d'énergies respectives $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$. La probabilité d'occurrence conditionnelle de ces deux énergies s'écrit

$$P(E_1, \{\sigma_i^{(1)}\}; E_2, \{\sigma_i^{(2)}\}) = \overline{\delta(E_1 - H[\{\sigma_i^{(1)}\}]) \delta(E_2 - H[\{\sigma_i^{(2)}\}])} \quad (10.9)$$

$$= \int d[J] P[J] \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \quad (10.10)$$

$$\times e^{i\lambda_1 (E_1 + \sum_{J_{i_1 \dots i_p}} \sigma_{i_1}^{(1)} \dots \sigma_{i_p}^{(1)})} e^{i\lambda_2 (E_2 + \sum_{J_{i_1 \dots i_p}} \sigma_{i_1}^{(2)} \dots \sigma_{i_p}^{(2)})}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} \quad (10.11)$$

$$\times e^{i\lambda_1 E_1 + i\lambda_2 E_2} e^{-\frac{J^2 p!}{4N^{p-1}} \sum_{i_1 \dots i_p} (\lambda_1 \sigma_{i_1}^{(1)} \dots \sigma_{i_p}^{(1)} + \lambda_2 \sigma_{i_1}^{(2)} \dots \sigma_{i_p}^{(2)})^2}.$$

Nous pouvons alors développer la somme sur les spins

$$\begin{aligned} & \sum_{i_1 \dots i_p} \left(\lambda_1 \sigma_{i_1}^{(1)} \dots \sigma_{i_p}^{(1)} + \lambda_2 \sigma_{i_1}^{(2)} \dots \sigma_{i_p}^{(2)} \right)^2 \\ &= \frac{N^p}{p!} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) + 2\lambda_1 \lambda_2 \sum_{i_1 \dots i_p} \left(\sigma_{i_1}^{(1)} \sigma_{i_1}^{(2)} \right) \dots \left(\sigma_{i_p}^{(1)} \sigma_{i_p}^{(2)} \right) \end{aligned} \quad (10.12)$$

$$= \frac{N^p}{p!} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) + 2\lambda_1 \lambda_2 \frac{N^p}{p!} q_{12}^p \quad (10.13)$$

Dans cette dernière expression, nous avons introduit la notion de recouvrement q_{12} entre deux configurations de spins

$$q_{12} = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^{(1)} \sigma_i^{(2)} \quad (10.14)$$

Cette grandeur prendra tout son sens dans la suite de notre étude, mais nous pouvons dès à présent lui associer une notion de distance entre configurations

$$d_{12} = \frac{1}{2N} \sum_i \left(\sigma_i^{(1)} - \sigma_i^{(2)} \right)^2 = (1 - q_{12}). \quad (10.15)$$

La probabilité croisée (10.9) s'exprime à l'aide de ce recouvrement selon

$$\begin{aligned} & P(E_1, E_2, \{\sigma_i^{(1)}\}, \{\sigma_i^{(2)}\}) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_2}{2\pi} e^{i\lambda_1 E_1 + i\lambda_2 E_2} e^{-\frac{J^2 N}{4} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + 2\lambda_1 \lambda_2 q_{12}^p)} \end{aligned} \quad (10.16)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{2\pi} e^{iu(E_1 + E_2) + iv(E_1 - E_2)} e^{-\frac{J^2 N}{4} (2(u^2 + v^2) + (u^2 - v^2)2q_{12}^p)} \quad (10.17)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{2\pi} e^{iu(E_1 + E_2) + iv(E_1 - E_2)} e^{-\frac{J^2 N}{2} (u^2(1 + q_{12}^p) + v^2(1 - q_{12}^p))} \quad (10.18)$$

$$= \sqrt{N\pi J^2 (1 + q_{12}^p)} e^{-\frac{(E_1 + E_2)^2}{2N J^2 (1 + q_{12}^p)}} \sqrt{N\pi J^2 (1 - q_{12}^p)} e^{-\frac{(E_1 - E_2)^2}{2N J^2 (1 - q_{12}^p)}} \quad (10.19)$$

Les énergies de deux configurations de spins $\{\sigma_i^{(1)}\}$ et $\{\sigma_i^{(2)}\}$ dans le même environnement désordonné sont donc naturellement corrélées entre elle. Cette corrélation dépend du nombre de spins à retourner pour aller d'une configuration à l'autre, paramétrisée par la distance d_{12} ou encore le recouvrement entre configurations q_{12} . Cependant, pour deux configurations macroscopiquement différentes (qui diffèrent par une fraction non nulle de leurs spins), alors $|q_{12}| < 1$. Dans ce cas, le résultat ci-dessus montre aisément que

$$\lim_{p \rightarrow \infty} P(E_1, E_2, q_{12}) = P(E_1)P(E_2). \quad (10.20)$$

Par contre des états similaires ($q = 1$) ont tous la même énergie dans cette limite : $P(E_1, E_2, q = 1) = \delta(E_1 - E_2)P(E_1)$. Ainsi, dans la limite où p diverge, le modèle p-spin se ramène exactement au REM : un modèle dans lequel les énergies des états sont distribuées aléatoirement et indépendamment les unes des autres. Cette limite servira de pierre de touche à l'approche moins rigoureuse qui suit.

10.3 Solution du modèle p-spin et brisure de symétrie des répliques

10.3.1 Expression générale de \overline{Z}^n

Nous allons donc utiliser la méthode des répliques pour obtenir la solution du modèle p-spin dans la limite de grand p . Le but de cette partie est donc d'obtenir une expression pour le moment d'ordre n de la loi de distribution de la fonction de partition Z :

$$\overline{Z}^n = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{\{i_1 \dots i_p\}} dJ_{i_1 \dots i_p} P(J_{i_1 \dots i_p}) \text{Tr}_{\sigma_i} \exp \beta \sum_{a=1}^n \left(\sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq n} J_{i_1 \dots i_p} \sigma_{i_1}^a \dots \sigma_{i_p}^a + h \sum_i \sigma_i^a \right) \quad (10.21)$$

Effectuons dès à présent la moyenne sur le désordre. Son effet immédiat est de coupler les répliques différentes :

$$\overline{Z}^n = \text{Tr}_{\Sigma} \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 p!}{4N^{p-1}} \sum_{a,b=1}^n \sum_{1 \leq i_1 \leq i_p \leq n} \sigma_{i_1}^a \dots \sigma_{i_p}^a \sigma_{i_1}^b \dots \sigma_{i_p}^b + \beta h \sum_{a=1}^n \sum_i \sigma_i^a \right) \quad (10.22)$$

A ce stade, il est commode d'introduire le recouvrement entre répliques

$$Q^{ab} = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^a \sigma_i^b. \quad (10.23)$$

Les sommes sur les spins dans le hamiltonien répliqué s'exprime alors en fonction uniquement de¹ Q :

$$\sum_{1 \leq i_1 \leq i_p \leq n} \sigma_{i_1}^a \dots \sigma_{i_p}^a \sigma_{i_1}^b \dots \sigma_{i_p}^b = \begin{cases} \frac{N^p}{p!} (Q^{ab})^p & \text{si } a \neq b \\ \frac{N^p}{p!} & \text{si } a = b \end{cases}$$

Le moment de $P(Z)$ s'exprime ainsi sous la forme

$$\overline{Z}^n = \text{Tr}_{\Sigma} \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 N}{4} \left(n + \sum_{a \neq b} (Q^{ab})^p \right) + \beta h \sum_i \sum_a \sigma_i^a \right) \quad (10.24)$$

Comme pour tout problème avec des interactions à p corps (la seule complication est ici la nature vectorielle de Q^{ab}), nous découplons l'interaction en Q^p à l'aide d'un champ

¹les termes à $i_k = i_l$ contribuent un terme sous dominant dans la limite de grand N : $\sum_{i \neq j} \sigma_i^a \sigma_i^b \sigma_j^a \sigma_j^b = N^2 Q^{ab} - N$. On peut donc les inclure ou non sans préjudice pour le résultat final.

auxiliaire (multiplicateur de Lagrange) :

$$\exp\left(\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \sum_{a<b} (Q^{ab}(\Sigma))^p\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{a<b} d\tilde{Q}^{ab} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \prod_{a<b} \frac{d\lambda^{ab}}{2\pi} e^{\frac{1}{2}N\beta^2 J^2 \sum_{a<b} (\tilde{Q}^{ab})^p} e^{N\lambda^{ab}(Q^{ab}(\Sigma) - \tilde{Q}^{ab})} \quad (10.25)$$

Cette expression permet une écriture du moment de $P(Z)$ sous la forme

$$\overline{Z^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{a<b} d\tilde{Q}^{ab} \int_{i\infty}^{+i\infty} \prod_{a<b} \frac{d\lambda^{ab}}{2\pi} e^{-N G(\tilde{Q}^{ab}, \lambda^{ab})} e^{\frac{1}{4}n\beta^2 J^2 N} \quad (10.26)$$

où la fonction G est définie d'après (10.25) par

$$G(\tilde{Q}^{ab}, \lambda^{ab}) = -\frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{a \neq b} (\tilde{Q}^{ab})^p + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \lambda^{ab} \tilde{Q}^{ab} - \ln \text{Tr}_{\sigma^a} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \lambda^{ab} \sigma^a \sigma^b + \beta h \sum_a \sigma^a\right) \quad (10.27)$$

Nous pouvons maintenant appliquer la méthode du col habituelle dans la limite thermodynamique où $N \rightarrow \infty$. Dans cette limite, l'exponentielle de $N G$ est dominée par les points col de la fonction G , et l'énergie libre s'obtient alors par les valeurs de G à ces points col :

$$\beta \bar{f} = \beta \frac{\overline{F}}{N} = \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{G}{n} - \frac{\beta^2 J^2}{4} \right) \quad (10.28)$$

Remarque : la hessienne autour du point col possède $n(n-1)/2$ vecteurs propres. Dans la limite $n \rightarrow 0$, elle devient donc de dimension négative ! Ceci est associé à un curieux résultat : au lieu de considérer les minima de G à n fini (≤ 1), il convient de considérer les maxima. Le résultat correct est ainsi obtenu. Cette règle est confirmée par un théorème obtenu par Guerra en 2002.

Il est impossible de déterminer les points col de la fonction G simplement. Pour aller plus loin, nous allons nous restreindre à certains sous-espace de l'ensemble des \tilde{Q}^{ab} et rechercher les maxima correspondants, en espérant qu'il s'agit des bons. Cela revient à faire des ansatz pour la forme de la matrice Q^{ab} . Parisi a proposé une forme de matrice particulière, ainsi que sa paramétrisation dans la limite $n \rightarrow 0$, qui capture correctement la bonne solution. Il s'agit de la notion de brisure de symétrie des répliques. Mais commençons par considérer l'ansatz le plus naturel, correspondant à des matrices \tilde{Q}^{ab} invariantes par permutation des répliques.

10.3.2 Solution symétrique

Telle que nous les avons introduites, les n répliques de Z sont parfaitement équivalentes les unes aux autres. Il n'y a donc *a priori* aucune raison d'en privilégier certaines, et la solution naturelle correspond à des matrices \tilde{Q}^{ab} invariantes par permutations des indices

a et b . De telles matrices sont paramétrisées par deux nombres : un pour la diagonale, et un pour les autres termes. Dans notre cas, le terme diagonal est constant et égal à 1 par construction (voir plus haut la définition du recouvrement entre répliques). Le seul nombre q qui paramétrise donc \tilde{Q}^{ab} est $q = \tilde{Q}^{a \neq b}$. De la même façon, la matrice λ^{ab} est paramétrisée par $\lambda^{a \neq b} = \lambda$.

Considérons maintenant la fonction G correspondant à cet ansatz, et paramétrée par les nombres q et λ . Elle s'exprime selon

$$G(q, \lambda) = -\frac{\beta^2 J^2}{4} n(n-1)q^p + \frac{1}{2} n(n-1)q\lambda - \ln \text{Tr}_{\sigma^a} e^{\frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \lambda \sigma^a \sigma^b + \beta h \sum_a \sigma^a} \quad (10.29)$$

Il nous reste à effectuer la trace sur les valeurs possibles de σ^a :

$$\ln \text{Tr}_{\sigma^a} e^{\frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \lambda \sigma^a \sigma^b + \beta h \sum_a \sigma^a} = \ln \text{Tr}_{\sigma^a} e^{\frac{\lambda}{2} (\sum_a \sigma^a)^2 - n \frac{\lambda}{2} + \beta h \sum_a \sigma^a} \quad (10.30)$$

$$= \ln \text{Tr}_{\sigma^a} \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} e^{(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \sum_a \sigma^a} e^{-n \frac{\lambda}{2}} \quad (10.31)$$

$$= \ln \int d\mu(z) \prod_a \text{Tr}_{\sigma^a} e^{-\frac{\lambda}{2} + (z\sqrt{\lambda} + \beta h) \sigma^a} \quad (10.32)$$

$$= \ln \int d\mu(z) \left(2e^{-\frac{\lambda}{2}} \cosh(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \right)^n \quad (10.33)$$

$$\simeq_{n \rightarrow 0} \ln \int d\mu(z) \left[1 + n \ln \left(2e^{-\frac{\lambda}{2}} \cosh(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \right) \right] \quad (10.34)$$

$$\simeq_{n \rightarrow 0} n \int d\mu(z) \ln \left(2e^{-\frac{\lambda}{2}} \cosh(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \right) \quad (10.35)$$

Nous avons introduit la notation $d\mu(z) = \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}}$.

Nous tirons de ce calcul l'expression de G dans la limite qui nous intéresse $n \rightarrow 0$:

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} G(q, \lambda) = \frac{\beta^2 J^2}{4} q^p - \frac{1}{2} q\lambda - \int d\mu(z) \ln \left(2 \cosh(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \right) + \frac{\lambda}{2} \quad (10.36)$$

La recherche des points col de cette fonction conduit à l'étude de deux équations. La première correspond aux variations par rapport à q :

$$\partial_q G = 0 \Rightarrow \frac{1}{2} \beta^2 J^2 p q^{p-1} = \lambda, \quad (10.37)$$

alors que les variations par rapport à λ conduisent à

$$\partial_\lambda G = 0 \Rightarrow q = - \int d\mu(z) \tanh(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \frac{z}{\sqrt{\lambda}} + 1 \quad (10.38)$$

soit encore par intégration par partie

$$q = - \int d\mu(z) \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sqrt{\lambda} \left(1 - \tanh^2(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \right) + 1 \quad (10.39)$$

$$= \int d\mu(z) \tanh^2(z\sqrt{\lambda} + \beta h) \quad (10.40)$$

Sachant que q doit être plus petit que 1 par définition, dans la limite de grand $p \rightarrow \infty$ nous trouvons la solution simple

$$\lambda = 0 \text{ et } q = \tanh^2(\beta h) \quad (10.41)$$

L'énergie libre moyenne de cette solution s'obtient aisément :

$$\beta \bar{f} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{G}{n} - \frac{\beta^2 J^2}{4} = -\ln 2 - \ln \cosh(\beta h) - \frac{\beta^2 J^2}{4} \quad (10.42)$$

ce qui est bien la solution obtenue pour le REM à haute température :

$$\bar{f} = -T \ln 2 - \frac{J^2}{4T} - T \ln \cosh \frac{h}{T} \quad (10.43)$$

De même que pour le REM, nous trouvons que cette solution n'est pas convenable à basse température car elle correspond à une entropie négative à $T \rightarrow 0$:

$$s = -\frac{\partial \bar{f}}{\partial T} = \ln 2 - \frac{J^2}{4T^2} - T \ln \cosh \frac{h}{T} \quad (10.44)$$

N.B : on obtient aussi trivialement que l'aimantation moyenne est $m = \partial_h \bar{f} = \tanh(h/T)$.

10.3.3 Solution non symétrique

Par analogie avec la solution du REM, nous nous attendons à ce que la solution de basse température corresponde à une brisure de symétrie des répliques à un pas ($k = 1$). Nous allons donc chercher des matrices λ^{ab} et \tilde{Q}^{ab} de ce type². Il nous reste maintenant à exprimer la fonction G pour des matrices λ et \tilde{Q} de ce type. De leur forme, nous tirons les égalités suivantes

$$\sum_{a \neq b} \left(\tilde{Q}^{ab} \right)^p = n \left((n - m_1) q_0^p + (m_1 - 1) q_1^p \right) \quad (10.45)$$

$$\sum_{a \neq b} \lambda^{ab} \tilde{Q}^{ab} = n \left((n - m_1) \lambda_0 q_0 + (m_1 - 1) \lambda_1 q_1 \right) \quad (10.46)$$

Utilisons maintenant l'indice grec $\alpha = 1, \dots, n/m_1$ pour repérer les sous-groupes de $1 \dots n$, et les indices latins a_α pour repérer les éléments de ces sous-groupes. Ceci nous permet d'exprimer les sommes sur les spins

$$\sum_{a \neq b} \lambda^{ab} \sigma^a \sigma^b = \lambda_0 \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_{a_\alpha} \sigma_{a_\alpha} \right) \left(\sum_{a_\beta} \sigma_{a_\beta} \right) + \lambda_1 \sum_{\alpha=1}^{n/m_1} \left(\sum_{a_\alpha} \sigma_{a_\alpha} \right)^2 - n \lambda_1 \quad (10.47)$$

$$= \lambda_0 \sum_{\alpha, \beta} \left(\sum_{a_\alpha} \sigma_{a_\alpha} \right) \left(\sum_{a_\beta} \sigma_{a_\beta} \right) + (\lambda_1 - \lambda_0) \sum_{\alpha=1}^{n/m_1} \left(\sum_{a_\alpha} \sigma_{a_\alpha} \right)^2 - n \lambda_1 \quad (10.48)$$

²Notons que la forme de la fonction G , dans laquelle λ et Ω apparaissent sous forme de produit, implique que ces deux matrices ont même symétrie.

Comme pour la solution symétrique, nous exprimons les traces sur les valeurs de σ sous la forme d'intégrale :

$$e^{\lambda_0 \sum_{\alpha,\beta} (\sum_{a\alpha} \sigma_{a\alpha}) (\sum_{a\beta} \sigma_{a\beta})} = \int d\mu(z) e^{z\sqrt{\lambda_0} \sum_{\alpha} \sum_{a\alpha} \sigma_{a\alpha}} \quad (10.49)$$

$$e^{(\lambda_1 - \lambda_0) \sum_{\alpha=1}^{n/m_1} (\sum_{a\alpha} \sigma_{a\alpha})^2} = \prod_{\alpha} \int d\mu(z_{\alpha}) e^{z_{\alpha} \sqrt{\lambda_1 - \lambda_0} \sum_{a\alpha} \sigma_{a\alpha}} \quad (10.50)$$

$$\Rightarrow \text{Tr}_{\sigma} e^{\frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \lambda^{ab} \sigma^a \sigma^b + \beta h \sum_a \sigma^a} \quad (10.51)$$

$$= \int d\mu(z_0) \left(e^{\frac{m_1 \lambda_1}{2}} \int d\mu(z_1) \left(\cosh \left(z_0 \sqrt{\lambda_0} + z_1 \sqrt{\lambda_1 - \lambda_0} + \beta h \right) \right)^{m_1} \right)^{n/m_1} \quad (10.52)$$

$$= 1 + \frac{n}{m_1} \int d\mu(z_0) \ln [\dots] \quad (10.53)$$

En ne gardant que les termes non nuls dans la limite $n \rightarrow 0$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{G}{n} =_{n \rightarrow 0} & \frac{\beta^2 J^2}{4} (m_1 q_0^p + (1 - m_1) q_1^p) + \frac{1}{2} ((m_1 - 1) \lambda_1 q_1 - m_1 \lambda_0 q_0) \\ & - \frac{\lambda_1}{2} + \frac{1}{m_1} \int d\mu(z_0) \ln \int d\mu(z_1) \cosh^{m_1} \left(z_0 \sqrt{\lambda_0} + z_1 \sqrt{\lambda_1 - \lambda_0} + \beta h \right) \end{aligned} \quad (10.54)$$

Commençons par considérer l'équation de point col par rapport à q_0 :

$$\frac{\partial G}{\partial q_0} = -\frac{1}{4} \beta^2 J^2 m_1 p q_0^{p-1} + \frac{m_1}{2} \lambda_0 \quad (10.55)$$

$$\Rightarrow \lambda_0 = \frac{\beta^2 J^2}{2} p q_0^{p-1} \quad (10.56)$$

De la même façon, la seconde équation de point col par rapport à q_1 conduit à l'équation analogue de la précédente

$$\lambda_1 = \frac{\beta^2 J^2}{2} p q_1^{p-1} \quad (10.57)$$

Or nous avons par construction $1 \geq q_1 > q_0$, et $\lambda_1 \neq \lambda_0$ (faute de quoi nous retrouverions une solution symétrique), ce qui implique que³

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \lambda_0 = 0 \text{ et } \lim_{p \rightarrow \infty} \lambda_1 = \infty, q_1 = 1 \quad (10.58)$$

En utilisant ces deux résultats ($\lambda_0 \rightarrow 0, \lambda_1 \rightarrow \infty$), nous pouvons simplifier l'intégrale dans l'expression de la fonction G en

$$\begin{aligned} \frac{G}{n} =_{n \rightarrow 0} & \frac{\beta^2 J^2}{4} (m_1 q_0^p + (1 - m_1) q_1^p) + \frac{1}{2} ((m_1 - 1) \lambda_1 q_1 - m_1 \lambda_0 q_0) \\ & - \frac{\lambda_1}{2} - \frac{1}{m_1} \ln (2 \cosh(m_1 \beta h)) + \frac{m_1}{2} \lambda_0 \tanh^2(m_1 \beta h) \end{aligned} \quad (10.59)$$

³Remarquons que q_0 ne peut tendre vers 1 dans la limite $p \rightarrow \infty$: nous retrouverions une solution symétrique dans cette limite, ce qui n'est pas correcte.

Cette expression simplifiée nous permet d'obtenir les dernières équations de point col :

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda_0} = \frac{m_1}{2} q_0 - \frac{m_1}{2} \tanh^2(m_1 \beta h) = 0 \Rightarrow q_0 = \tanh^2(m_1 \beta h) \quad (10.60)$$

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda_1} = \frac{1 - m_1}{2} q_1 + \frac{m_1}{2} = 0 \Rightarrow q_1 = 1 \quad (10.61)$$

et finalement

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial m_1} = & -\frac{J^2 \beta^2}{4} (q_0^p - q_1^p) + \frac{1}{2} (\lambda_0 q_0 - \lambda_1 q_1) + \frac{\lambda_1}{2} \\ & - \frac{1}{m_1^2} \ln(2 \cosh(m_1 \beta h)) + \frac{\beta h}{m_1} \tanh(m_1 \beta h) - \frac{\lambda_0}{2} \tanh^2(m_1 \beta h) = 0 \end{aligned} \quad (10.62)$$

soit en appelant $\beta_c = m_1 \beta$

$$\beta_c^2 = \frac{4}{J^2} (\ln(2 \cosh(\beta_c h)) - \beta_c h \tanh(\beta_c h)) \quad (10.63)$$

Nous remarquons à ce stade que $T_c = \beta_c^{-1}$ correspond exactement à la température à laquelle s'annule l'entropie de la solution symétrique de haute température.

D'après la solution ci-dessus, à basse température ($T < T_c$), nous obtenons dans la limite $p \rightarrow \infty$

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \frac{G}{n} = \frac{\beta^2 J^2}{4} (1 - m_1) - \frac{1}{m_1} \ln(2 \cosh(m_1 \beta h)) + \mathcal{O}(n). \quad (10.64)$$

L'expression de l'énergie libre \bar{f} s'en déduit :

$$\bar{f} = \beta^{-1} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{G}{n} - \frac{\beta J^2}{4} \quad (10.65)$$

$$= -\frac{J^2}{2T_c} - h \tanh(\beta_c h) \quad (10.66)$$

ce qui correspond bien à la solution (nous avons utilisé l'égalité (10.63) dans la dernière égalité). Ceci est une bonne indication que la méthode de brisure de symétrie des répliques permet d'obtenir les solutions de champ moyen correct, au moins pour le modèle p-spin.

10.4 Brisure de symétrie des répliques, et brisure d'ergodicité

10.4.1 Le paramètre d'ordre est une fonction !

Retour sur la notion d'état pur : le cas du modèle d'Ising ferromagnétique

Pour ce modèle d'Ising ferromagnétique, nous pouvons définir deux états "purs" caractérisés par leur aimantation $\langle S_i \rangle = +m_s$, $\langle S_i \rangle = -m_s$ où l'aimantation spontanée est définie par $m_s = \lim_{h \rightarrow 0^+} (\lim_{N \rightarrow \infty} \langle S_i \rangle)$. A l'équilibre, toutes les moyennes statistiques se décomposent sur ces deux états : $\langle S \rangle = \frac{1}{2} \langle S \rangle_+ + \frac{1}{2} \langle S \rangle_-$. De façon générale, pour une

observable O dans un état de Gibbs, nous écrivons $\langle O \rangle = \frac{1}{2} \langle O \rangle_+ + \frac{1}{2} \langle O \rangle_-$. L'idée qui sous-tend la technique de brisure de symétrie des répliques est que dans un verre, il y a un grand nombre de tels états purs, d'énergie libre F_α , et que ces moyennes se décomposent selon

$$\langle O \rangle = \sum_{\alpha} e^{-\beta F_{\alpha}} \langle O \rangle_{\alpha}. \quad (10.67)$$

Mais le problème visible dans le cas du modèle d'Ising ferromagnétique est que la définition des états purs se fait *via* l'utilisation d'un champ extérieur qui se couple non-symétriquement aux différents états purs. Ceci apparaît impossible dans le cas des verres où nous n'avons aucune idée *a priori* de la structure complexe des différents états. Comment faire pour définir ces états purs sans champ extérieur ?

Avec cette idée d'un grand nombre d'états purs présents dans les verres, quels sont les outils pour les caractériser. Une première notion intéressante est celle de distance entre états. Dans le cas des spins d'Ising, définissons là par la relation

$$d^2(\alpha, \beta) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^{\alpha} - \sigma_i^{\beta})^2 \quad (10.68)$$

où $\{\sigma^{\alpha}\}$ et $\{\sigma^{\beta}\}$ sont les deux états. On peut lui associer le recouvrement entre ces deux états, rencontré précédemment, et défini par

$$q_{\alpha\beta} = 1 - d_{\alpha\beta}^2 = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^{\alpha} \sigma_i^{\beta} \quad (10.69)$$

Cette distance vérifie les propriétés suivantes

- $d_{\alpha\beta}^2 = 0$ si les 2 configurations sont égales, et $q_{\alpha\beta} = 1$
- $d_{\alpha\beta}^2 = 1$ si les 2 configurations sont orthogonales, et $q_{\alpha\beta} = 0$
- $d_{\alpha\beta}^2 = 2$ si les 2 configurations sont antiparallèles, et $q_{\alpha\beta} = -1$

La donnée de l'ensemble des distances $d_{\alpha\beta}$, ou de façon équivalente des recouvrements $q_{\alpha\beta}$, permet de caractériser l'ensemble des états purs d'une phase. Une proposition de paramètre d'ordre dans un échantillon donné correspond donc à la loi de distribution de des recouvrements

$$P_{\{J\}}(q) = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha} w_{\beta} \delta(q - q_{\alpha\beta}), \quad (10.70)$$

où w_{α} est le poids statistique de l'état α .

Un paramètre d'ordre plus accessible à la théorie est la distribution moyenne de ces recouvrements

$$P(q) = \int d[J] P[J] P(q) \quad (10.71)$$

Exemple pour le modèle d'Ising ferromagnétique, ce paramètre d'ordre est une fonction delta centrée en 0 au dessus de la transition ($T > T_c$), et la somme de deux fonctions delta centrée en $\pm m^2$ à basse température. On s'attend donc à ce que une distribution $P(q)$ plus complexe corresponde à un ensemble non trivial d'états purs.

Calcul de $P(q)$ par les répliques

Considérons la série de fonction de corrélations suivantes :

$$q_J^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle \sigma_i \rangle^{(\alpha)} \right) \left(\sum_{\beta} w_{\beta} \langle \sigma_i \rangle^{(\beta)} \right) \quad (10.72)$$

$$= \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha} w_{\beta} q_{\alpha\beta} = \int dq q P_J(q) \equiv \bar{q}^J \quad (10.73)$$

De même la fonction de corrélation analogue s'exprime aussi comme une moyenne de puissance de q :

$$q_J^{(2)} = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha} w_{\beta} \sum_{i,j} \underbrace{\langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{(\alpha)} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{(\beta)}}_{\simeq \langle \sigma_i \rangle^{(\alpha)} \langle \sigma_j \rangle^{(\alpha)} \langle \sigma_i \rangle^{(\beta)} \langle \sigma_j \rangle^{(\beta)}} \quad (10.74)$$

$$= \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha} w_{\beta} q_{\alpha\beta}^2 \equiv \bar{q}^{2J} \quad (10.75)$$

Ce résultat se généralise aisément au moment d'ordre k de la loi de distribution $P_{\{J\}}(q)$:

$$q_J^{(k)} = \frac{1}{N^k} \sum_{i_1, \dots, i_k} \langle \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_k} \rangle^k = \int dq P(q) q^k \equiv \bar{q}^{kJ} \quad (10.76)$$

Or c'est au niveau de ces fonctions de corrélations que le lien se fait. En effet, comme toutes les fonctions de corrélations (ou plus précisément leur moyenne), elles s'expriment aisément en formalisme de répliques. Prenons l'exemple de la première :

$$q_J^{(1)} = \overline{q_J^{(1)}} = \frac{1}{Z^2} \overline{\sum_{\{\sigma_j^{(1)}\}} \sum_{\{\sigma_j^{(2)}\}} \sigma_i^{(1)} \sigma_i^{(2)} e^{-\beta H[\sigma^{(1)}]} e^{-\beta H[\sigma^{(2)}]}} \quad (10.77)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \left\langle \sigma_i^a \sigma_i^{b \neq a} \right\rangle_{\tilde{H}_n[\sigma^n]} = \lim_{n \rightarrow 0} Q^{ab} \text{ où } a \neq b \quad (10.78)$$

Dans cette expression, \tilde{H}_n représente le hamiltonien répliqué, et a et b deux indices de répliques différents. L'ambiguïté de ce choix est levé en préférant l'expression symétrique suivante

$$q^{(1)} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{a \neq b} Q^{ab}. \quad (10.79)$$

De la même façon, les moments supérieurs trouvent un expression analogue en terme des recouvrements entre répliques :

$$q^{(k)} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{n(n-1)} \sum_{a < b} Q_{ab}^k \quad (10.80)$$

Une conséquence immédiate de cette relation pour tous les moments de la loi de distribution $P(q)$ est l'identification

$$P(q) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{n(n-1)} \sum_{a < b} \delta(Q_{ab} - q) \quad (10.81)$$

La conclusion de cette remarque est que la brisure de symétrie des répliques, qui comme nous l'avons vu est reliée à l'apparition de plusieurs valeurs de Q_{ab} , est reliée avec l'existence de plusieurs états purs distincts. L'apparition de ces états purs s'apparente, d'après notre introduction, à l'existence d'une brisure d'ergodicité.

Remarque Lien avec les susceptibilités magnétiques. La susceptibilité locale est définie par $\chi_{loc} = \frac{1}{N} \sum_i \chi_{ii} = \beta(1 - N^{-1} \sum_i m_i^2)$ car $\chi_{ii} = \partial m_i / \partial h_i = \beta \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)^2 \rangle$ par utilisation du théorème fluctuation-dissipation. D'après ce qui suit, on peut donc définir deux types de susceptibilités :

- la susceptibilité piégé dans un état pur (à basse température) :

$$\tilde{\chi}_{loc} = \beta(1 - (m_i^\alpha)^2) = \beta(1 - q_{EA}). \quad (10.82)$$

La dernière égalité provient de l'identification

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_i \langle \sigma_i(t_0) \sigma_i(t_0 + t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i^\alpha \sigma_i^\alpha \rangle = \frac{1}{N} \sum_i (m_i^{(\alpha)})^2. \quad (10.83)$$

- la susceptibilité d'équilibre :

$$\tilde{\chi} = \beta(1 - \frac{1}{N} \sum_i m_i^2) = \beta(1 - \bar{q}). \quad (10.84)$$

Revenons pour finir sur le formalisme des répliques, et considérons une solution à brisure de symétrie des répliques quelconque. Celle-ci est caractérisée par la fonction $q(x)$. Cette fonction est liée directement avec le paramètre d'ordre $P(q)$ précédent. En effet, d'après sa définition,

$$P(q) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{n(n-1)} \sum_{a < b} \delta(Q_{ab} - q) \quad (10.85)$$

$$= \int_0^1 dx \delta(q(x) - q) = \int_{q_{min}}^{q_{max}} d\tilde{q} \frac{dx(\tilde{q})}{dq} \quad (10.86)$$

$$= \frac{dx(q)}{dq} \quad (10.87)$$

Ainsi $P(q)$ se lit directement sur la fonction $q(x)$, ce qui confirme l'interprétation précédente de la brisure de symétrie des répliques. Quelques exemples de fonctions $q(x)$ typiques sont représentés sur la figure 10.1, ainsi que la distribution $P(q)$ correspondante.

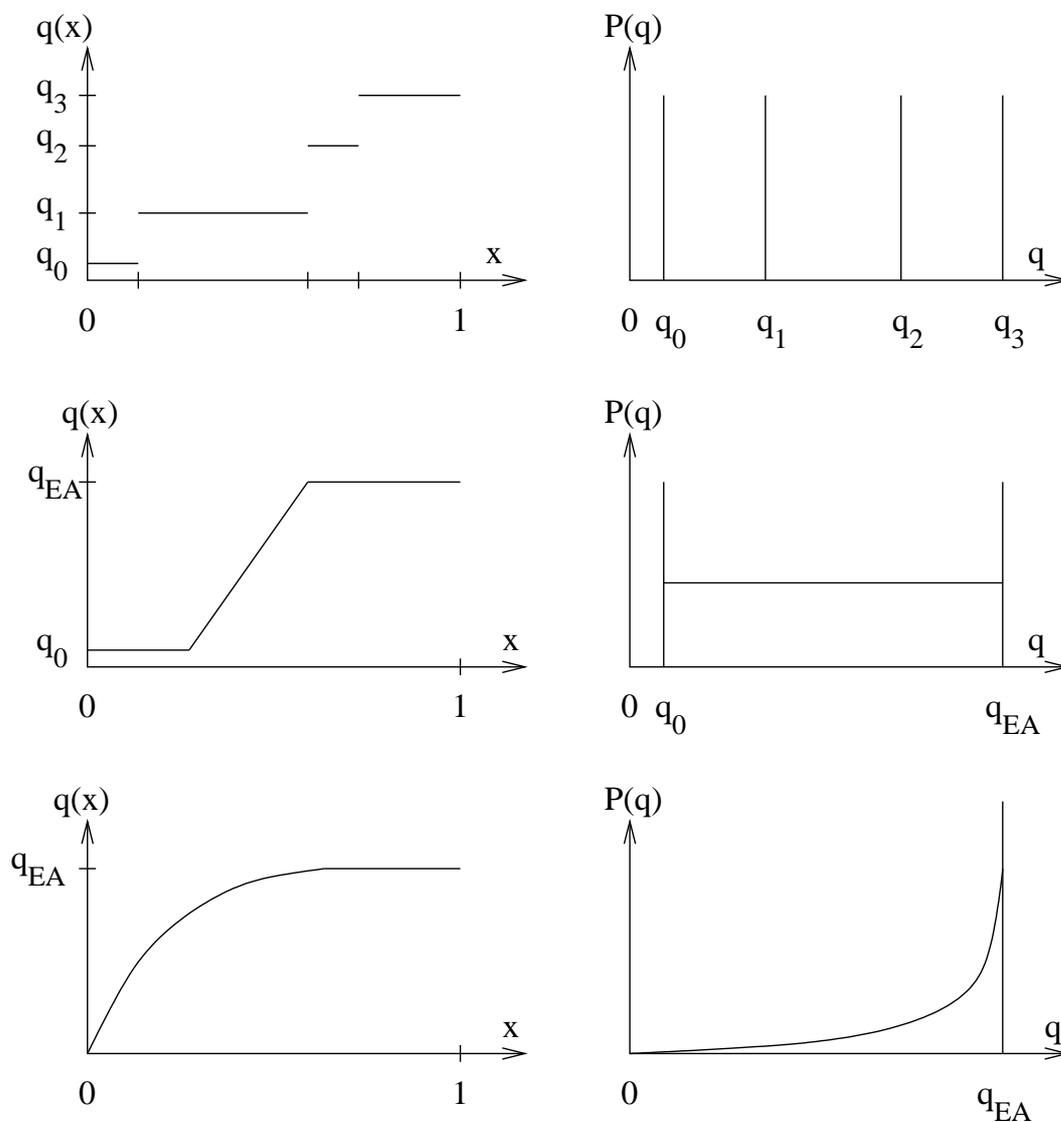


FIG. 10.1: Représentation de quelques fonctions $q(x)$ courantes, ainsi que de la distribution $P(q)$ associée.

10.4.2 Ultramétrie

Considérons $P(q_1, q_2, q_3)$ la probabilité jointe d'obtenir les 3 valeurs q_1, q_2, q_3 comme recouvrements respectifs entre trois états :

$$P(q_1, q_2, q_3) = \overline{\sum_{\alpha, \beta, \gamma} w_\alpha w_\beta w_\gamma \delta(q_1 - q_{\alpha\beta}) \delta(q_2 - q_{\beta\gamma}) \delta(q_3 - q_{\alpha\gamma})} \quad (10.88)$$

Cette probabilité s'exprime en termes des recouvrements entre répliques sous la forme

$$P(q_1, q_2, q_3) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)(n-2)} \sum_{a \neq b \neq c} \delta(Q_{ab} - q_1) \delta(Q_{ac} - q_2) \delta(Q_{bc} - q_3) \quad (10.89)$$

Procédons de façon pédestre et explicite, et considérons pour cela la fonction caractéristique $g(y_1, y_2, y_3)$ de $P(q_1, q_2, q_3)$ définie par

$$g(y_1, y_2, y_3) = \int dq_1 dq_2 dq_3 P(q_1, q_2, q_3) e^{i(q_1 y_1 + q_2 y_2 + q_3 y_3)} \quad (10.90)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)(n-2)} \sum_{a \neq b \neq c} e^{i(Q_{ab} y_1 + Q_{bc} y_2 + Q_{ac} y_3)} \quad (10.91)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)(n-2)} \text{Tr} (A(y_1) A(y_2) A(y_3)) \quad (10.92)$$

où les éléments de matrice de $A(y)$ valent $\exp(iQ_{ab}y)$ si $a \neq b$, et 0 sinon. Définissons par $A(x, y)$ (avec $x \in [0, 1]$) la limite de cette matrice lorsque $n \rightarrow 0$, et nous obtenons⁴

$$g(y_1, y_2, y_3) = \frac{1}{2} \int_0^1 dx \left(x A(x, y_1) A(x, y_2) A(x, y_3) + A(x, y_1) \int_0^x du A(u, y_2) A(u, y_3) \right. \\ \left. + A(x, y_2) \int_0^x du A(u, y_1) A(u, y_3) + A(x, y_3) \int_0^x du A(u, y_1) A(u, y_2) \right), \quad (10.93)$$

soit en repassant à la distribution P :

$$P(q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{2} P(q_1) x(q_1) \delta(q_1 - q_2) \delta(q_1 - q_3) + \frac{1}{2} P(q_1) P(q_2) \theta(q_1 - q_2) \delta(q_2 - q_3) \\ + \frac{1}{2} P(q_2) P(q_3) \theta(q_2 - q_3) \delta(q_1 - q_3) + \frac{1}{2} P(q_1) P(q_3) \theta(q_1 - q_3) \delta(q_1 - q_2) \quad (10.94)$$

Ce résultat traduit l'ultramétrie de l'ensemble des états purs de la phase vitreuse, qui est définie par la relation sur les distances (équivalente à la propriété ci-dessus) :

$$d_{ab} \leq \max(d_{ac}, d_{bc}) \quad (10.95)$$

Cette propriété est traduite de façon commode en représentant l'ensemble des états sur un arbre, sur lequel chaque niveau correspond à un recouvrement donné (fig. 10.3).

⁴De façon générale, nous pouvons écrire que

$$\frac{1}{n} \sum_{a,b} Q_{ab}^l = \sum_{i=1}^k (m_i - m_{i+1}) q_i^l \rightarrow \int_0^1 dx q^l(x).$$

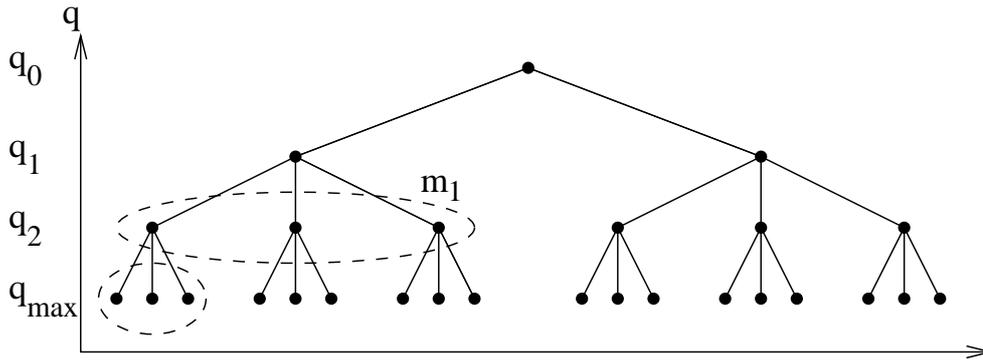


FIG. 10.2: Représentation schématique d'un arbre ultramétrique. Les solutions de champ moyen des verres de spins correspondent à des structures ultramétriques de l'espace des phases.

10.4.3 Notion de complexité

Si nous reprenons la décomposition précédente de l'espace des phases en composantes ergodiques (“vallées d'énergie”) distinctes, nous pouvons écrire la fonction de partition comme une somme des fonctions de partition partielles :

$$Z = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} = \sum_{\alpha} e^{-\frac{E_{\alpha}}{kT}}, \quad (10.96)$$

où les énergies des différentes “vallées” sont intensives $E_{\alpha} = Nf_{\alpha}$. En utilisant les poids statistiques $P_{\alpha} = Z_{\alpha}/Z$ de ces vallées, nous pouvons écrire l'énergie libre sous la forme

$$\langle F \rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha} N f_{\alpha} \quad (10.97)$$

$$= \sum_{\alpha} P_{\alpha} (-kT \ln P_{\alpha} - kT \ln Z) \quad (10.98)$$

$$= -kT \ln Z - kT \sum_{\alpha} P_{\alpha} \ln P_{\alpha} \quad (10.99)$$

$$= F + TC \quad (10.100)$$

où la complexité C , analogue à une entropie (des “vallées”), s'écrit $C = -k \sum_{\alpha} P_{\alpha} \ln P_{\alpha} > 0$. Par analogie avec l'entropie habituelle, nous pouvons définir un nombre effectif de composantes ergodiques N_{eff} défini par $C = -k \ln N_{eff}$. Dans les solutions champ moyen de modèle de spins, ce nombre passe de 1 dans la phase de haute température à un nombre thermodynamique en dessous.

Expérimentalement, cette complexité n'est pas accessible. On peut par contre considérer l'excès d'entropie du verre ou du liquide par rapport au solide (état ordonné de référence dans les conditions expérimentales) : $\Delta S = S - S_{solide}$. Le comportement en température de ΔS signale l'apparition d'une transition vitreuse (paradoxe de Kauzmann).

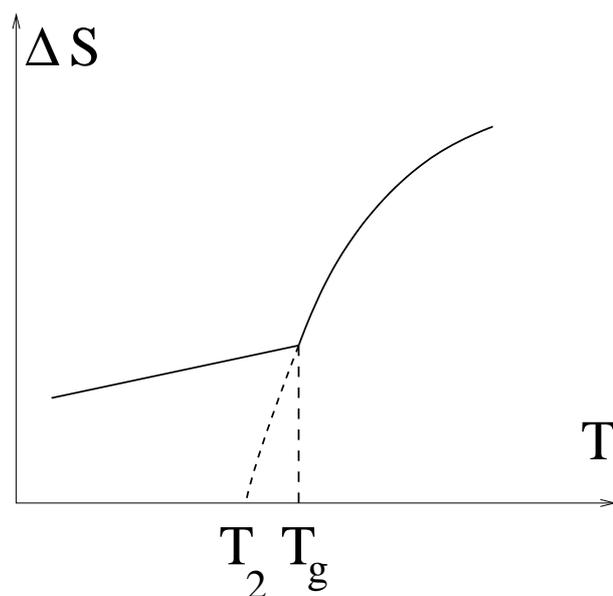


FIG. 10.3: Représentation schématique de l'excès d'entropie d'un liquide trempé en fonction de la température. En dessous de la température vitreuse, cet excès d'entropie change de comportement. Le paradoxe de Kauzmann vient du prolongement comportement de ΔS en dessous de T_g : à une température T_2 , cette excès entropie s'annule. En dessous de cette température, le liquide surfondu aurait une entropie plus faible que celle du solide : il doit changer de nature auparavant. Cette température est parfois vue comme celle d'une transition de phase idéale (fictive) survenant à des temps (de refroidissement) infinis.

10.5 Retour sur le modèle de Sherrington-Kirkpatrick

Le modèle de Sherrington-Kirkpatrick, véritable champ moyen du verre de spin d'Edwards-Anderson, correspond au cas $p = 2$ du modèle p -spin précédent. Bien qu'apparemment plus simple, sa solution par les répliques s'avère plus complexe : il est possible de montrer analytiquement que près de la transition vitreuse, la solution de basse température est de type brisure continue de symétrie des répliques. Celle-ci s'obtient en faisant un développement de la fonction de point col G en puissance du paramètre d'ordre Q . Le maniement de ce genre de solution s'avère plus fastidieux que celui de solution à 1 pas de brisure de symétrie des répliques. Nous ne les présenterons pas dans ces notes.

Notes

Le grand débat des verres de spins a pendant longtemps été celui de la pertinence de cette image de champ moyen pour un verre de spins en dimension 3. Une proposition alternative est celle des "gouttelettes" développée par D. Fisher et D. Huse. Ce scénario s'appuie sur la physique d'un système ferromagnétique trempé. L'évolution lente d'un tel système se fait par croissance des domaines majoritaires. Par analogie, D. Fisher et D. Huse ont postulé l'existence d'un fondamental unique du verre de spins (à symétrie de renversement des spins près). Les propriétés du verre de spins sont alors la manifestation du caractère éternellement hors d'équilibre de ce verre.

Un deuxième point à aborder est celui de la nature des spins. Nous nous sommes intéressés exclusivement aux spins d'Ising dans ce chapitre. Si l'existence d'une transition vitreuse à température finie est bien établie numériquement pour les verres de spins d'Ising, la situation est très controversée pour les spins d'Heisenberg. La contradiction apparente entre cette situation numérique et les résultats expérimentaux pose donc problème. Dans ce contexte, Kawamura a proposé un scénario selon lequel la transition vitreuse des verres d'Heisenberg proviendrait d'un gel aléatoire de la chiralité dans ces verres de spins. Un couplage spin-orbite (qui produit un couplage entre chiralité et aimantation locale) est alors nécessaire pour ordonner aléatoirement les spins.

11 Dynamique du verre : le vieillissement

Jusqu'ici, nous n'avons considéré que les propriétés d'équilibre des verres (au niveau du champ moyen). Or il semble qu'expérimentalement cet équilibre global ne soit jamais atteint. Nous allons donc naturellement nous tourner maintenant vers la dynamique vireuse. Est-ce à dire que nous devons oublier les résultats précédents ? Nous verrons qu'ils sont nécessaires à la compréhension de la dynamique, en définissant le cadre de travail pour l'étude de l'évolution du système.

11.1 Quelques résultats expérimentaux

11.1.1 Aimantation thermo-rémanente

Le protocole expérimental suivi pour étudier cette aimantation thermo-rémanente est le suivant :

1. On part d'une température T_1 supérieure à la température de transition T_g . A cette température, le système est soumis à un petit champ magnétique h de quelques Oe. Ensuite, le système est refroidi jusqu'à une température T_2 en dessous de T_g , toujours en présence du champ h .
2. L'origine des temps étant définie par la date d'arrivée du système à T_2 , la champ magnétique est maintenu constant pendant t_w .
3. A la date t_w , on coupe ce champ h . Puis on mesure l'aimantation $M(t)$ aux dates ultérieures.

Le résultat de ces mesures est une chute brutale (de l'ordre de 50 à 90%) de M à t_w , suivie d'une relaxation lente (approximativement logarithmique) de celle-ci. Cette relaxation dépend explicitement de la durée t_w , et n'est pas une fonction uniquement de la durée t écoulée depuis t_w : $M(t_w, t_w + t)$ est une fonction non-stationnaire. Lorsque t_w augmente, la réponse $M(t_w, t_w + t)$ se ralentit. L'idée intuitive qui en découle est que pendant t_w , le système cherche un équilibre local optimal. Plus t_w augmente, meilleur est cet équilibre, ce qui rend d'autant plus difficile une évolution depuis cet état (d'où le ralentissement).

Une procédure expérimentale complémentaire consiste à refroidir sans champ magnétique, et à n'appliquer ce champ qu'au bout d'un temps t_w passé à T_2 . L'aimantation ainsi mesurée est notée M_{FC} (de l'anglais "Field cooled"). Sa dépendance en t et t_w est la même que pour l'aimantation thermo-rémanente (en effet, la somme des deux redonne l'aimantation M_{FC} dans l'approximation de linéarité de la réponse). Le champ magnétique h présent dans la première procédure n'influence donc par le vieillissement.

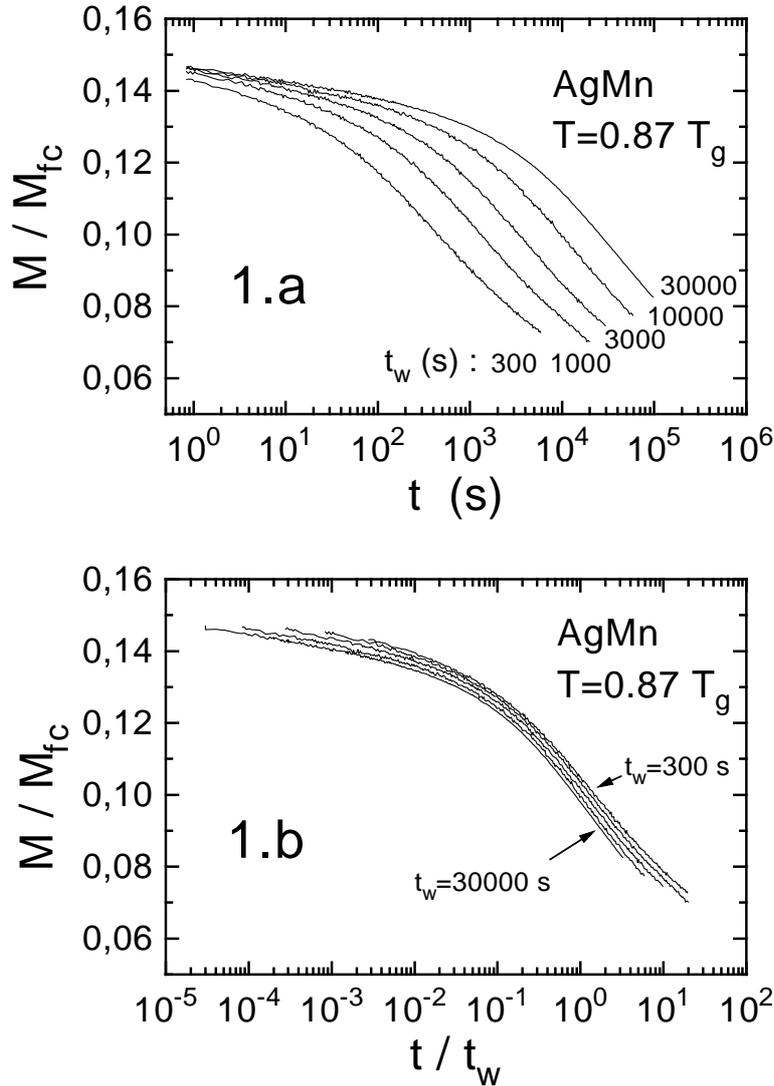


FIG. 11.1: Aimantation thermo-rémanente M_{TRM} , normalisée par l’aimantation “Field Cooled” dans le verre de spin $Ag : Mn_{2,6\%}$. Un champ magnétique de $0.1 Oe$ est appliqué lors du refroidissement, puis maintenu à la température T de mesure pendant un temps t_w . Les courbes montrent l’évolution de M en fonction de t , le temps écoulé à partir de t_w . La figure du haut montre l’évolution en fonction de t , et celle du bas en fonction de t/t_w .

Une première analyse quantitative de la réponse consiste à tirer de la décroissance de M_{TRM} une distribution des temps de relaxation :

$$M_{TRM}(t_w, t) = M_{FC}(t_w + t) \int_{\tau_0}^{\infty} d\tau g_{t_w}(\tau) e^{t/\tau} \quad (11.1)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{d \ln t} \left(m(t_w, t) = \frac{M_{TRM}}{M_{FC}} \right) = - \int_{\tau_0}^{\infty} d\tau \frac{t}{\tau} g_{t_w}(\tau) e^{t/\tau} \simeq g_{t_w}(t) \quad (11.2)$$

** Fig de Lundgren et al. **

La courbe ainsi obtenue possède un maximum pour $\ln \tau \simeq \ln t_w$, et suggère d'autre part une loi d'échelle en t/t_w pour cette fonction. Deux cas limites sont identifiés : aux petits temps $t + t_w \gg t$ ($t \ll t_w$), la dynamique est quasi-stationnaire et ne dépend pas de t_w . Et pour des temps de l'ordre de l'âge du système ($t \simeq t_w$), la dynamique est fortement non-stationnaire.

11.1.2 Effets de température : la mémoire du verre

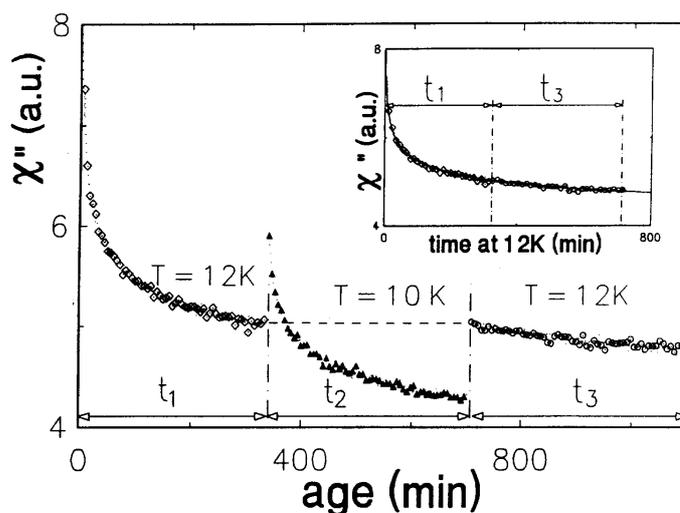


FIG. 11.2: Effet mémoire et réjuvenation : partie imaginaire de la susceptibilité d'un verre de spin, à fréquence très faible ($0.01Hz$). La séquence de température est décrite dans le texte.

Expérimentalement, les effets de petites variations de température sur la réponse d'un verre ont été étudiés en détails. Il apparaît un comportement parfois caractérisé de chaotique. Ces effets ont été étudiés sur la susceptibilité χ'' .

1. Effet d'une petite baisse de température : $\Delta T < 0$. Dans ce cas, un phénomène de réjuvenation apparaît ! La relaxation, ou vieillissement du verre, semble redémarrer avec cette variation : χ'' commence en effet à augmenter avant de diminuer à nouveau.
2. L'effet d'une hausse consécutive de la température (voir fig. 11.4) est tout aussi étonnant. En effet, la réponse reprend sa décroissance en oubliant complètement son séjour à une température inférieure pendant 6 heures. Cet effet est appelé l'effet mémoire (ou effet Kovac selon le contexte). Une expérience impressionnante a été réalisée avec une série de variations successives, montrant un effet mémoire multiple.

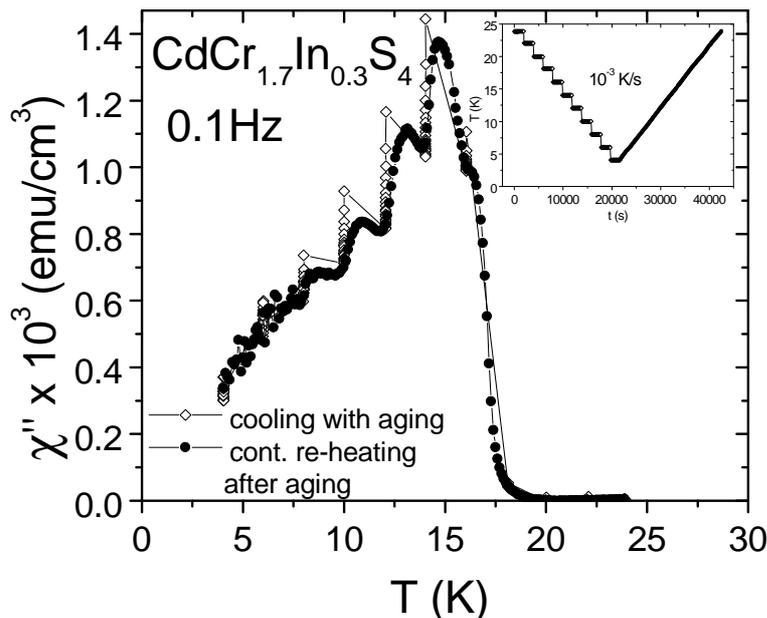


FIG. 11.3: Effet mémoire multiple, mesuré sur la susceptibilité à fréquence 0.1Hz dans un verre de spins. Le verre a été refroidi par palier, puis réchauffé à taux constant. Durant ce réchauffement, la réponse dépend de tous les paliers de refroidissement : le système se “souvient” de son histoire.

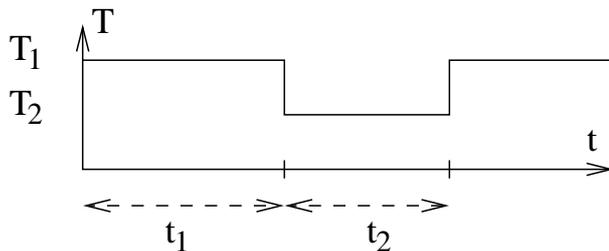


FIG. 11.4: Cycle en température dans une expérience de réjuvenation du verre. Dans l'expérience **REF**, $T_1 = 16.7\text{K}$, $T_2 = 12\text{K}$, $t_1 = t_2 = 350\text{min}$.

Les effets sur la TRM sont moins évidents : une baisse de $\Delta T = 1\text{K}$ pendant 30min ne conduit à aucune modification, alors qu'une augmentation de 0.3K pendant 100 min conduit à un très faible effet.

L'interprétation de ces effets est l'existence d'une hiérarchie d'états en fonction de la température (Fig.11.5). Lors d'une variation de température négative, le vieillissement redémarre due à l'apparition de nouvelles barrières. Mais lors du retour à la température initial, cet étape intermédiaire est oubliée car l'on reste dans la même 'grande vallée d'énergie'.

$$??? B(T - \Delta T) = (T - \Delta T) \ln t_w^- / \tau_0, B(T) = T \ln t_w^0 / \tau_0 \Rightarrow B(T - \Delta T) > B(T) ???$$

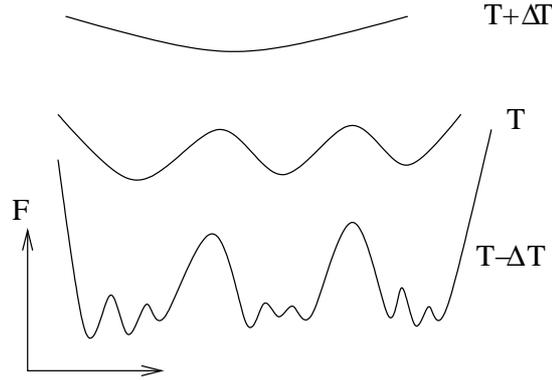


FIG. 11.5: Schéma des états hiérarchiques apparaissant lors d'une variation de température, et permettant de rendre compte des effets mémoire et de réjuvenation.

11.2 Survol des résultats analytiques

11.2.1 Formalisme

Dans les années 90, une avancée significative est venue de la résolution de l'équation dynamique d'évolution pour un modèle de champ moyen (p-spin). Pour ce faire, on considère la fonction d'autocorrélation $C(t + t_w, t_w)$ définie par

$$C(t + t_w, t_w) = \frac{1}{N} \sum_i \overline{\langle \sigma_i(t_w + t) \sigma_i(t_w) \rangle}. \quad (11.3)$$

Nous définissons les valeurs dans les cas limites :

$$\lim_{t_w \rightarrow \infty} C(t_w + t, t_w) = C_F(t) \text{ (limite stationnaire)} \quad (11.4)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_F(t) = q_{EA} \text{ et } C_F(0) = 1 \quad (11.5)$$

L'introduction de la fonction de corrélation stationnaire $C_F(t)$ permet la décomposition suivante

$$C(t_w + t, t_w) = C_F(t) + q_{EA} + C_A(t_w + t, t_w) \quad (11.6)$$

dans laquelle $C_A(t_w + t, t_w)$ correspond à la composante vieillissante de $C(t_w + t, t_w)$. Par ailleurs, si $\lim_{t \rightarrow \infty} C(t_w + t, t_w) = 0 \forall t_w$ (voir la notion de brisure d'ergodicité faible) alors

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t_w \rightarrow \infty} C_A(t_w + t, t_w) = q_{EA} \quad (11.7)$$

$$\lim_{t_w \rightarrow \infty} C_A(t_w + t, t_w) = 0 \quad (11.8)$$

Dans les modèles de champ moyen étudiés, il est possible d'identifier plusieurs régimes dans lesquels la variation de C est due soit à C_F (régime stationnaire), soit à C_A (régime vieillissant). Ces régimes peuvent être identifiés par les conditions $C > q_{EA}$ dans le régime stationnaire ($t \ll t_w$), et $C > q_{EA}$ dans le régime non stationnaire.

11.2.2 Théorème Fluctuation-Dissipation

Considérons la fonction de réponse à une variation de champ

$$R(t_w + t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_i \left. \frac{\partial \langle \sigma_i(t_w + t) \rangle}{\partial h_i(t_w)} \right|_{h=0} = R_F(t) + R_A(t_w + t, t_w) \quad (11.9)$$

dans laquelle nous avons défini $R_F(t) = \lim_{t_w \rightarrow \infty, C(t_w, t) > q_{EA}} R(t_w + t, t_w)$ et $R_A(t_w, t) = \lim_{t_w \rightarrow \infty, C(t_w, t) < q_{EA}} R(t_w + t, t_w)$. Par définition, R_F et C_F satisfont au théorème de Fluctuation-Dissipation :

$$R_F(t) = -\frac{1}{T} \frac{\partial C_F(t)}{\partial t}. \quad (11.10)$$

Par contre, la composante vieillissante R_A de la réponse satisfait pas à ce théorème. Il a donc été suggéré d'introduire une généralisation *ad hoc* de ce théorème sous la forme

$$R_A(t_w + t, t_w) = \frac{X[C_A(t_w + t, t_w)]}{T} \left. \frac{\partial C_A(t_w + t, t')}{\partial t'} \right|_{t'=t_w} \quad (11.11)$$

Cela revient en fait à introduire une *température effective*

$$T_{eff} = \frac{X[C_A(t_w + t, t_w)]}{T} \quad (11.12)$$

Le sens à donner à cette température est encore sujet à débat.

Remarques

1. Mesure expérimentale de la violation du théorème FDT par Occio *et al.* (voir figure 11.6).
2. Lien avec la statique : il est possible de montrer que $\lim_{h \rightarrow 0} P(q) = -T \frac{d^2 X(C)}{dC^2}$, en particulier pour le modèle SK. Cette relation détermine un lien entre la complexité de l'ensemble des états purs du système, et la température effective apparaissant dans le théorème FDT généralisé.

11.2.3 Résultats généraux de champ moyen

ex. du modèle p-spin soft spins, etc.

1. Régime stationnaire : $C_F(t) \simeq q_{EA} + c \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^\alpha$. Pour le modèle SK, cet exposant vaut $\alpha = 1/2$ à T_c , et baisse avec la température.
2. Régime non-stationnaire : 2 cas se présentent suivant les modèles.
 - a) Présence d'une échelle de temps : ce cas est associé aux modèles possédant une solution statique de type brisure de symétrie des répliques à un pas. Dans ce cas, la fonction de corrélation vieillissante s'écrit sous la forme

$$C_A(t_w + t, t_w) = F\left(\frac{\mathcal{L}(t_w + t)}{\mathcal{L}(t_w)}\right) \text{ avec } F(u) \simeq q_{EA} - c(1-u)^{1-x}, x < 1. \quad (11.13)$$

Dans cette relation, $\mathcal{L}(t)$ est une fonction croissante de t qui joue le rôle d'une échelle caractéristique (par exemple $\mathcal{L}(t) \simeq (t/\tau_0)^\beta$ dans le modèle de piège qui suit).

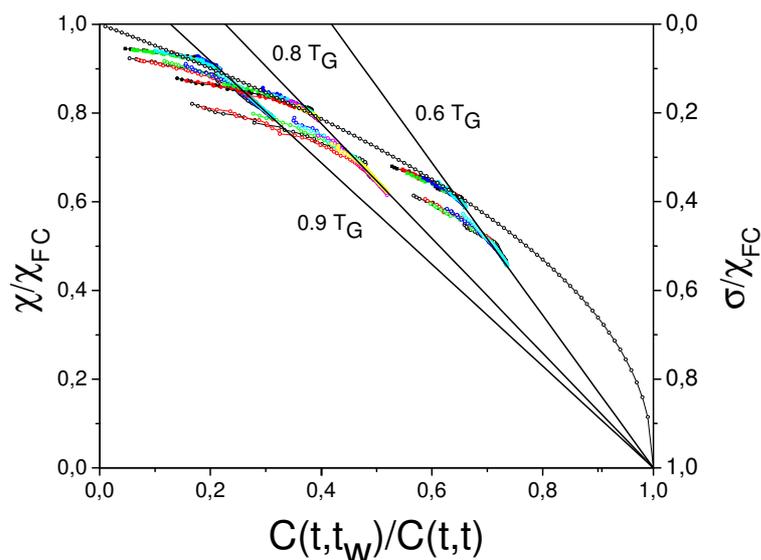


FIG. 11.6: Diagramme fluctuation-dissipation expérimental dans un verre de spins, pour différentes températures. La violation du théorème FDT est bien visible, ainsi que le désaccord apparent avec des scénarii à une température effective.

- b) Dans les modèles à échelles multiples, la décroissance de C_A est bien plus lente, et plusieurs températures effectives T_{eff} apparaissent.

11.3 Le modèle de pièges

Dans cette partie, nous allons considérer un modèle phénoménologique, appelé modèles des pièges. Ce modèle possède l'avantage de permettre de décrire assez simplement un exemple de dynamique hors d'équilibre vieillissante. De plus, il peut être relié au REM, modèle étudié précédemment. Nous verrons ainsi qu'il demeure un modèle de champ moyen.

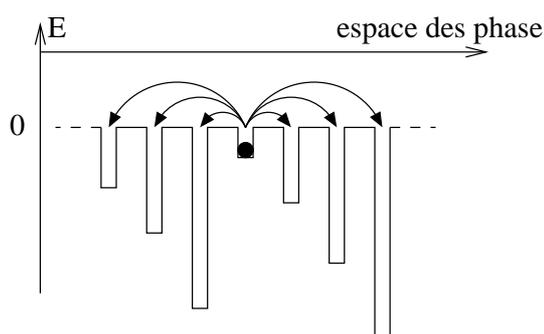


FIG. 11.7: Représentation du modèle de pièges.

11.3.1 Définition

Dans le REM, l'énergie libre des états est distribuée selon une loi exponentielle pour les faibles énergies ($E \rightarrow -\infty$) :

$$\rho(E) = Ae^{x\beta E} \text{ avec } x = \frac{T}{T_g} \quad (11.14)$$

La raison de cette forme particulière est reliée à la statistique des extrêmes comme nous l'avons vu. Elle est également obtenue dans le cas du modèle SK. L'idée du modèle est de relier la statistique des barrières d'énergies entre les états avec cette loi de distribution. On suppose donc que l'énergie à franchir pour passer d'un état à un autre est constante, et choisie à zéro. Les états étant quant à eux situés à des énergies distribuées selon (11.14). Si le système évolue par activation thermique pour sortir du puits dans lequel il se trouve, le temps caractéristique de visite d'un puits de profondeur E sera donné par une loi d'Arrhenius

$$\tau(E) = \tau_0 e^{\beta E} \quad (11.15)$$

où τ_0 est un temps microscopique. La loi de distribution du temps de sortie du puits est poissonnienne : $P(t) = \tau^{-1}(E) \exp(-t/\tau(E))$. De plus, à la sortie d'un puits, tous les autres puits sont accessibles avec la même probabilité (ce qui implique bien un modèle de type champ moyen). Dans cette approche, la dynamique au fond d'un puits est négligée, car supposée beaucoup plus rapide que celle de sortie qui va déterminer les propriétés vieillissantes.

La dynamique du modèle est donc entièrement déterminée par les temps de sortie de puits $\tau(E)$. Il est donc commode de traduire la loi de distribution des énergies $\rho(E)$ en une loi de distribution de ces temps de visite

$$\psi(\tau) = x \frac{\tau_0^x}{\tau^{1+x}} \text{ pour } \tau \gg \tau_0 \quad (11.16)$$

Cette distribution de probabilité (bien normée) possède la propriété qu'elle ne possède pas de valeur moyenne pour $x < 1$, c'est-à-dire $T < T_g$ selon (11.14) :

$$\int_{\tau_0}^{\infty} d\tau \tau \psi(\tau) = \tau_0 \int_1^{\infty} du u^{-x} = \begin{cases} \infty & \text{si } x \leq 1 \\ \frac{\tau_0 x}{x-1} & \text{si } x > 1 \end{cases}$$

Notion de brisure d'ergodicité faible

La divergence de ce temps de visite moyen possède comme conséquence immédiate qu'il sera impossible au système d'échantillonner son espace des phases accessibles. Cette brisure faible d'ergodicité ne correspond pas à une brisure usuelle d'ergodicité avec une réduction de l'espace des phases des états statiques. Il s'agit d'une 'brisure statistique'. Un des intérêts de ce modèle est de permettre d'étudier les conséquences de cette brisure faible d'ergodicité sur les propriétés de vieillissement du modèle.

11.3.2 Analyse du modèle : les fonctions de corrélation

Dans l'analyse précédente du modèle p-spin, équivalent au REM dans la limite $p \rightarrow \infty$, nous avons vu que la distribution $P(q)$ se ramenait à deux pics delta ($h = 0$) : soit $q = q_{EA}$ à l'intérieur d'un même puits (états semblables), soit $q = 0$ entre deux états différents (2 pièges). Cette propriété est associée à la brisure de symétrie des répliques à un pas. Une définition naturelle de cette fonction de corrélation est donc¹

$$C(t_w + t, t_w) = q_{EA} \Pi_1(t_w, t) \quad (11.17)$$

où $\Pi_1(t_w, t)$ est la probabilité que le système n'ait pas changé de piège entre t_w et $t_w + t$. Avec cette définition, le vieillissement se comprend intuitivement : lorsque t_w augmente, des temps caractéristiques de piégeages $\tau(E)$ de plus en plus grand sont atteints par le système, conduisant à une dépendance naturelle de $C(t_w + t, t_w)$ en t_w . Passons maintenant au calcul détaillé de cette fonction de corrélation.

Considérons pour cela la transformée de Laplace par rapport à t_w de Π_1 , définie par²

$$\hat{\Pi}_1(E, t) = \int_0^\infty dt_w E e^{-Et_w} \Pi_1(t_w, t) \quad (11.18)$$

Cette transformée de Laplace acquiert une signification précise ici, si l'on suppose que les temps d'attente sont tirés selon une loi Poissonienne : E^{-1} devient le temps d'attente caractéristique.

Dans cette image, nous pouvons considérer $p(E, \tau_\alpha)$, la probabilité qu'après un temps t_w aléatoire, mais de valeur typique E^{-1} , le système soit dans le piège α . Deux cas se présente alors, comme dans tout processus de renouvellement :

1. le système était dans le piège α à $t = 0$, et il n'en a pas bougé.
2. le système a changé de piège depuis $t = 0$, et est arrivé dans le piège α à une date antérieure à t_w .

Dans le premier cas, le piège α est tiré avec une probabilité $1/N$ où N est ici le nombre de pièges. La probabilité que le système ne bouge pas avant t_w s'écrit comme la probabilité que le temps t_α de sortie du piège α soit plus grande que t_w :

$$P(t_\alpha > t_w) = \int_0^{+\infty} dt_w E e^{-Et_w} \int_{t_w}^{+\infty} dt_\alpha \frac{1}{\tau_\alpha} e^{-\frac{t_\alpha}{\tau_\alpha}} = \int_0^{+\infty} dt_w E e^{-Et_w} e^{-\frac{t_w}{\tau_\alpha}} \quad (11.19)$$

$$= \frac{E\tau_\alpha}{1 + E\tau_\alpha} \quad (11.20)$$

Dans le deuxième cas, la probabilité que le temps de sortie t_β du piège dans lequel se trouve le système à $t = 0$ soit plus petite que t_w vaut de la même façon $P(t_\beta < t_w) = 1 - P(t_\beta > t_w) = 1/(1 + E\tau_\beta)$. Après cette date t_β , le processus est réinitialisé. La probabilité qu'il se

¹Cette définition néglige la possibilité qu'entre t_w et $t_w + t$, le système ait quitté le piège de t_w , mais y soit revenu à $t_w + t$. Cette propriété est certainement vrai dans un espace des phases de grande dimension pour lequel la probabilité de retour à l'origine d'une marche aléatoire est quasi nulle.

²Attention, la convention est inhabituelle.

trouve en α peut donc se déduire de $p(E, \tau_\alpha)$, mais il nous reste à déterminer la distribution du nouveau temps d'attente $t_w - t_\beta$. Celui-ci a comme distribution ($t_w > t_\beta$) :

$$P(t_w - t_b) = \frac{E e^{-E t_w}}{\int_{t_\beta}^{+\infty} dt E e^{-E t}} = E e^{-E(t_w - t_\beta)}, \quad (11.21)$$

autrement dit la même distribution que t_w (il s'agit d'une propriété caractéristique des distributions poissonniennes, qui n'ont pas de mémoire de l'origine des dates). En collectant tous ces résultats, nous obtenons l'expression suivante pour $p(E, \tau_\alpha)$:

$$p(E, \tau_\alpha) = \frac{1}{N} \frac{E \tau_\alpha}{1 + E \tau_\alpha} + \frac{1}{N} \sum_{\beta=1}^N \frac{p(E, \tau_\beta)}{1 + E \tau_\beta} \quad (11.22)$$

soit

$$p(E, \tau_\alpha) = \frac{\frac{E \tau_\alpha}{1 + E \tau_\alpha}}{\sum_{\beta=1}^N \frac{E \tau_\beta}{1 + E \tau_\beta}} \quad (11.23)$$

Cette expression se simplifie dans la limite thermodynamique d'un grand nombre N de pièges :

$$\sum_{\beta=1}^N \frac{E \tau_\beta}{1 + E \tau_\beta} \simeq N \left\langle \frac{E \tau}{1 + E \tau} \right\rangle = N \int_{\tau_0}^{+\infty} d\tau x \frac{\tau_0^x}{\tau^{1+x}} \frac{E \tau_\beta}{1 + E \tau_\beta} \quad (11.24)$$

$$= N \int_{E \tau_0}^{+\infty} du x u^{-1-x} \frac{u (E \tau_0)^x}{1 + u} \simeq N x (E \tau_0)^x \Gamma(x) \Gamma(1 - x) \quad (11.25)$$

où la dernière égalité est valable dans la limite réaliste $\tau_0 \ll t_w$. Revenons maintenant à $\hat{\Pi}_1(E, t)$: elle s'exprime comme la probabilité que nous venons de calculer de se trouver dans un piège α à t_w , multiplié par la probabilité de ne pas en bouger entre t_w et $t_w + t$ donnée par $\exp -t/\tau_\alpha$, d'où³

$$\hat{\Pi}_1(E, t) = \sum_{\alpha=1}^N p(E, \tau_\alpha) e^{-\frac{t}{\tau_\alpha}} \quad (11.26)$$

$$\simeq \frac{1}{N x (E \tau_0)^x \Gamma(x) \Gamma(1 - x)} \sum_{\alpha=1}^N \frac{E \tau_\alpha}{1 + E \tau_\alpha} e^{-\frac{t}{\tau_\alpha}} \quad (11.27)$$

$$= \frac{1}{x (E \tau_0)^x \Gamma(x) \Gamma(1 - x)} \int_{\tau_0}^{\infty} d\tau p(\tau) \frac{E \tau}{1 + E \tau} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (11.28)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(x) \Gamma(1 - x)} \int_{E \tau_0}^{\infty} du \frac{u^{-x}}{1 + u} e^{-\frac{E t}{u}} \text{ pour } E \tau_0 \rightarrow 0 \quad (11.29)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(x) \Gamma(1 - x)} \int_0^1 dy y^{-x} (1 - y)^{x-1} e^{-E t \frac{1-y}{y}} \quad (y = u/(1 + u)) \quad (11.30)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(x) \Gamma(1 - x)} \int_0^{\infty} dt_w E e^{-E t_w} \int_{\frac{t}{t+t_w}}^1 dy y^{-x} (1 - y)^{x-1} \quad (11.31)$$

³En utilisant $e^{-EX} = \int_0^{+\infty} dt_w E e^{-E t_w} \theta(t_w - X)$.

De cette expression, nous tirons le résultat final

$$\Pi_1(t_w, t) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi} \int_{\frac{t}{t+t_w}}^1 dy y^{-x} (1-y)^{x-1} \quad (11.32)$$

A Faire : Tracé de la fonction .

De cette première expression, nous pouvons déjà tirer que la contribution principale provient des pièges possédant un temps caractéristique proche de l'âge du système : $\tau_\alpha \simeq t_w$. De plus, cette expression n'est une fonction que de $t/(t+t_w)$, ce qui correspond à un comportement d'échelle d'une fonction vieillissante.

Au temps courts $t \ll t_w$, nous pouvons trouver une forme explicite en utilisant l'approximation

$$\int_{\frac{t}{t+t_w}}^1 dy y^{-x} (1-y)^{x-1} = \frac{\sin(\pi x)}{\pi} - \int_0^{\frac{t}{t+t_w}} dy y^{-x} (1-y)^{x-1} \simeq 1 - \frac{1}{1-x} \left(\frac{t}{t_w+t} \right)^{1-x}$$

soit

$$\Pi_1(t_w, t) = 1 - \frac{\sin(\pi x)}{\pi(1-x)} \left(\frac{t}{t_w+t} \right)^{1-x} \quad (11.33)$$

A l'opposé, dans le régime quasi-stationnaire $t \gg t_w$, nous pouvons utiliser l'approximation

$$\int_{1-\epsilon}^1 dy y^{-x} (1-y)^{x-1} \simeq \int_0^\epsilon dy y^{x-1} = \epsilon^x/x$$

pour obtenir l'expression de la fonction de corrélation

$$\Pi_1(t_w, t) \simeq \frac{\sin(\pi x)}{\pi x} \left(\frac{t_w}{t_w+t} \right)^x \quad (11.34)$$

Les caractéristiques de la brisure d'ergodicité faible que nous pouvons tirer de cette première étude sont donc les deux propriétés suivantes

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C(t_w, t_w+t) = 0 \forall t_w \quad (11.35)$$

$$\lim_{t_w \rightarrow \infty} C(t_w, t_w+t) = q_{EA} \forall t \quad (11.36)$$

Autrement dit, la brisure d'ergodicité ne se fait réellement qu'à $t_w \rightarrow \infty$.

A haute température ($x = T/T_g > 1$), nous trouvons facilement les résultats suivants

$$\Pi_1(t_w, t) = 1 - \frac{x}{x-1} \frac{t}{\tau_0} \text{ pour } t \ll \tau_0 \quad (11.37)$$

$$\Pi_1(t_w, t) = (x-1)\Gamma(x) \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{x-1} \text{ pour } \tau_0 \ll t \ll t_w \quad (11.38)$$

$$\Pi_1(t_w, t) = (x-1)^2 \Gamma(x) \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{x-1} \frac{t_w}{t} \text{ pour } t \gg t_w \quad (11.39)$$

$$(11.40)$$

La présence de τ_0 dans ces expressions est une manifestation de la présence d'une valeur moyenne de τ : cette échelle de temps caractérise la dépendance temporelle de la fonction de corrélation.

N.B : dans la limite thermodynamique, $C(t_w, t) \rightarrow 0$ si $x > 1$ et $\neq 0$ si $x < 1$.

11.3.3 Modèle de pièges ultramétrique

Ce modèle a été proposé comme extension naturelle du modèle de pièges précédent. Alors que le modèle précédent était lié avec des modèles statiques à 1 pas de brisure de symétrie des répliques, l'idée est ici de proposer une généralisation à k pas. Une des motivations est d'améliorer l'accord avec les expériences sur la réponse des verres, de spin. Une autre est la nécessité imposée par les expériences d'effet mémoire et de rajeunissement de considérer des hiérarchies plus complexes de barrières d'énergie, et donc de pièges dans ce modèle.

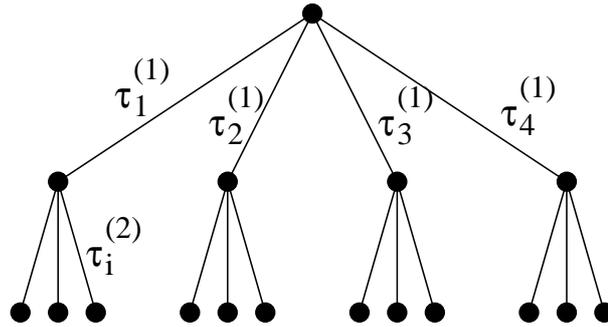


FIG. 11.8: Représentation d'un arbre ultramétrique, et des temps de piègeages $\tau_i^{(k)}$ associés aux différentes profondeurs k des branches.

Dans ce modèle, on considère un arbre ultramétrique, représenté sur la figure 11.8. A chaque branche de niveau k est associé un temps caractéristique de transition $\tau_i^{(k)}$ distribués selon une loi de distribution

$$P(\tau_i^{(k)}) = x_j \frac{(\tau_0^{(k)})^{x_k}}{(\tau_i^{(k)})^{1+x_k}} \quad \tau_i^{(k)} \geq \tau_0^{(k)} \quad (11.41)$$

où l'exposant x_k ne dépend que de la profondeur de la branche dans l'arbre. Physiquement, nous nous attendons à ce que les puits les plus profonds aient un dynamique plus rapide, autrement dit $\tau_0^{(k)} \ll \tau_0^{(k-1)}$, et $x_{k-1} < x_k$ (< 1 sous la transition). Ceci revient à supposer que les transitions de gel des différents niveaux sont décroissent lorsqu'on s'enfonce dans l'arbre : $T_g^{(k)} < T_g^{(k-1)}$. Une image en terme de "paysage d'énergie" de ce modèle est celle de puits de potentiels imbriqués les uns dans les autres (figure 11.9). La définition des différents niveaux de puits suppose une séparation d'échelle des différentes barrières d'énergies.

Dans ce modèle, chaque temps $\tau_i^{(k)}$ est un temps typique de transition entre les deux noeuds de la branche qu'il relie. Ou, pour être plus précis, un état correspond à un des noeuds terminaux de l'arbre, et peut être représenté avantageusement (en particulier dans le cas d'arbre infini) par un chemin descendant et issu du sommet de l'arbre. Les transitions entre les différents états se font en parallèle à chaque niveau de l'arbre : la transition entre deux états différents à partir d'un niveau k se fera avec un taux $\tau_i^{(k)}$ (voir la figure 11.10).

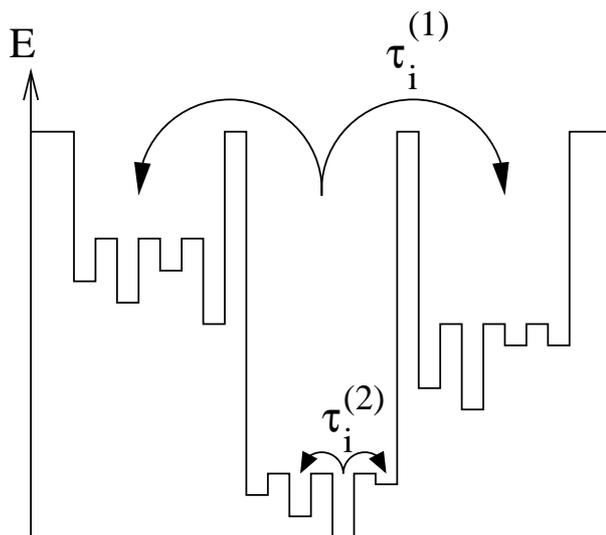


FIG. 11.9: Représentation imagée du paysage d'énergie correspondant au modèle de pièges hiérarchique.

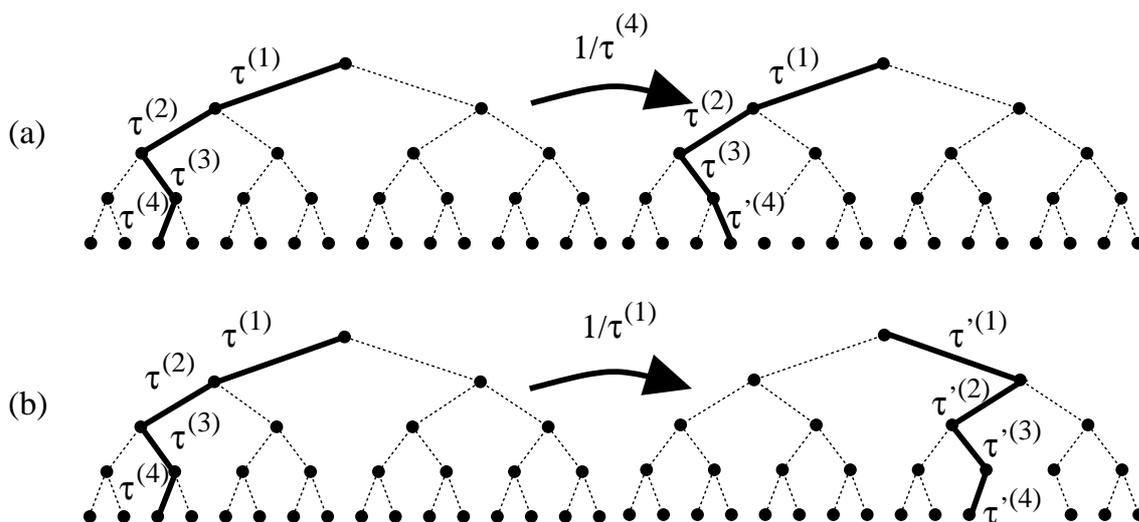


FIG. 11.10: Représentation de différentes transitions entre états dans le modèle de pièges hiérarchique, et de leur taux de transition respectif.

Les fonctions de corrélations acquièrent aussi une forme plus complexe : à chaque niveau k de l'arbre est associé comme précédemment un recouvrement q_k . Ceux-ci vont croissant en descendant l'arbre. Appelons $\Pi_j(t_w, t)$ la probabilité qu'il n'y ait pas eu de saut au dessus de l'étage j entre t_w et $t_w + t$, alors $\Pi_j(t_w, t) - \Pi_{j+1}(t_w, t)$ correspond à la probabilité que le saut le plus haut se soit produit à l'étage j . Cela nous permet de définir la fonction

de corrélation suivante

$$C(t_w + t, t_w) = \sum_{j=1}^K q_j (\Pi_j(t_w, t) - \Pi_j(t_w, t)) \quad (11.42)$$

Comme précédemment, nous allons maintenant calculer les transformées de Laplace $\hat{\Pi}_j(E, t)$. Pour cela, définissons $p_j(E; \tau_1, \dots, \tau_j)$ la probabilité de trouver le système dans un ensemble de pièges de temps caractéristique τ_1, \dots, τ_j , après une durée t_w tirée avec un taux E . Remarquons que le minimum de deux variables poissoniennes est aussi une variable poissonienne :

$$P(\min(t, t') = u) = \int_0^\infty dt dt' EE' e^{-Et} e^{-E't'} \delta(u - \min(t, t')) = (E + E') e^{-(E+E')u}.$$

Ce résultat nous permet d'obtenir la relation de récursion suivante :

$$p_{j+1}(E; \tau_1, \dots, \tau_{j+1}) = p_j(E; \tau_1, \dots, \tau_j) p_1(E_{j+1}; \tau_{j+1}) \quad (11.43)$$

où $E_{j+1} = E + \sum_{i=1}^j \frac{1}{\tau_i}$. De façon récursive, nous obtenons

$$p_j(E; \tau_1, \dots, \tau_j) = \prod_{i=1}^j p(E_i; \tau_i). \quad (11.44)$$

Pour un nombre fini de niveaux K , nous avons $E_j \tau_0^{(j)} = E \tau_0^{(j)} + \sum_{i=1}^{j-1} \tau_0^{(j)} / \tau_i^{(i)} \ll 1$, ce qui nous permet d'écrire

$$p_j(E; \tau_1, \dots, \tau_j) = \prod_{i=1}^j \frac{1}{x_i N_i c(x_i^{(i)}) (E \tau_0^{(i)})_i^x} \left(\frac{E_i \tau_i}{1 + E_i \tau_i} \right). \quad (11.45)$$

$\Pi_j(t_w, t)$ est la probabilité qu'aucun des j niveaux supérieurs n'ait basculé entre t_w et $t_w + t$: sa transformée de Laplace en t_w s'exprime donc comme

$$\hat{\Pi}_j(E, t) = \sum_{\tau_1, \dots, \tau_j} p_j(E; \tau_1, \dots, \tau_j) e^{-\frac{t}{\tau_1}} \dots e^{-\frac{t}{\tau_j}}. \quad (11.46)$$

Dans la limite où tous les N_i sont grands, nous en tirons l'expression intégrale

$$\hat{\Pi}_j(E, t) = \int_{\tau_0^{(1)}} d\tau_1 \dots \int_{\tau_0^{(j)}} d\tau_j e^{-t \sum_i \frac{1}{\tau_i}} \prod_{i=1}^j \frac{1}{c(x_i) E_i^{x_i}} \frac{E_i \tau_i^{-x_i}}{1 + E_i \tau_i}. \quad (11.47)$$

De même que pour le modèle à un niveau, on effectue alors le changement de variable $u_i = E_i \tau_i$, et l'expression de l'exponentielle $e^{-EX} = \int_0^{+\infty} dt_w E e^{-E t_w} \theta(t_w - X)$ pour obtenir l'expression formelle

$$\Pi_j(t_w, t) = \frac{1}{\prod_{i=1}^j c(x_i)} \int_0^1 \prod_{i=1}^j du_i u_i^{-x_i} (1 - u_i)^{x_i - 1} \theta \left(\prod_i u_i - \frac{t}{t + t_w} \right). \quad (11.48)$$

Résultats.

Comportement de la fonction de corrélation dans les deux cas limites :

– $t \ll t_w$.

$$C(t_w, t_w + t) = q_{EA} - (q_{EA} - q_{K-1}) \frac{\sin(\pi x_K)}{\pi(1-x_K)} \prod_{j=1}^{K-1} \frac{B(x_j, x_K - x_j)}{B(x_j, 1 - x_j)} \left(\frac{t}{t + t_w} \right)^{1-x_K} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{t}{t + t_w} \right)^{1-x_{K-1}} \right), \quad (11.49)$$

ce qui correspond à un comportement initial dominé par les puits les plus profonds.

– $t \gg t_w$: comportement dominé par les barrières les plus hautes :

$$C(t_w, t_w + t) = q_1 \frac{\sin(\pi x_1)}{\pi x_1} \left(\frac{t_w}{t + t_w} \right)^{x_1} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{t_w}{t + t_w} \right)^{x_1 + x_2} \right). \quad (11.50)$$

Analyse en détails du cas $K = 2$.

Nous allons considérer plus en détails le cas de l'arbre à deux niveaux.

A Faire : Finir la rédaction .

Dans ce cas, nous trouvons la même loi pour le premier niveau que dans le modèle à un seul niveau :

$$\Pi_1(E, t) = \frac{1}{c(x_1)} \int_{\tau_0^{(1)}}^{+\infty} d\tau_1 e^{-t/\tau_1} \frac{E^{1-x_1} \tau_1^{-x_1}}{1 + E\tau_1} \quad (11.51)$$

Pour le deuxième niveau, nous trouvons

$$\begin{aligned} \Pi_2(E, t) &= \\ & \frac{1}{c(x_1)c(x_2)} \int_{\tau_0^{(1)}}^{+\infty} d\tau_1 e^{-t/\tau_1} \int_{\tau_0^{(2)}}^{+\infty} d\tau_2 e^{-t/\tau_2} \frac{E^{1-x_1} \tau_1^{-x_1}}{1 + E\tau_1} \frac{(E + \tau_1^{-1})^{1-x_2} \tau_2^{-x_2}}{1 + (E + \tau_1^{-1})\tau_2} \end{aligned} \quad (11.52)$$

$$= \frac{1}{c(x_1)c(x_2)} \int_{E\tau_0^{(1)}}^{+\infty} dv_1 \int_{E(1+\tau_0^{(2)}/v_1)}^{+\infty} dv_2 e^{-Et[v_1^{-1} + v_2^{-1} + v_1^{-1}v_2^{-1}]} \frac{v_1^{-x_1}}{1 + v_1} \frac{v_2^{-x_2}}{1 + v_2}, \quad (11.53)$$

soit en transformée de Laplace inverse

$$\begin{aligned} \Pi_2(t_w, t) &= \\ & \frac{1}{c(x_1)c(x_2)} \int_0^1 dy_1 dy_2 y_1^{-x_1} (1 - y_1)^{x_1-1} y_2^{-x_2} (1 - y_2)^{x_2-1} \theta \left(y_1 y_2 - \frac{t}{t + t_w} \right) \end{aligned} \quad (11.54)$$

en utilisant $y_i = v_i/(1 + v_i)$, et la condition $v_1^{-1} + v_2^{-1} + v_1^{-1}v_2^{-1} = y_1^{-1}y_2^{-1} - 1 \leq t_w/t$. L'identité $\theta(y_1 y_2 - s) = \theta(y_1 - s)\theta(y_2 - s/y_1)$ nous permet d'obtenir l'expression finale en posant $s = t/(t + t_w)$:

$$\Pi_2(t_w, t) = \Pi_1(t_w, t) - \frac{1}{c(x_1)c(x_2)} \int_s^1 dy_1 \int_0^{\frac{s}{y_1}} dy_2 y_1^{-x_1} (1 - y_1)^{x_1-1} y_2^{-x_2} (1 - y_2)^{x_2-1} \quad (11.55)$$

A Faire : Finir analyse de $C(t_w, t_w + t) = q_1\Pi_1(t_w, t) + q_2\Pi_2(t_w, t)$.

...analyse de M_{TRM} avec l'expression

$$M_{TRM}(t_w, t_w + t) = \frac{H}{T} X_{qEA} \Pi_1(t_w, t), \quad (11.56)$$

nécessite d'aller chercher au moins $K = 2$, et donne un bon accord pour des échelles de temps entre $t = 10s$ et $t = 210^5 s = 100h$.

Bibliographie

- [1] *Ill Condensed Matter, Les Houches Session XXXI*. North Holland, 1978.
- [2] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization : Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42 :000673, 1979.
- [3] S.F. Edwards and P. W. Anderson. *J. Phys. F*, 5 :965, 1975.
- [4] E. Akkermans and G. Montambaux. *Physique mésoscopique des électrons et des photons*. CNRS Editions/EDP Sciences, 2004.
- [5] Vinay Ambegaokar, B. I. Halperin, and J. S. Langer. Hopping conductivity in disordered systems. *Phys. Rev. B*, 4 :2612, 1971.
- [6] P.W. Anderson, B.I. Halperin, and C.M. Varma. *Philos. Mag.*, 25 :1–9, 1972.
- [7] J.L. Black and B.I. Halperin. *Phys. Rev. B*, 16 :2879–2895, 1977.
- [8] Jean-Philippe Bouchaud and Marc Mézard. Universality classes for extreme-value statistics. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 30 :7997–8015, 1997.
- [9] M. Buttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 57 :1761, 1986.
- [10] S. Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [11] Bernard Derrida. Random-energy model : An exactly solvable model of disordered systems. *Phys. Rev. B*, 24 :2613, 1981.
- [12] Yoseph Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics*. Oxford University Press, 1997.
- [13] J.-M. Luck. *Systèmes Désordonnés Unidimensionnels*. CEA Editions, 1995.
- [14] G. Parisi. *Phys. Rev. Lett.*, 43 :1754, 1979.
- [15] W.A. Phillips. *Journ. of Low Temp. Phys.*, 7 :351–360, 1972.
- [16] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. *Phys. Rev.*, 35 :1972, 1975.

