



HAL
open science

Réseaux de Liquides de Luttinger Couplés

Kyrylo Kazymyrenko

► **To cite this version:**

Kyrylo Kazymyrenko. Réseaux de Liquides de Luttinger Couplés. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2005. Français. NNT: . tel-00010734

HAL Id: tel-00010734

<https://theses.hal.science/tel-00010734>

Submitted on 24 Oct 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Pierre et Marie Curie

THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité : PHYSIQUE THÉORIQUE

présentée par

Kyrylo KAZYMYRENKO

pour obtenir le titre de docteur de l'Université Paris VI.

Sujet :

Réseaux de Liquides de Luttinger Couplés

Soutenue le 13 octobre 2005 devant la commission d'examen composée de :

Claude ASLANGUL	Président
Benoît DOUÇOT	Directeur de thèse
Lev IOFFE	Rapporteur
Frank HEKKING	Rapporteur
Dominique MAILLY	Examineur
Gilles MONTAMBAUX	Examineur
Inès SAFI	Examineur

à Olga

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au sein du Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies de l'Université Pierre et Marie Curie. J'y ai bénéficié d'une ambiance scientifique enrichissante et de conditions de travail exceptionnelles : merci à ses deux directeurs successifs, d'abord Laurent Baulieu qui m'y a accueilli en 2002, puis Olivier Babelon, qui m'a soutenu jusqu'à la fin.

Je tiens à exprimer ma plus vive reconnaissance à mon directeur Benoît Douçot sans lequel je n'aurais sans doute jamais eu l'occasion de me pencher sur ce sujet de thèse aussi profondément. J'ai beaucoup apprécié nos nombreuses discussions, pendant lesquelles Benoît m'expliquait, et réexpliquait et réexpliquait les phénomènes physiques "simples", dont il possède une compréhension parfaite.

J'adresse mes respectueux remerciements à Claude Aslangul, Dominique Mailly, Gilles Montambaux et Inès Safi qui m'ont fait le plaisir d'être membres du jury ainsi que Lev Ioffe et Frank Hekking qui ont si gentiment accepté d'être rapporteurs de cette thèse. Merci pour leurs questions et leur intérêt pour ce sujet.

Grand merci à Bruno Machet qui m'a donné des cours particuliers de natation ; merci pour son soutien moral. C'est lui qui m'a poussé à donner mon premier séminaire.

Merci également à Julien Vidal qui me consacra de son temps pour m'introduire aux problèmes de cages. C'est grâce à lui et à Bertrand Delamotte que j'ai significativement enrichi mon vocabulaire et ai fait de nombreux progrès en français. Je subodore, que l'ambiance durant les déjeuners-sandwiches du midi, n'aurait été que du délire total, si Dominique Mouhanna n'avait pas été présent. J'ai déploré pendant quelques mois que Léonie Canet fût partie avec son "tea time" en Angleterre, jusqu'à l'arrivée de Mark Görbig qui a introduit la pose café plus traditionnelle pour la France. Je le remercie aussi pour avoir relu mon manuscrit. Si ce dernier ne comporte qu'un nombre dénombrable d'erreurs c'est tout d'abord grâce à Mark. Je suis reconnaissant à Herr Doktor Dusuel pour ses conseils avisés en \LaTeX et Linux. Mes connaissances du vin n'auraient jamais été les mêmes sans les discussions à ce sujet avec un ami slave Dražen Zanchi. C'est à cause de Bertrand Roehner que je ne comprends plus pourquoi l'eau tourne dans un lavabo. Merci aussi à Alain Laverne et Bernard Diu pour les conversations sur la physique générale.

Une partie des résultats phénoménologiques obtenues dans cette thèse est le fruit d'une collaboration avec le groupe d'expérimentateurs du Laboratoire de Photonique et Nanostructures à Marcoussis. Je suis personnellement très reconnaissant à Joseph Dufouleur pour le temps qu'il m'a accordé. La fréquentation de collègues expérimentateurs s'est révélée très stimulante dans ce domaine de la physique théorique dont la progression dépend de façon cruciale des avancées expérimentales.

Le pot de thèse à la russe ne serait jamais resté dans les mémoires sans l'aide de mes amis, et tout particulièrement celle d'Elena et Anton.

L'ambiance du midi, où se discutaient souvent des sujets tout autres que la physique était également très sympathique, donc un grand merci à Jean-Bernard Zuber, Marc Bellon, Karim Benakli, Boris Pioline, Michel Talon, Claude Viallet, Matthieu Tissier, Rémi Moseri, François Arleo, Pedro Bordalo, Nicolas Couchoud pour ces moments, et merci aussi à Vladimir Dotsenko, Matteo Cacciari, Fedor Smirnov et le fameux JeF. Bruno Durin et Guillaume Bossard reçoivent aussi une distinction pour m'avoir aidé à appliquer la théorie de cordes en matière condensée. Merci à Redamy Perez pour ses astuces de Fortran.

Je dois beaucoup à Marco Picco, qui était toujours disponible pour m'aider dans mes problèmes informatiques. Je n'oublie pas nos attentives secrétaires Sylvie Dalla-Foglia, Marie-Christine Lévy, Annie Richard et Valérie Sabouraud, qui m'ont procuré des conditions de travail plus qu'agréables durant ces trois années.

J'ai gardé un excellent souvenir de ma première expérience d'enseignement, tant pour la gentillesse des étudiants que pour la sympathie de mes deux supérieurs directs Helène Zanni et Laurence Talini.

Mes pensées vont à mes amis et camarades, ainsi qu'à mes familles russe et française. Je termine par le plus important, à celle qui m'a soutenu, épaulé, encouragé et corrigé, un immense remerciement, simplement pour tout.

Contents

Introduction	9
1 Réseau carré de fils quantiques	11
1.1 Filament quantique	14
1.1.1 Gaz bidimensionnel d'électrons	15
1.1.2 Réseaux de filaments	17
1.2 Matrice de diffusion	20
1.3 Oscillations de Friedel	25
1.3.1 Exemple d'oscillation de Friedel	25
1.3.2 Cas général	27
1.3.3 Commensurabilité sur réseau	31
1.4 Equation de Schrödinger sur le graphe	38
1.5 Bosonisation	42
1.5.1 Des fermions vers les bosons	43
1.5.2 Modèle de Frenkel-Kontorova quantique	48
1.5.3 Approche variationnelle quantique	56
1.6 Réseaux réguliers de Liquides de Luttinger	62
1.6.1 Présentation de l'article	62
1.6.2 Article [KD05]	63
1.7 Conclusion	63

2 Réseaux \mathbb{Z}_2	79
2.1 Cages d'Aharonov-Bohm	80
2.2 Réalisation expérimentale	83
2.2.1 Réseau supraconducteur	83
2.2.2 Réseau de fils quantiques	84
2.3 Article [KDD05]	84
3 Réseau \mathbb{Z}_2 de jonctions Josephson et dissipation	101
3.1 Modèle quantique pour une JJ	103
3.2 Une source de courant quantique	107
3.3 Quantification canonique	110
3.4 Modèle de Caldeira-Leggett : un cas simple	113
3.4.1 Transformée de Fourier sur un demi-axe du temps	115
3.4.2 Etat stationnaire en présence du courant continu	117
3.5 Deux modèles quasi-classiques	119
3.5.1 Modèle unidimensionnel	121
3.5.2 Modèle bidimensionnel	123
Conclusion	129
Appendices	131
A Propriétés de la matrice \hat{S}	133
A.1 $\hat{S}(k)$ pour k négatives	133
A.2 Deux impuretés consécutives	137
A.2.1 Deux fonctions δ	139
A.3 Matrice de diffusion ponctuelle	140
A.4 Relation de complétude pour un problème monocanal	142
B Calcul en réponse linéaire pour le réseau de fonctions δ	145

C	Mode locking	147
D	Diagonalisation d'une matrice symplectique	149
D.1	Matrice \mathcal{H} définie positive	149
D.2	Quantification canonique générale	151
E	Modèle continu de l'Hamiltonien de dissipation	153
	Bibliographie	157



Introduction

Les nanotechniques ouvrent des champs immenses à la fois en recherche fondamentale et vers de nombreuses applications industrielles. Nul doute que ces techniques contribueront à amplifier les progrès premièrement de l'électronique, mais aussi de la communication, la cosmétique ou encore du textile. Toutefois les vingt dernières années ont vu des avancées extraordinaires dans les domaines de leur élaboration et leur observation ainsi que des études théoriques de leurs propriétés.

La nanoélectronique est un outil parfaitement adapté pour sonder les propriétés mésoscopiques des systèmes de la taille intermédiaire entre les échelles classiques et quantiques. En permettant un contrôle ultime des composants de la matière, nous arrivons au comportement le plus intrinsèque (quantique), souvent le plus "intéressant", des objets quasiment visibles à l'oeil nu, mais fabriqués "à un nanomètre près". En effet, les nombreuses propriétés originales présentes au niveau atomique sont souvent effacées par des effets de moyennage ou d'écrantage des interactions au moment du passage à une échelle macroscopique, associée à l'émergence d'un monde classique. Comme par exemple la nature fractionnaire de porteurs des charges dans les conducteurs unidimensionnels. C'est alors un défi pour la physique moderne de pouvoir transposer les effets quantiques à l'échelle macroscopique où chaque pas vers l'avant est classifié souvent comme une découverte (effet d'Hall, microscopie à effet tunnel etc.).

Nous nous sommes intéressés dans cette thèse à la traduction de la nature ondulatoire des charges et aux phénomènes d'interférence qu'elles peuvent produire, vers les propriétés de transport électronique à travers les trois types d'échantillons : les nanotubes, les filaments quantiques ou encore les jonctions Josephson. Dans tous les systèmes que nous avons considérés, les effets d'interaction électronique jouent un rôle crucial.

Dans les années soixante-dix, les hétérostructures à base de semi-conducteurs naissent en même temps que la technique d'élaboration de couches minces avec un contrôle nanométrique des épaisseurs déposées. Ceci permet actuellement de graver les passages électroniques unidimensionnels¹ (filaments quantiques) pour pouvoir tester les effets de la cohérence électronique dans le transport balistique $1D$. Les nanotubes

¹Pour être rigoureux il faut noter que les filaments quantiques actuels ont plusieurs canaux de conduction et sont donc quasi-unidimensionnels. Néanmoins, pour simplifier les notations j'omettrai le préfixe "quasi" dans la suite.

de carbone, qui possèdent de plus des étonnantes caractéristiques mécaniques, fournissent aussi une réalisation expérimentale de conducteurs unidimensionnels. Dans les deux premiers chapitres de cette thèse, nous avons étudié les propriétés de transport électronique dans les réseaux $2D$ de fils unidimensionnels, là où en plus des effets mentionnés auparavant, la physique multidimensionnelle à grande échelle peut être observée, ainsi que l'influence de la géométrie joue un rôle important. Dans le premier chapitre nous avons utilisé les calculs analytiques élaborés (groupe de renormalisation, solution de l'équation de Schrödinger sur le graphe), tandis que seuls les arguments de symétrie ont été nécessaires pour produire la plupart des résultats du deuxième chapitre.

Dans la troisième partie, qui est basée essentiellement sur les raisonnements et l'intuition physique, nous avons étudié les réseaux de jonction Josephson avec une géométrie particulière (la même que pour la section précédente). Ces objets peuvent être utilisés dans le futur comme des cellules d'information quantique (q-bit). En vu de vastes applications le domaine de l'information quantique se développe énormément partout dans le monde [IGF⁺02, BH00, IFI⁺02]. Nous avons proposé le modèle d'un spectromètre pour ces q-bits, qui remplacera l'utilisation des techniques actuelles très élaborées par de simples mesures de la caractéristique courant-tension et en conséquence diminuera considérablement la complexité des expériences. Le couplage avec l'environnement étant modélisé à travers la dissipation, nous avons répondu à certaines questions conceptuelles, comme le modèle quantique d'une source de courant.

Chapter 1

Réseau carré de fils quantiques

Dans cette partie de ma thèse j'ai étudié différents aspects du transport électronique dans les réseaux de fils conducteurs balistiques (*filaments ou fils quantiques*). L'ambition était de trouver la dépendance de la résistance en fonction de la température pour un échantillon "type". On a commencé par l'étude détaillée du réseau de fils carré, mais après avoir fait les calculs on a pu généraliser les résultats pour les réseaux plus complexes, *les réseaux équidistants* Fig. 1.2.

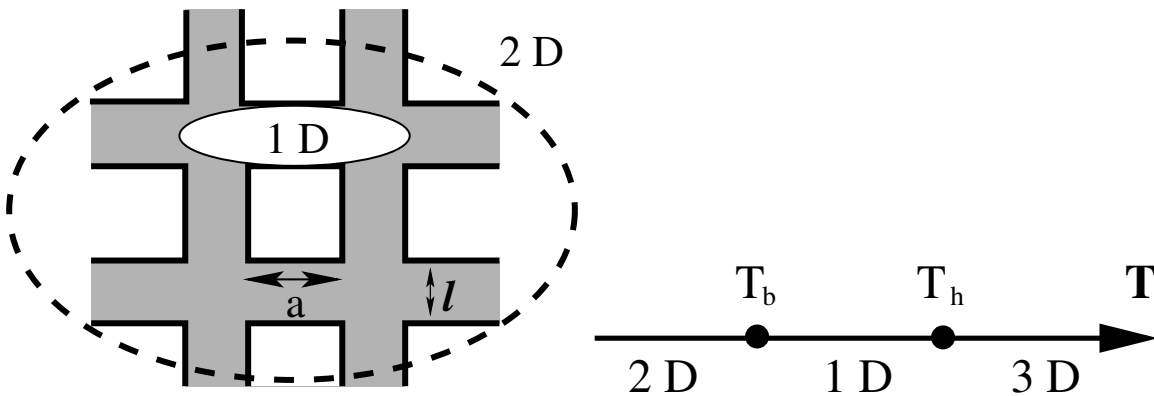


FIGURE 1.1: Les réseaux de fils quantiques présentent une physique multidimensionnelle à différentes températures. A hautes températures $T > T_h = \hbar v_F / (k_B l)$ les électrons se propagent d'une manière non cohérente.¹ Pour les basses températures, $T_b < T < T_h$, le transport est quantique le long d'un pas de réseau (*régime 1D*). A des températures encore plus basses $T < T_b = \hbar v_F / (k_B a)$ les effets bidimensionnels doivent dominer (*régime 2D*).

Pourquoi est-ce qu'on s'intéressait au réseau de fils quantiques? Tout d'abord parce qu'on peut observer *la physique multidimensionnelle* à différentes échelles de température. Comme j'ai déjà mentionné dans l'introduction, à très hautes températures les fluctuations thermiques réduisent considérablement la longueur de

la cohérence¹ de phase électronique, et les propriétés de transport deviennent purement classique (*régime 3D*).² L'abaissement de la température augmente la longueur de cohérence. Selon le principe d'incertitude de Heisenberg, les électrons se propageront d'une façon cohérente pendant les temps inférieurs à $\Delta t = \hbar/(k_B T)$.³ Si pendant ce temps les électrons parcourent les distances ($v_F \Delta t$) comparables au pas du réseau a , les effets unidimensionnels doivent se manifester (*régime 1D*); $\frac{\hbar v_F}{k_B a} < T < \frac{\hbar v_F}{k_B l}$ où l est la largeur du fil et a est sa longueur, Fig. 1.1.⁴ A très basses températures le transport électronique devient cohérent sur tout l'ensemble du réseau bidimensionnel, en conséquence dans ce régime les effets *2D* domineront. Les propriétés de transport électronique doivent fortement dépendre du facteur de remplissage électronique. Par l'analyse superficielle on peut imaginer deux scénarios complètement opposés pour l'état fondamental dans le régime *2D*. Le premier consiste à évoquer un joli résultat de Kane et Fisher [KF92a] : ils ont montré que l'adjonction d'une seule impureté sur un filament quantique parfait suffit à supprimer complètement la conductivité de ce système à température nulle, si les interactions sont répulsives. L'explication physique simple a été donnée dans [YGM94]. Les auteurs ont remarqué qu'en plaçant une impureté dans un fil quantique, on engendre des oscillations de densité électronique (*oscillations de Friedel*) qui décroissent si l'on s'éloigne du point d'inhomogénéité, en conséquence l'électron est diffusé par le nuage d'électrons qui s'est formé autour de l'impureté. Transposé au cas du réseau, ce scénario conduit à prédire un état fortement corrélé et totalement isolant. Une autre façon de voir consiste à invoquer l'invariance par translation du réseau parfait, ce qui permettrait de diagonaliser l'Hamiltonien simultanément avec l'opérateur de translation et écrire donc les fonctions propres comme les solutions délocalisées de Bloch. Connaissant la limite de l'interaction électronique évanescence [VMD00], pour certains remplissages on devrait observer l'état conducteur.⁵ Ce scénario correspond davantage à ce que l'on observe sur des conducteurs fortement anisotropes (cristaux de polymères conducteurs), ou encore dans les réseaux périodiques d'impuretés Kondo. Le phénomène de la dépendance des propriétés de transport en fonction du remplissage électronique sera appelé la *commensurabilité sur réseau*, et à la fin de ce chapitre on répondra à la question de savoir comment évolue la résistance du réseau de filaments avec le changement de densité électronique dans les fils.

Pour décrire correctement les réseaux de fils quantiques il faudrait bien comprendre les détails de leur fabrication. On doit pouvoir répondre aux nombreuses questions qui se posent : quelle est la distance typique d'interaction électronique dans les filaments quantiques, à quelles conditions les interactions sont-elles importantes et enfin comment modéliser les jonctions de fils ?

¹La notion de cohérence ici est celle qu'on utilise en optique.

²Ce n'est pas ce régime qui est intéressant physiquement, car il n'a rien de particulier lié aux fils quantiques.

³ k_B est la constante de Boltzmann.

⁴les ordres de grandeur pour $T_h = \frac{\hbar v_F}{k_B t} \approx 100 K$ et $T_b = \frac{\hbar v_F}{k_B a} \approx 1 K$.

⁵Cette conclusion n'est pas triviale, car on doit prendre en compte les interactions électroniques, qui jouent le rôle crucial dans les fils quantiques en comparaison avec les métaux ordinaires.

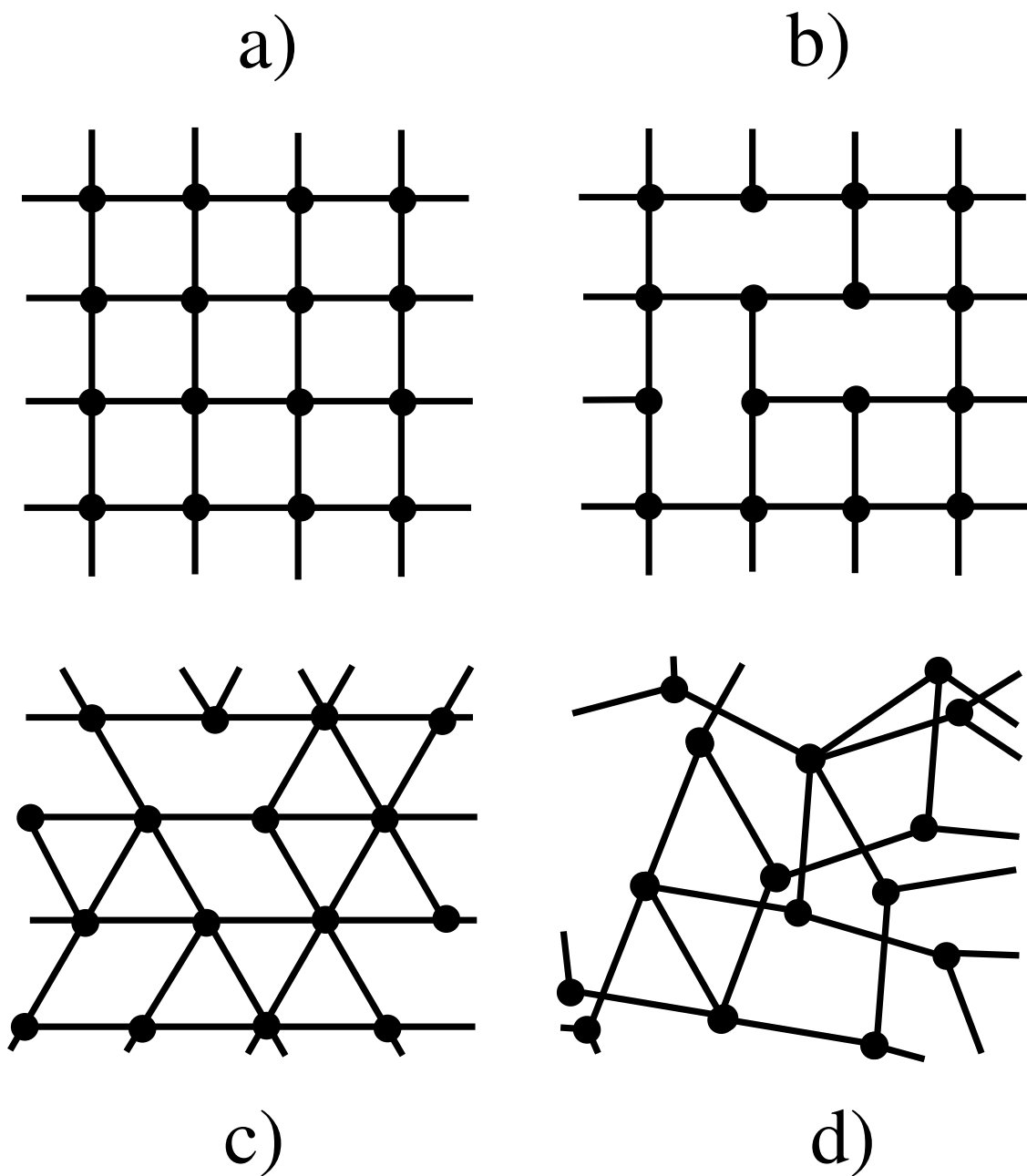


FIGURE 1.2: Quelques exemples des réseaux équidistants, qui ne sont pas forcément périodiques. Ils sont caractérisés par une seule longueur – le pas du réseau. Certains réseaux périodiques font partie des réseaux équidistants, comme le réseau carré **a)**. Les défauts de fabrication peuvent transformer un réseau périodique en un réseau équidistant en enlevant un certain nombre de connexions entre les jonctions, **b)** et **c)**. Le graphe **d)** n'est qu'une illustration mathématique, sa réalisation expérimentale est difficilement imaginable. Sur ces figures les électrons peuvent être diffusés seulement dans les jonctions marquées par les cercles noirs.

Ce chapitre commence par l'introduction à la fabrication des réseaux de filaments quantiques. Sans donner beaucoup de détails techniques (certainement utiles pour les expérimentateurs), j'expliquerai dans les grandes lignes la méthode de leur production et leur structure. Ceci nous permettra de conclure que les interactions entre les électrons dans les fils sont à courte portée et que les jonctions de fils peuvent être bien décrites par la matrice de transfert (matrice \hat{S}). Je préciserai ensuite la définition de cette matrice et je donnerai ses principales propriétés. Dans la section suivante j'expliquerai en détail le phénomène physique, appelé oscillations de Friedel, qui détermine la physique du transport électronique aussi bien dans le régime 1 D, que dans le régime 2 D (Fig. 1.1). La section "Equation de Schrödinger sur le graphe" décrit la méthode algébrique qui généralise la notion de structure de bande pour la solution de l'équation de Schrödinger définie sur une géométrie de graphe. Cette méthode nous permettra de généraliser nos résultats (obtenus pour le réseau carré) pour les réseaux équidistants. A la fin de ce chapitre je présenterai mes résultats pour deux cas extrêmes : là où on peut négliger les interactions électroniques et le cas où on est obligé de bosoniser notre théorie pour traiter les interactions d'une façon non-perturbative.

1.1 Filament quantique

Les semi-conducteurs avaient attiré déjà l'attention des Anciens pour leurs propriétés médicales ou tout simplement leurs couleurs.⁶ Ce n'est qu'au vingtième siècle que les scientifiques commencent à exploiter les effets liés au transport électronique. Il y a trente ans, J.I. Alferov (prix Nobel 2000) propose d'utiliser les jonctions de semi-conducteurs comme des atomes artificiels pour produire des lasers.⁷ Actuellement en utilisant les mêmes types d'hétérojonctions de semi-conducteurs, on peut tester les effets de corrélation électronique dans les échantillons de taille de quelques millimètres [TM04].

Dans les structures semi-conductrices où le mouvement dans une des directions est borné, on observe les effets de quantification selon cet axe. En conséquence à basses températures le mouvement électronique devient bidimensionnel du point de vue quantique aussi, ce qui change significativement le comportement électronique. Il est naturel de faire encore un pas vers l'avant et de limiter le mouvement électronique à une dimension. *Les filaments (fils) quantiques sont les objets où le mouvement électronique est borné à une dimension⁸ et les électrons peuvent se propager d'une façon cohérente sur des distances supérieures à quelques dizaines de μm .* La production de filaments se fait en plusieurs étapes, d'abord on fabrique l'hétérojonction où le gaz bidimensionnel se forme et ensuite par les méthodes de lithographie électronique on obtient les fils unidimensionnels. Ces deux étapes sont décrites en détails dans les deux sections suivantes.

⁶C'est le cas de l'arsenic (*As*), qui grâce à sa couleur jaune était objet d'intérêt majeur pour les alchimistes au XVIII siècle.

⁷Les lecteurs CD actuels utilisent ce principe de fonctionnement.

⁸Comme j'ai mentionné auparavant, en réalité les fils quantiques sont quasi 1D.

1.1.1 Gaz bidimensionnel d'électrons. Hétérojonction $GaAlAs/GaAs$.

Le principe de fabrication du gaz bidimensionnel est assez simple. A la surface de séparation de deux semi-conducteurs une discontinuité des bandes d'énergie se forme à cause de la différence de permittivité diélectrique. A l'aide du champ électrique, nous pouvons bloquer les électrons de la bande de conduction à la surface de séparation de deux semi-conducteurs et obtenir ainsi le gaz bidimensionnel.

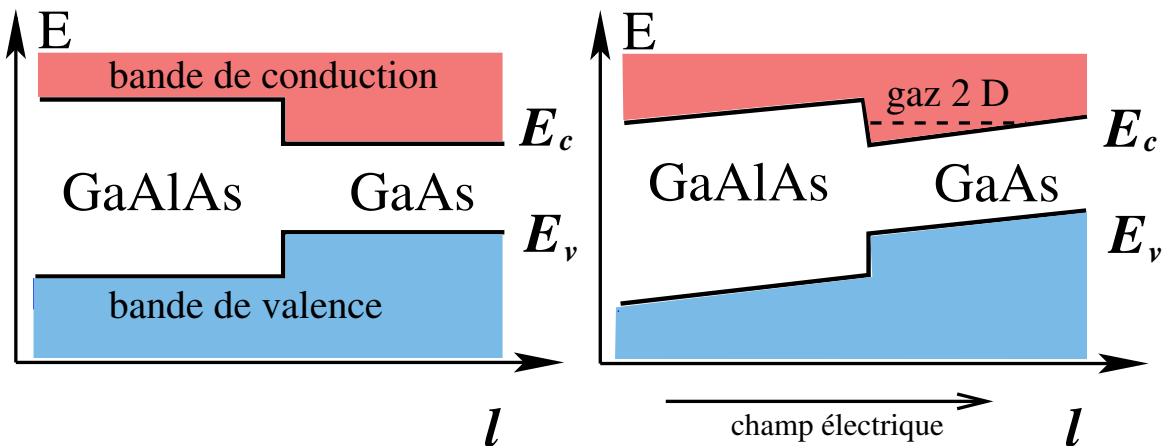


FIGURE 1.3: La jonction idéale $GaAlAs/GaAs$. A cause de la différence de permittivité diélectrique de deux semi-conducteurs, le champ dipolaire intense crée une discontinuité des bandes de conduction E_c et de valence E_v . L'application d'un léger champ électrique perpendiculaire à la surface de séparation des composants (le long de l'axe l) bloquera les porteurs dans la bande de conduction. On obtient ainsi le gaz bidimensionnel à la surface de séparation de deux semi-conducteurs.

De nombreux problèmes apparaissent dès qu'on essaie de mettre ces idées simples en pratique. Pour obtenir une jonction nette il faut se soucier de la compatibilité des structures cristallines des semi-conducteurs en question. Une jonction de deux semi-conducteurs structurellement différents produira toutes sortes de défauts cristallins, comme des dislocations ou des fautes d'empilement, et on aura une transition trop lisse entre les bandes de conduction pour pouvoir obtenir un gaz bidimensionnel. Pour éviter cet obstacle on peut utiliser les jonctions de semi-conducteurs composés, comme $GaAs$, $InSb$, $CdTe$ etc. L'avantage de ces semi-conducteurs est qu'on peut facilement changer la valeur de leur gap énergétique en remplaçant partiellement un des éléments chimiques par un élément avec la configuration électronique analogue. Les plus utilisés en pratique sont les composés III-V. Il y a neuf composés binaires qui combinent les éléments arsenic (As), antimoine (Sb) ou phosphore (P) du groupe V du tableau périodique de Mendeleev avec des éléments du groupe III comme le gallium (Ga), l'aluminium (Al) ou l'indium (In). Pour obtenir un gaz 2D dans une jonction idéale il faut courber les bandes pour qu'un puits de potentiel apparaisse. Une des possibilités

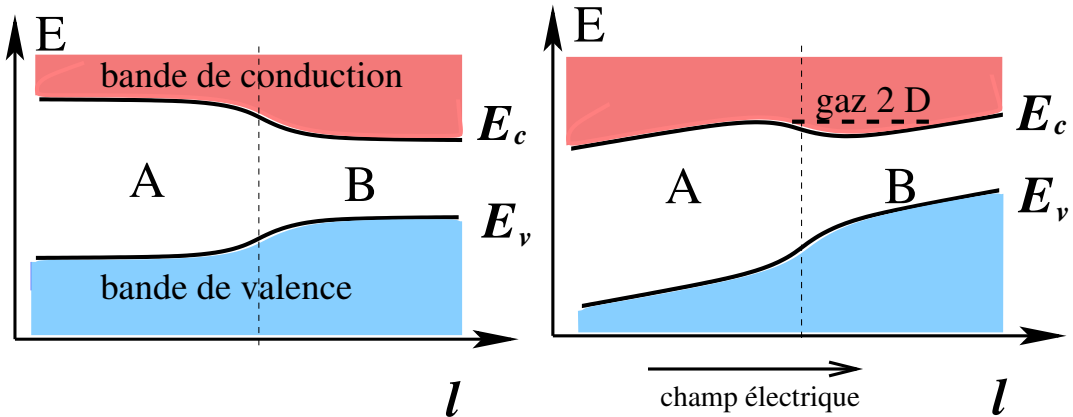


FIGURE 1.4: La jonction de deux semi-conducteurs A et B de structure cristallographique différente. L'évolution des bandes devient lisse due à la présence des défauts cristallins. Le puits de potentiel n'étant pas profond, il est difficile, voir impossible, d'obtenir le gaz d'électrons $2D$.

est de déposer une couche métallique et d'appliquer une tension qui attirera les électrons vers la surface de séparation des semi-conducteurs (Fig. 1.3 et 1.4). Cette méthode ne serait pas pratique si l'on voulait ensuite fabriquer les fils quantiques à partir de ce gaz bidimensionnel, car il faudrait dans ce cas déposer un fil métallique et le maintenir à un potentiel positif en permanence. En effet il est possible de juste déposer une couche supplémentaire d'un semi-conducteur dopé positif. Cette couche aura donc un double rôle : en plus de donner ses électrons nécessaires pour la formation du gaz, elle créera un champ électrique constant.

Dans le groupe expérimental de Marcoussis,⁹ avec lequel j'ai collaboré pendant ma thèse les hétérojonctions sont fabriquées sur la base de l'arséniure de gallium $GaAs$. Une telle jonction consiste en une couche de $GaAs$ non dopé ($\approx 2 \mu\text{m}$), puis une couche de son composé binaire de plus grand gap $GaAlAs$ (90 nm) et une couche du même alliage $GaAlAs$ dopé positif en silicium (10 nm). Une couche de surface de $GaAs$ protège l'empilement contre l'oxydation de l'aluminium (Fig. 1.5). Les électrons libérés par les atomes de donneur (Si) se distribuent sur tout l'échantillon. Une fraction de ces électrons s'accumule à la surface de séparation des deux semi-conducteurs non dopés $GaAlAs/GaAs$. Ils sont attirés par les charges positives situées dans la couche dopée, mais ne peuvent pas franchir la barrière potentielle du champ dipolaire, à cause de la différence de permittivité diélectrique de l'arséniure de gallium et son alliage ternaire (Fig. 1.5). Dans ces hétérojonctions on obtient un gaz $2D$ électronique avec la mobilité de l'ordre de $5 \cdot 10^6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ et la longueur de Fermi allant de 10 à 100 nm. L'avantage de ses hétérojonctions par rapport au premier cas envisagé est qu'on peut graver dans ce gaz $2D$ toutes sortes de réseaux bidimensionnels.¹⁰ Dans la section suivante je décris rapidement la technique de gravure et discute les modèles théoriques

⁹J.Dufouleur et D. Mailly, Laboratoire de Physique et Nanostructure (LPN)

¹⁰Les mêmes réseaux réalisés en métal ont en général libre parcours élastique moyen significativement inférieur dû à la présence d'impuretés.

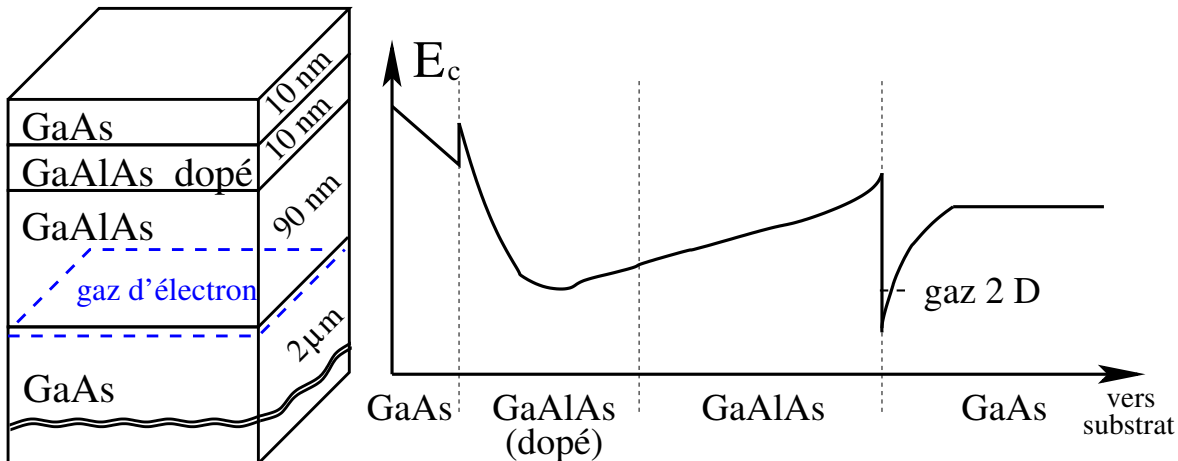


FIGURE 1.5: Réalisation expérimentale du gaz d'électron $2D$ dans une hétérojonction $GaAlAs/GaAs$. Le gaz bidimensionnel se forme à la surface de séparation de $GaAs$ et son alliage ternaire $GaAlAs$. Les électrons sont stabilisés dans un puits de potentiel par la couche dopée positive de $GaAlAs$. La couche de surface protège l'échantillon contre l'oxydation.

pour les réseaux de fils, compte-tenu des méthodes de leur production.

1.1.2 Réseaux de filaments

Nous pouvons faire encore un pas en avant et restreindre le mouvement électronique dans le gaz $2D$ à une seule dimension. Ainsi nous pourrions obtenir non seulement les fils quantiques tous simples, mais aussi les réseaux de fils de différentes géométries. Pendant ma thèse j'ai étudié le transport électronique dans le réseau carré et le réseau dit \mathbb{Z}_2 . Ces deux types de réseaux sont obtenus à l'aide de la technique de la lithographie électronique et de la gravure. Le principe physique est très simple. Nous avons vu dans la section précédente, que c'est la présence de la couche dopée en silicium qui crée le gaz électronique, il suffit alors de détruire cette couche partout sauf sur un seul brin pour passer à une dimension.¹¹ Un simple bombardement par les ions lourds détruira la couche dopée. Etant lourd un ion ne pourra pas pénétrer dans l'échantillon en profondeur et se recombinera avec les atomes de silicium en neutralisant la couche dopée.¹² Pour créer un réseau de fils quantiques il faut protéger une partie de l'échantillon contre le bombardement ionique. Cela se fait en cinq étapes. Sur une couche supplémentaire de résine, déposée sur l'échantillon, on dessine le futur réseau par un faisceau électronique. Ensuite par évaporation on couvre l'échantillon par une couche fine métallique, qui protégera l'empilement contre le bombardement ionique. Une couche métallique dans les régions où la résine n'a pas été exposée au rayonnement électronique est enlevée à l'aide d'un solvant qui dissout la résine. Le schéma est présenté sur la figure 1.6. Pour plus de détails voir [Nau02].

¹¹Sur le même principe on obtient une géométrie quelconque de fils unidimensionnels.

¹²Les échantillons de Marcoussis sont bombardés par les ions d'Argon Ar .

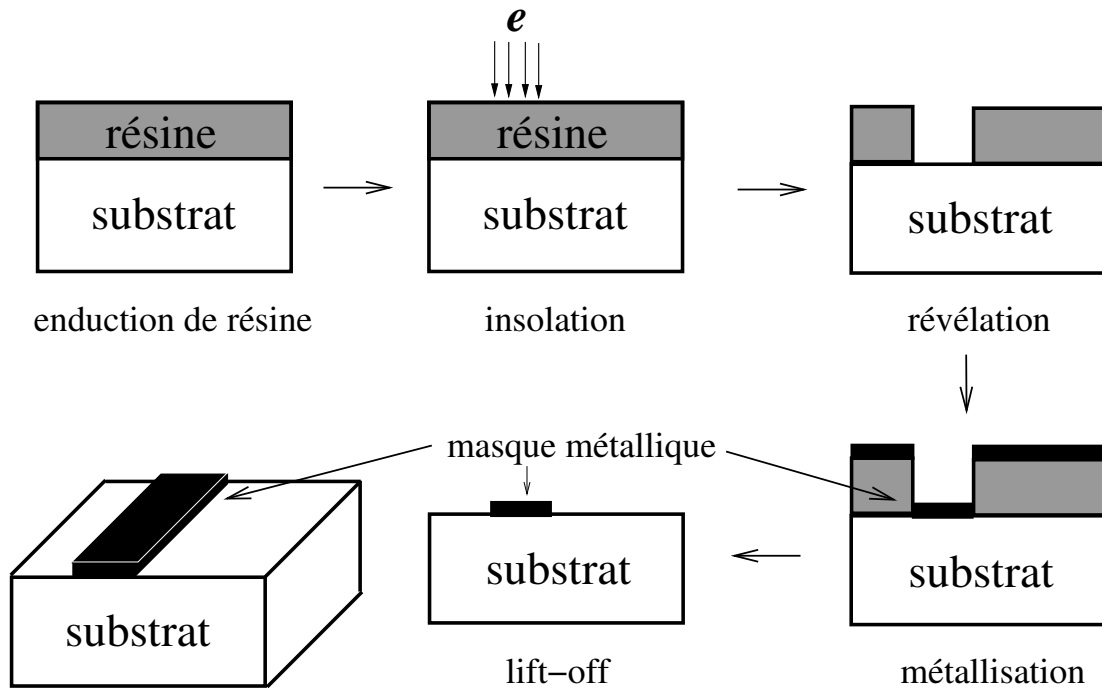


FIGURE 1.6: La lithographie électronique a pour but de déposer sur l'échantillon une couche métallique, qui le protégera pendant le bombardement des ions d'Argon.

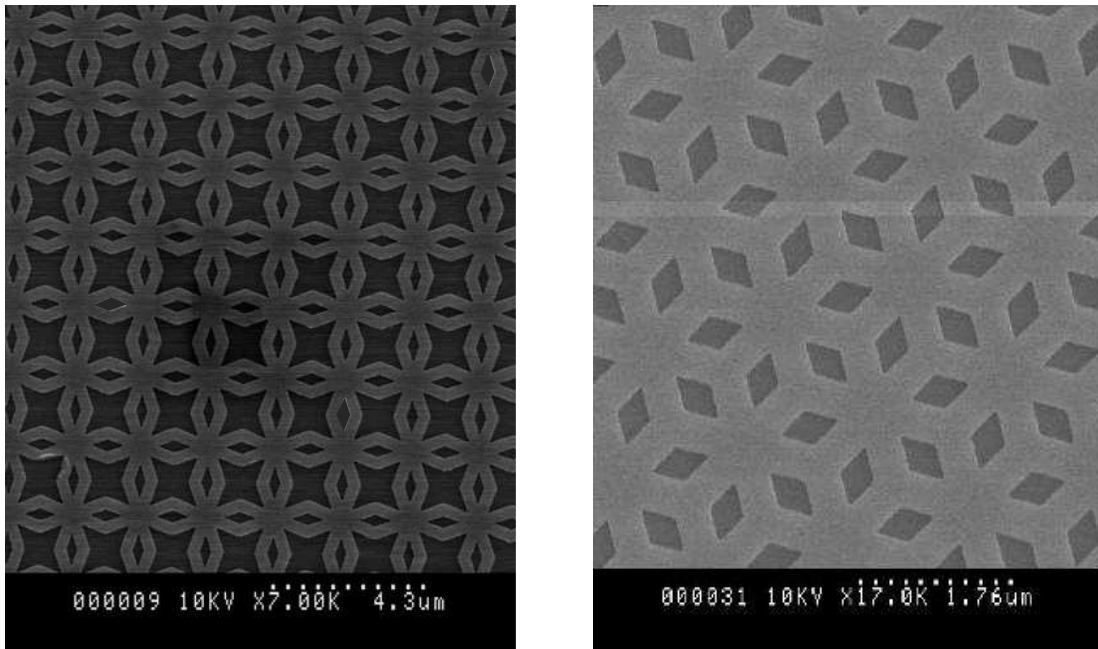


FIGURE 1.7: Images du masque métallique de réseaux Z_2 et "dice" (T_3) obtenues avec un microscope électronique à balayage MEB (*ang.* : EBM, Electron Beam Microscope).

Sur la figure 1.8 on voit comment par bombardement de l'échantillon, couvert d'un masque métallique, on crée une déplétion du gaz $2D$ dans les régions non protégées.

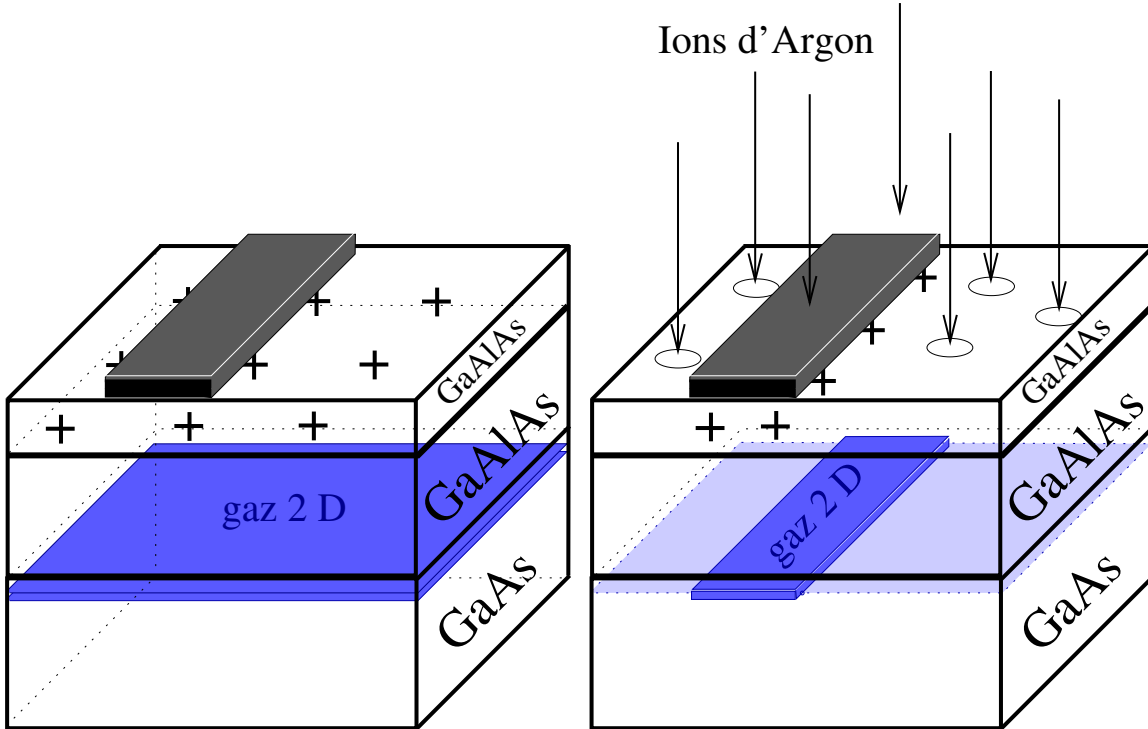


FIGURE 1.8: Pendant la gravure, l'échantillon, couvert d'un masque métallique, est bombardé par les ions négatifs de l'Argon créant ainsi une déplétion dans le gaz électronique dans les régions non protégées.

Quel modèle analytique faut-il choisir pour décrire correctement le mouvement électronique dans les réseaux de filaments quantiques (Fig. 1.7)? Nous avons constaté que la charge totale du gaz électronique dans les fils est écrantée par les ions de Silicium de la couche dopée. Typiquement la distance entre le gaz et la couche dopée est au moins un ordre de grandeur inférieure au pas du réseau, ce qui nous indique que les électrons interagissent dans un seul fil et on peut négliger les interactions entre les fils différents. Première conclusion : *l'interaction électronique est à courte portée.*

A hautes densités électroniques dans les filaments quantiques, l'énergie d'interactions électroniques est négligeable en comparaison avec l'énergie cinétique.¹³ Dans le cas limite où l'on peut oublier complètement les effets d'interaction, un électron se propage d'une façon balistique sur tout le réseau grâce à la présence de collisions élastiques (Fig. 1.9). Le fait que les interactions électroniques intra-brin sont plus pertinentes que celles intre-brins, justifie la description du réseau, comme un gaz d'électrons unidimensionnel avec les jonctions modélisées par la matrice de transfert, matrice \hat{S} .¹⁴

¹³l'énergie cinétique est proportionnelle à la densité de gaz $2D$, tandis que l'énergie potentielle augmente comme la racine carré de la densité électronique.

¹⁴J'introduis la matrice de transfert dans la section 1.2 page suivante

Cette dernière incorpore dans sa définition la géométrie de la jonction, aussi bien que les effets d'interaction lors que les électrons se croisent.

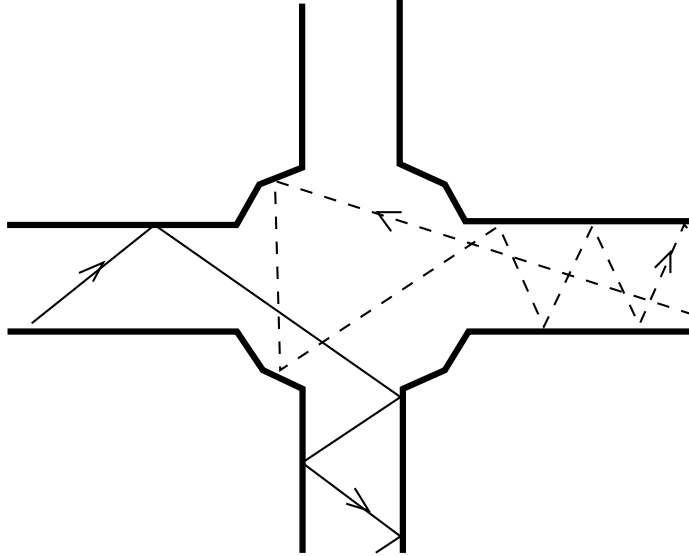


FIGURE 1.9: Le schéma de la diffusion élastique d'électrons dans une jonction. Même en l'absence d'interaction, les électrons diffusent sur tout le réseau bidimensionnel.

Récapitulatif de la section :

Vu la méthode de fabrication d'un réseau de filaments quantiques, on conclut que dans une bonne approximation, il peut être considéré comme un ensemble de fils, portant un gaz d'électrons $1D$. Les électrons n'interagissent entre eux qu'à l'intérieur du même fil ou dans les jonctions, qui sont décrites par la matrice de diffusion. L'interaction électronique à l'intérieur d'un fil est écrantée et donc à courte portée.

1.2 Matrice de diffusion

Dans les problèmes de diffusion, pour retrouver le comportement des fonctions d'onde électroniques à l'infini par rapport au centre de diffusion, il est plus commode d'utiliser à la place de l'équation de Schrödinger ou de Dirac une équation intégrale équivalente. Ainsi ce n'est plus la forme exacte du potentiel qui intervient dans les calculs, mais la matrice de diffusion (*scattering matrix*) [SWR90, DJ94, UA96],¹⁵ qui incorpore les informations sur la diffusion des ondes planes. Connaissant cette matrice on pourrait a priori résoudre le problème inverse de la diffusion et retrouver le potentiel qui en est la cause, mais la solution n'est pas toujours unique et le problème en soi relève souvent de difficultés particulières. Dans cette section j'introduirai la notion de la matrice de diffusion dans le cas simple de l'intersection de fils quantiques.

¹⁵qui est parfois appelée la matrice de transfert, la matrice de scattering ou la matrice- \hat{S}

Supposons d'abord qu'on a un fil quantique avec une impureté localisée autour du point $x = 0$, et qu'en plus la densité électronique est très élevée de façon qu'on puisse négliger les interactions entre les électrons. L'équation de Schrödinger prend la forme suivante :

$$[\hat{H}_0 + V(x)]\psi = E\psi \quad (1.1)$$

où $\hat{H}_0 = p^2/(2m)$ est l'Hamiltonien d'électrons libres et $V(x)$ le potentiel de l'impureté localisée autour de $x = 0$, tel que $V(x) = 0$ si $x \notin [x_{min}, x_{max}]$.

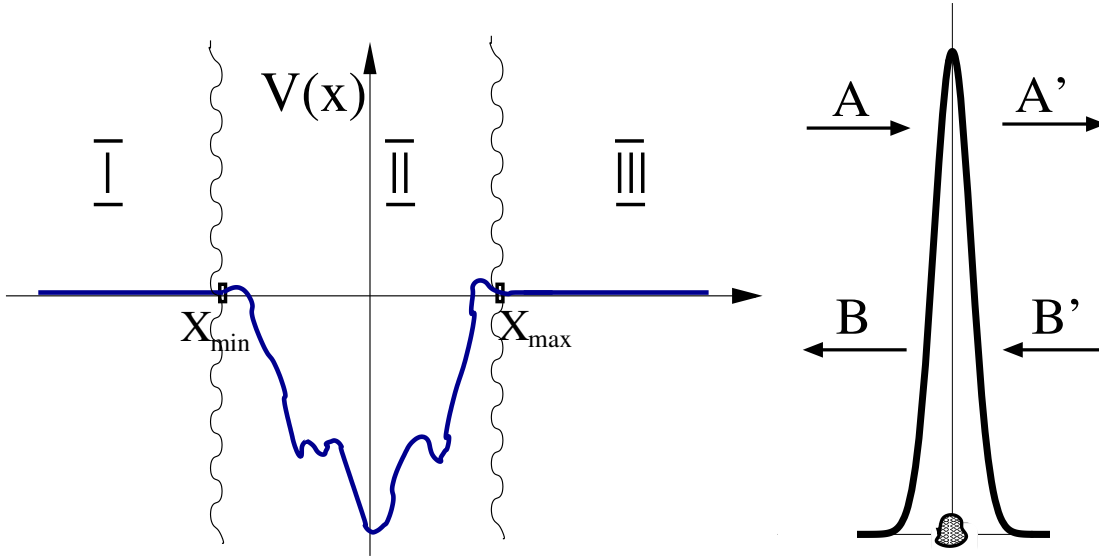


FIGURE 1.10: Représentation schématique d'un potentiel d'impureté localisé $V(x)$. Quelle que soit la forme du potentiel la solution de l'équation de Schrödinger hors de l'intervalle $[x_{min}, x_{max}]$ est donnée par les ondes planes, ce qui permet de définir la matrice de diffusion. Les coefficients A, B correspondent aux amplitudes de propagation vers la droite et la gauche respectivement.

L'Hamiltonien \hat{H} est un opérateur hermitien pour les fonctions qui sont bornées à l'infini, $|\psi(x)| < \infty$ pour $x \rightarrow \pm\infty$. Dans le cas général, son spectre est une composition d'une partie continue pour $E > 0$ et d'une autre partie discrète pour $E < 0$. Les états liés existent sûrement si, par exemple, l'intégrale de l'énergie potentielle est négative, $(\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx < 0)$. Considérons d'abord les énergies propres positives, $k = \sqrt{2mE}/\hbar^2 > 0$. La solution existe pour toutes les valeurs de k réelles positives. Dans les régions I et III elle est donnée par les ondes planes :

$$\phi_k(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{pour } x < x_{min} \\ A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} & \text{pour } x > x_{max} \end{cases} \quad (1.2)$$

Une équation différentielle du second ordre est définie à deux constantes près. Si on fixe la solution à gauche de l'impureté en choisissant les valeurs des constantes A et B , on pourra reconstruire la solution à droite. On peut penser au problème de Cauchy,

en fixant la fonction et sa dérivée dans un point donné, la solution unique existe et on peut toujours trouver sa valeur dans n'importe quel autre point. Donc il existe deux fonctions α et β qui relient les solutions de gauche et de droite : $A' = \alpha(A, B)$ et $B' = \beta(A, B)$. Comme l'équation de Schrödinger est en plus linéaire, ces fonctions sont, elles aussi, linéaires, et on peut ainsi écrire la dépendance sous une forme matricielle.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} \equiv \hat{\mathcal{P}} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Dans le cas où le potentiel d'impureté est une fonction continue de x , la matrice $\hat{\mathcal{P}}$ existe toujours et son déterminant ne s'annule pas ; $\det \hat{\mathcal{P}} \neq 0$. Cette matrice est un objet intéressant du point de vue mathématique, mais il n'est pas évident d'y voir les propriétés physiques de l'impureté. Pour cette raison on utilise en physique plutôt la matrice de diffusion, définie par :

$$\begin{pmatrix} A' \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B' \\ A \end{pmatrix} \equiv \hat{S} \begin{pmatrix} B' \\ A \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

où la matrice de diffusion \hat{S} , dépend des coefficients de la matrice $\hat{\mathcal{P}}$.

Le sens physique des éléments de la matrice \hat{S} devient tout de suite évident : r, r' sont alors les coefficients de réflexion respectivement à gauche et à droite et t, t' les coefficients de transmission. Les propriétés physiques du problème sont en effet codées dans la matrice \hat{S} . Commençons par la conservation du courant, qui donne :

$$j_k = \frac{e\hbar}{2mi} (\phi_k^* \frac{d}{dx} \phi_k - \phi_k \frac{d}{dx} \phi_k^*) \implies |A|^2 - |B|^2 = |A'|^2 - |B'|^2 \quad (1.5)$$

On conclut que la conservation du nombre de particules impose l'unitarité de la matrice \hat{S} : $\hat{S}\hat{S}^\dagger = I$ ou soit pour les composantes : $|r|^2 + |t|^2 = |r'|^2 + |t'|^2 = 1$ et $|r| = |r'|$. Cette propriété de la matrice de diffusion n'est valable que pour les énergies positives. La conservation du courant, définie dans (1.5), pour les valeurs $E < 0$, soit pour $ik < 0$, ne donne plus l'unitarité de la matrice de diffusion, mais une relation différente :

$$j_k = \text{const} \implies \text{Im } A^* B = \text{Im } A'^* B' \quad (1.6)$$

Donc il faut être très prudent en utilisant l'unitarité de la matrice de diffusion, elle ne peut être unitaire que pour les valeurs de k réelles. La symétrie d'inversion du temps peut aussi être exprimée à l'aide de la matrice \hat{S} . Comme la fonction d'onde conjuguée décrit la propagation dans la direction opposée, le changement de $A \leftrightarrow B^*$ et $A' \leftrightarrow B'^*$ doit laisser l'Eq. 1.4 intacte. Ceci se traduit par $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^*$. Compte-tenu de l'unitarité, la matrice de diffusion doit être symétrique $\hat{S} = \hat{S}^t$. Il est important de noter que la matrice \hat{S} est symétrique seulement telle qu'elle est définie dans l'Eq. (1.4). On aurait pu a priori choisir la définition où on inversait la position des coefficients de transmission et de réflexion. Dans ce cas l'invariance par inversion du temps, exprimée à l'aide de la matrice de diffusion, sera une relation plus complexe. L'invariance par inversion du temps relie les coefficients de transmission gauche et droite, mais ne fournit aucune information sur les termes de réflexion. On pourrait de la même manière associer différentes symétries du système avec les propriétés de la matrice \hat{S} .

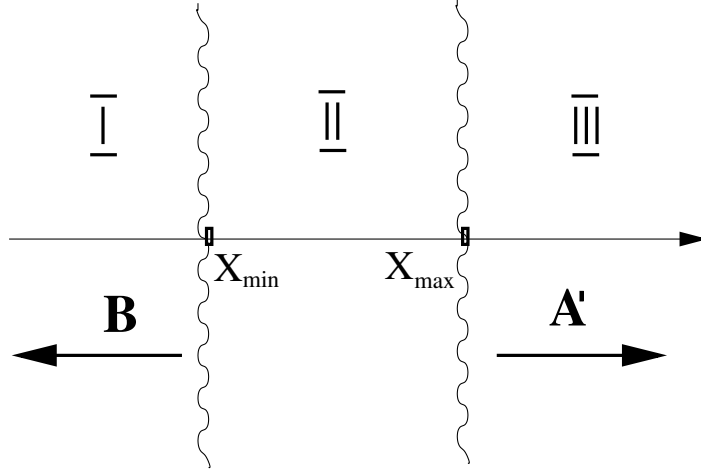


FIGURE 1.11: Représentation schématique d'un état lié. Pour les valeurs négatives d'énergie, soit pour $ik < 0$, les amplitudes A' et B correspondent aux coefficients devant les exponentielles qui décroissent à l'infini : $A'e^{-|k|x}$ et $Be^{|k|x}$.

La connaissance de la matrice de diffusion en fait donne beaucoup plus d'information que juste les symétries du système ou les propriétés de diffusion des ondes planes. Les pôles complexes de cette matrice correspondent aux états liés de l'Hamiltonien. Pour le confirmer, regardons la relation entre les matrices \hat{S} et \hat{P} ,

$$\hat{S} = \frac{1}{p_{11}} \begin{pmatrix} -p_{12} & 1 \\ \det \hat{P} & p_{21} \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

Pour certaines valeurs de l'énergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, la matrice de diffusion en effet n'est pas bien définie. Soit $p_{11} = 0$, en se rappelant la définition de la matrice \hat{P} , on trouve qu'il existe une solution telle que les amplitudes des ondes incidentes sont nulles ($A = B' = 0$) au même temps que les amplitudes des ondes sortantes sont non nulles ($A' \neq 0, B \neq 0$). Vice versa, s'il existe une solution caractérisée par seules deux amplitudes sortantes non nulles ($A' \neq 0, B \neq 0, A = B' = 0$), alors $p_{11} = 0$. Donc les pôles de la matrice de diffusion correspondent aux états liés de l'opérateur de Hamilton \hat{H} . Un état de diffusion ($E > 0$) ne peut pas avoir cette forme (Fig. 1.11), car cela signifiera (1.5) que l'impureté est une source de courant permanent.

Sur la figure 1.11 on voit clairement la présence d'un état lié. Les états liés peuvent apparaître pour les niveaux d'énergie inférieurs à la valeur du potentiel à l'infini et si cette valeur est égale à zéro, dans le cas où l'intégrale du potentiel est négative. Comme à l'infini l'énergie potentielle, telle qu'elle était définie plus haut, tend vers zéro, on n'aura pas de pôles pour les valeurs de k positives, par contre pour certaines formes de potentiel local on pourrait avoir des pôles de la matrice de diffusion à des valeurs de k imaginaires. Seules les pôles avec la partie imaginaire positive¹⁶ correspondent aux états

¹⁶La matrice de diffusion possède aussi les pôles sur le plan complexe pour les valeurs $ik > 0$. Ces résidus correspondent aux niveaux énergétiques virtuels, qui se trouvent dans la feuille de Riemann non physique. Voir A.1

liés de l'Hamiltonien, car seulement pour ces valeurs la fonction d'onde est décroissante à l'infini ; il existe $k = i\omega$, ($\omega > 0$) tels que $|\psi(x)| \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$. Cette remarque sur les pôles de la matrice \hat{S} sera nécessaire lors de l'analyse de complétude des fonctions dans la partie 1.5 page 42.

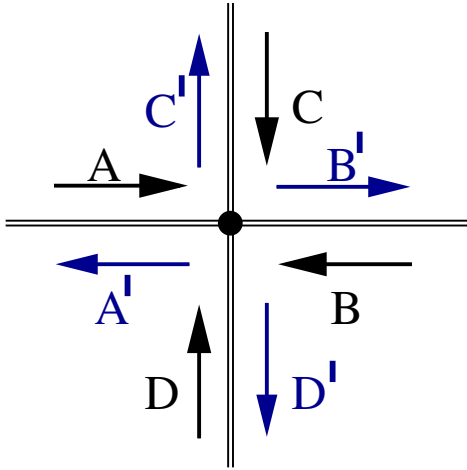


FIGURE 1.12:

La jonction de deux fils quantiques peut être décrite à l'aide de la matrice \hat{S} de dimension 4×4 .

Pour modéliser mathématiquement les croisements de fils quantiques on pourrait considérer une jonction comme une impureté localisée où les électrons peuvent se diffuser dans les différentes branches. A haute densité électronique quand les interactions entre les électrons sont négligeables, le réseau de filaments quantiques dans une bonne approximation peut être approché par les électrons libres qui interagissent aux nœuds du réseau décrits par la matrice de diffusion. Par exemple, la jonction de deux fils quantique (Fig. 1.2) sera décrite par la matrice de diffusion 4×4 , dont la forme la plus générale est :

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \\ C' \\ D' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_A & t_{BA} & t_{CA} & t_{DA} \\ t_{AB} & r_B & t_{CB} & t_{DB} \\ t_{AC} & t_{BC} & r_C & t_{DC} \\ t_{AD} & t_{BD} & t_{CD} & r_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}$$

Récapitulatif de la section :

- 1) La notion de la matrice de diffusion peut être utilisée pour décrire les jonctions des fils quantiques. La dimension de cette matrice est égale au double du nombre de fils qui se croisent, elle peut être impaire pour les jonctions du type Y ou T.
- 2) Les symétries du problème sont codées dans la matrice \hat{S} : l'invariance par rapport à l'inversion du temps¹⁷ correspond à la symétrie de la matrice de diffusion $\hat{S}^* = \hat{S}^{-1}$, la conservation du nombre de particules à l'unitarité $\hat{S}^\dagger \hat{S} = \mathbb{I}$.
- 3) La matrice de diffusion considérée comme fonction d'énergie complexe possède les pôles à des énergies négatives, qui ne sont rien d'autre que les états liés du potentiel associé.

¹⁷L'invariance par rapport à l'inversion du temps est brisée en présence du champ magnétique.

1.3 Oscillations de Friedel

Les oscillations de Friedel sont les oscillations de densité électronique qui apparaissent dans le gaz d'électrons, induites par la présence d'une impureté. Elles sont caractérisées par la fréquence d'oscillation $2k_F$, k_F étant le vecteur d'onde de Fermi, et par la décroissance algébrique en loi de puissance en fonction de la distance à l'impureté. Ce phénomène général est crucial pour divers systèmes physiques. Ainsi il est responsable de l'apparition d'un état fondamental quasiment dégénéré dans les verres de spin : les impuretés avec un moment magnétique non nuls induisent les oscillations de densité de spin ce qui rend l'état fondamental très complexe, le système ayant beaucoup de positions d'équilibre métastables. Cet effet est aussi à base de l'interaction d'échange indirecte RKKY. A une dimension les oscillations de Friedel engendrent l'effet de commensurabilité sur réseau, dont on parlera en détails plus loin.

Je commence par un exemple très simple d'oscillation de Friedel, qui nécessite juste la connaissance de base de la mécanique quantique.

1.3.1 Exemple d'oscillation de Friedel

Supposons qu'on a un fil quantique où les électrons peuvent se propager sans interagir entre eux. Contrairement à ce qu'on pense naturellement, ceci correspond au cas d'une densité électronique élevée, car à une dimension l'énergie cinétique est proportionnelle au carré de la densité électronique, tandis que l'énergie potentielle augmente linéairement avec la densité : $E_c \sim n^2$ et $E_p \sim n$. Les fonctions d'onde sont simplement les ondes planes et en remplissant les niveaux énergétiques jusqu'à la valeur k_F , nous obtenons la densité électronique constante partout dans le fil :

$$\psi_k(x) \sim e^{\pm ikx}; \quad n_0 = 2 \int_0^{k_F} \frac{dk}{\pi} |\psi_k|^2 = \frac{2k_F}{\pi}$$

Que se passe-t-il si l'on place à l'origine des coordonnées un mur imperméable $V(x=0) = \infty$. Les solutions à une particule doivent s'annuler au point zéro $\psi_k(x=0) = 0$. Un calcul simple nous montre l'apparition d'oscillations de densité :

$$\psi_k(x) \sim \sin kx; \quad \sin^2(kx) = \frac{1 - \cos(2kx)}{2} \Rightarrow n_{imp} - n_0/2 \sim \frac{\sin(2k_F x)}{x}$$

Cet élémentaire exemple a cependant la forme presque la plus générale d'oscillations de Friedel à une dimension. Il suffit de rajouter juste une phase constante ϕ pour avoir le cas général à condition de faible interaction électronique :

$$\Delta n(x) \sim \frac{\sin(2k_F|x| + \phi)}{|x|} \quad (1.8)$$

Les oscillations de Friedel à une dimension sont les oscillations au vecteur d'onde $2k_F$, qui décroissent à l'infini comme $1/x$. Ce comportement est modifié à forte interaction

électronique [EG95, LLS96] : la décroissance asymptotique devient en x^{-K} , K étant le coefficient d'interaction.¹⁸

Regardons maintenant comment change la décroissance d'oscillations si l'on se place à trois dimensions.¹⁹ La densité du gaz d'électrons sans interaction est constante comme avant :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}; \quad n_0 = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk_x dk_y dk_z |\psi_{\vec{k}}|^2 = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Nous avons choisi le potentiel d'impureté à courte portée de telle sorte que seule les ondes s (moment d'impulsion $l = 0$) soient affectées par la présence de l'impureté. Les solutions d'équation de Schrödinger sont données par les fonctions sphériques de Bessel. Ces fonctions peuvent être construites par une procédure récursive, mais leur comportement à l'infini est identique, $\psi_k(r) \sim \sin(kr)/r$ si $r \rightarrow \infty$. En calculant la densité électronique en présence d'une telle impureté, on s'aperçoit que l'amplitude des oscillations décroît comme la puissance trois de la distance :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim \frac{\sin(kr)}{r} \quad \Rightarrow \quad \Delta n(r) \sim \int_0^{k_F} \frac{\cos(2kr)}{r^2} k^2 dk \sim \frac{\sin(2k_F r)}{r^3} + O(r^{-4})$$

où $k = |\vec{k}|$ et $r = |\vec{r}|$ sont les modules des vecteurs correspondants. L'exposant de la décroissance change si l'on passe à deux ou trois dimensions, *les oscillations de Friedel à d dimension prennent la forme suivante* :

$$\Delta n(x) \sim \frac{\sin(2k_F |r| + \phi)}{|r|^d}$$

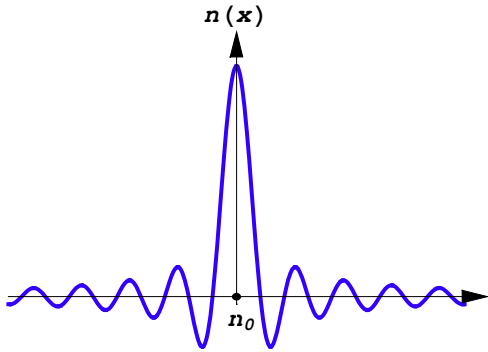
Les considérations de cette section ne prétendent pas être très rigoureuses et complètes, néanmoins elles permettent de comprendre l'origine de phénomène physique observé par Friedel [Fri58].

On voit que la raison principale de l'apparition des oscillations est la (quasi) continuité du spectre du problème près de l'énergie de Fermi, car c'est l'intégration par parties du carré de la fonction d'onde sur le spectre près de la valeur $k = k_F$ qui produit les oscillations au vecteur d'onde $2k_F$. De l'autre côté il est nécessaire d'avoir une région près de la surface de Fermi, dont les fonctions d'onde propres ont un comportement identique à l'infini. Ces fonctions oscillent à l'infini et ne décroissent pas plus vite que la puissance de la distance, sinon on n'aurait jamais la décroissance en puissance des oscillations de Friedel. Une partie de ces conditions est satisfaite grâce à la continuité du spectre (comportement oscillant), mais il faut en plus que le potentiel d'impureté décroisse suffisamment vite. A ce point, on pourrait se poser la question pourquoi ce raisonnement ne s'applique pas au cas sans impureté. La question est tout à fait pertinente. En l'absence de l'impureté les oscillations ne sont pas présentes grâce à l'invariance du système par translation dans l'espace. Grosso modo la probabilité de trouver une des particules dans un point donné oscille en fonction de la position où elle est observée, mais le fait de sommer sur toutes les particules et en prenant en

¹⁸ $K = 1$ décrit les électrons sans interaction, $K < 1$ ($K > 1$) correspond au cas répulsif (attractif).

¹⁹toujours dans l'approximation de faible interaction électronique.

compte qu'elles sont indistinguables, nous produit une densité homogène. Par contre la présence d'une impureté, comme on a vu dans les deux exemples, nous déforme l'espace des états propres, ce qui se manifeste par la présence d'oscillations de Friedel. *La présence de l'impureté brise la symétrie de translation dans l'espace.* Pour aller plus loin je mentionne que la symétrie de translation peut être brisée spontanément et les oscillations de densité peuvent se dévoiler. Ceci est au cœur du phénomène prédit par Peierls et Fröhlich dans les années cinquantes pour le métal quasi-unidimensionnel, mentionné dans la littérature comme *l'instabilité de Peierls* [Pei96].



Dans la section suivante nous confirmerons les résultats de cette section avec une approche plus générale, en faisant le calcul au premier ordre de perturbation.

1.3.2 Oscillation de Friedel : cas général

Cette section est conçue pour les personnes qui préfèrent penser en termes de réponse linéaire. Nous obtiendrons les mêmes résultats que dans la section précédente en étudiant les propriétés de la susceptibilité de charge calculée en premier ordre de perturbation. Les oscillations de Friedel à une dimension. Les oscillations de densité électronique autour de

la valeur moyenne n_0 , dues à la présence d'une impureté. Supposons qu'on a un fil quantique où les électrons sont presque libres. Si l'on néglige les interactions électroniques et la variation spatiale du potentiel extérieur la surface de Fermi consiste en deux points $\pm k_F$, et les électrons sont décrits par l'Hamiltonien libre $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m)$. La densité électronique est uniforme et égale à $2k_F/\pi$.²⁰

Maintenant nous prenons en compte l'inhomogénéité du potentiel extérieur $\delta V(x)$. Comment changera la densité? Une des possibilités pour répondre à cette question est liée au calcul de la susceptibilité de charge. Par définition la *susceptibilité de charge* est la réponse linéaire de la densité électronique à la perturbation du potentiel extérieur :²¹

$$\delta\rho(x) \stackrel{\text{def}}{\iff} \int dx' \chi(x-x') \delta V(x') \quad (1.9)$$

Vu la définition de la susceptibilité, il est souvent plus simple d'analyser les propriétés de sa transformée de Fourier :

$$\delta\rho(q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{iqx} \rho(x) dx = \chi(q) \delta V(q) \quad (1.10)$$

Donc pour retrouver la susceptibilité de charge on doit exprimer la valeur moyenne de

²⁰On a pris en compte la dégénérescence de spin.

²¹Dans cette partie on dénotera la densité électronique par ρ , comme c'est la notation la plus utilisée en seconde quantification.

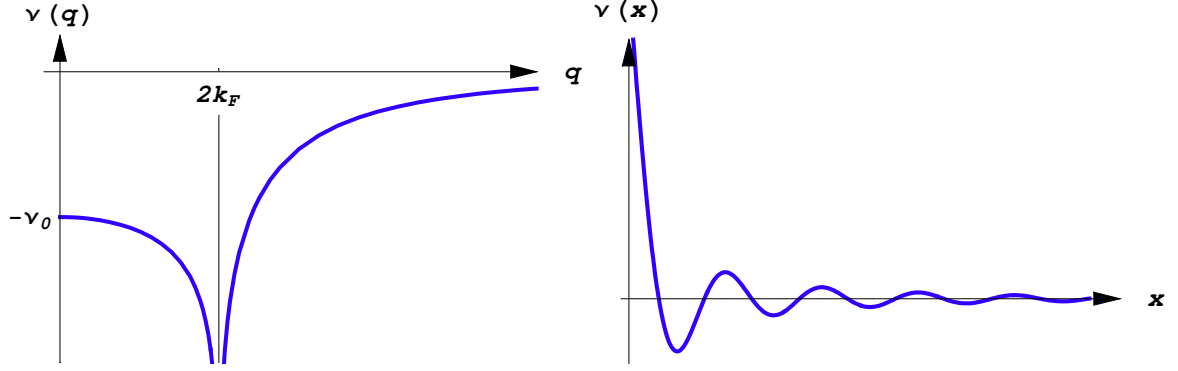


FIGURE 1.14: La susceptibilité de charge $1D$ et sa transformée de Fourier. La divergence à $2k_F$ dans l'espace de Fourier est responsable de la présence d'oscillations dans l'espace réel.

la densité électronique dans l'état fondamental perturbé $|\psi\rangle$ en fonction du potentiel d'impureté δV . Dans le premier ordre de perturbation on obtient :

$$\langle \psi | \delta \rho(q) | \psi \rangle = \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \phi_0 | \rho(q) | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \delta V | \phi_0 \rangle}{E_0 - E_n} + \text{h.c.}$$

où ψ est l'état fondamental de l'Hamiltonien perturbé et $|\phi_n\rangle$ la base complète des états propres de l'Hamiltonien non perturbé \hat{H}_0 : $\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$, $|\phi_0\rangle$ est un état fondamental. On voit que les états excités qui doivent être pris en compte lorsqu'on calcule χ au premier ordre de perturbation sont les excitations de type particule-trou.²² La susceptibilité de charge s'écrit sous la forme :

$$2\pi\chi(q) = \int_{|k| \leq k_F, |k+q| \geq k_F} dk [\epsilon_0(k) - \epsilon_0(k+q)]^{-1} + \{q \leftrightarrow -q\} \quad (1.11)$$

Ici je note par $\epsilon_0(k) = \hbar k^2 / (2m)$ la dispersion des électrons non perturbés. Le calcul de l'intégrale nous conduit à l'expression suivante pour la susceptibilité de charge dans l'espace de Fourier :

$$\begin{aligned} \chi(q) &= \frac{m}{\hbar^2 \pi} \int_{k_F-q}^{k_F} dk \frac{1}{k^2 - (k+q)^2} + \{q \leftrightarrow -q\} = \\ \chi(q) &= -\frac{\nu_0}{2x} \log \left| \frac{1+x}{1-x} \right|, \quad \text{où } x = \frac{q}{2k_F} \text{ et } \nu_0 = \frac{m}{\pi \hbar^2 k_F} \end{aligned} \quad (1.12)$$

La susceptibilité de charge diverge en un seul point $q = 2k_F$. La transformation de Fourier inverse, la susceptibilité dans l'espace réel est présentée sur la figure 1.14, elle oscille au vecteur d'onde $2k_F$ et tend vers zéro comme $1/x$. Les oscillations proviennent

²²car la densité d'état est une somme des excitations de type particule-trou $\rho(q) = \sum_k c_{k+q}^\dagger c_k$.

de la divergence à $2k_F$ dans l'espace de Fourier, tandis que le comportement en $1/x$ tire son origine du fait que dans l'espace de Fourier la susceptibilité reste finie à $q = 0$. Ce comportement de la susceptibilité de charge ressemble trop aux oscillations de Friedel pour avoir une origine différente. En réalité, la susceptibilité n'est rien d'autre que la densité électronique en présence d'un potentiel de perturbation de type δ : soit $V(x) = V_0\delta(x - x_0)$ alors $\delta\rho(x) = V_0\chi(x - x_0)$. On retrouve l'origine des oscillations de Friedel exprimée dans un langage différent.

Physiquement la divergence de la susceptibilité signifie que le système a la tendance à former les ondes de densité à ce vecteur d'onde $2k_F$ ou autrement dit, le système subit le plus grand changement d'état initial si le potentiel de perturbation a une importante composante de Fourier à $q = 2k_F$. Cet effet est directement lié à la présence d'excitations d'énergies arbitrairement basses. On voit sur la figure, qu'il existe aussi des excitations de basse énergie au vecteur d'onde nul $q = 0$, qui ne produisent pourtant aucune divergence de la susceptibilité. Cette question est assez intéressante pour être traitée plus en détail. Effectivement, dans la théorie de perturbation, la contribution à la réponse linéaire est dominée par les excitations de basse énergie, cependant le principe de Pauli conduit à la suppression de la densité d'état pour les excitations de vecteur d'onde nul. Introduisons la densité d'état électronique :

$$2\pi\nu(q, \omega) = \int_{|k| \leq k_F, |k+q| \geq k_F} dk \delta[\hbar\omega + \epsilon_0(k) - \epsilon_0(k+q)] \quad (1.13)$$

La susceptibilité s'écrit comme simple intégrale sur les fréquences :

$$\chi(q) = -2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \nu(q, \omega) \quad (1.14)$$

Cette forme nous confirme la précédente affirmation que ce sont les excitations de basse fréquence qui contribuent le plus à la divergence de la susceptibilité. Pour simplifier

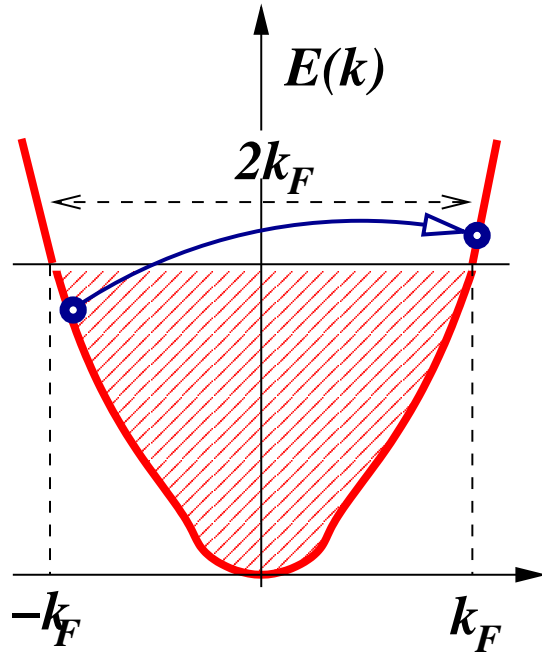


FIGURE 1.15:

La dispersion énergétique d'électrons libres. Il y a deux types d'excitations de basses énergies, au vecteur d'onde $q = 0$ et au vecteur d'onde $q = 2k_F$. Seules les excitations $2k_F$ sont pertinentes pour le calcul de la susceptibilité de charge.

l'expression de la densité d'état on remarque, que pour les électrons libres :

$$\delta[\hbar\omega + \epsilon_0(k) - \epsilon_0(k+q)] = \frac{m}{\hbar^2 q} \delta\left[\frac{m\omega}{\hbar q} - q/2 - k\right]$$

$$\int_{\Omega} \delta[f(q) - k] dk = \begin{cases} 1 & \text{si } \{k = f(q)\} \in \Omega \\ 0 & \text{dans le cas contraire} \end{cases}$$

ou Ω est un domaine arbitraire d'intégration. En conséquence, la densité dans les régions autorisées ne dépend pas de ω :

$$\nu(q, \omega) = \frac{m}{2\pi\hbar^2 q}, \quad \text{si } \left|\frac{m\omega}{\hbar q} - \frac{q}{2}\right| \leq k_F, \quad \left|\frac{m\omega}{\hbar q} + q/2\right| \geq k_F \quad (1.15)$$

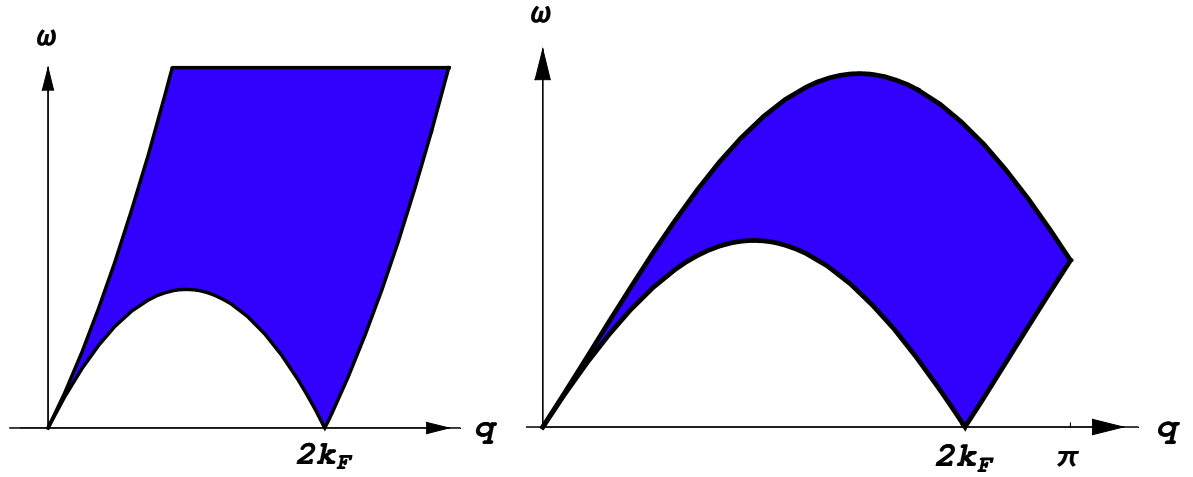


FIGURE 1.16: Le support de la densité d'états pour les électrons libres (gauche) et dans l'approximation de liaisons fortes (droite). Les deux densités d'états possèdent deux vecteurs d'onde, pour lesquels il existe des excitations de basse énergie, $q = 0$ et $q = 2k_F$. Mais la densité d'états est fortement supprimée dans les deux cas au vecteur d'onde nul, et la susceptibilité reste finie pour cette valeur.

La région où la densité d'état est non nulle est définie par les inégalités (1.15). Les bornes de la région doivent être données par une des fonctions $\omega_b(q) = v_F q (\pm 1 \pm q/(2k_F))$. Une simple analyse donne la région présentée sur la figure 1.16. Les états autorisés pour les électrons libres sont bornés à hautes énergies par la courbe $\omega_{\max} = v_F q (q - 2k_F)/(2k_F)$ et à basses énergies par $\omega_{\min} = v_F q |q + 2k_F|/(2k_F)$. Comme prévu, il y a deux valeurs de q pour lesquelles il existe les excitations de basse énergie, $q = 0$ et $q = 2k_F$. Mais la région où la densité d'état est non nulle est fortement supprimée à la fréquence zéro et la susceptibilité reste finie pour cette valeur $\chi|_{q=0} = \nu_0$. On peut ainsi conclure que la possibilité d'avoir des excitations de basse énergie ne suffit pas en soi. La condition nécessaire pour avoir la divergence de susceptibilité à $2k_F$ est que le spectre doit être (quasi) continu pour avoir un nombre non négligeable d'états excités

de basse énergie. Pour le spectre quasi discret, par exemple, un fil très long mais de taille finie, on vérifie aisément que la valeur de la susceptibilité à $2k_F$ est finie, elle augmente avec la longueur du fil, $\chi_{\text{dis}}(2k_F) < \infty$ et $\chi_{\text{dis}}(2k_F) \rightarrow \infty$ quand $L \rightarrow \infty$.

Une question intéressante est ce qui se passe si l'on place plusieurs impuretés dans le gaz d'électrons. Évidemment si ces impuretés sont regroupées, en les regardant de loin nous verrons aucune différence, il y aura toujours les oscillations de Friedel qui décroîtront algébriquement avec la distance. Cette image ne sera plus valable dans le cas où les impuretés sont placées d'une façon périodique. Cette question est abordée en détail dans la section suivante.

1.3.3 Commensurabilité sur réseau : calcul exact

Dans cette section je regarderai quelles subtilités apporte la présence d'un ensemble périodique d'impuretés dans un fil quantique. D'abord j'expliquerai les raisons principales de la différence profonde entre le cas d'une seule impureté et les impuretés périodiques, et ensuite je traiterai un exemple qui souligne les effets de commensurabilité en faisant le calcul exact de la densité électronique.

Supposons qu'on ait un potentiel de perturbation périodique dans le gaz d'électrons libres, quelle est la différence principale avec le cas précédent d'une seule impureté? Naïvement, on pourrait penser qu'il y a une structure de bande, les électrons la remplissent jusqu'à l'énergie de Fermi et comme avant (Fig. 1.15), il y a des excitations de basse énergie $2k_F$ et en plus la région, où la densité d'état est non nulle, n'est pas supprimée (Fig. 1.16). Donc à nouveau la susceptibilité diverge à $2k_F$ et les oscillations de Friedel apparaissent. Curieusement, tous les arguments sont bons sauf le dernier : dans le cas générique l'amplitude des oscillations de Friedel est très sensible au facteur de remplissage! Pour comprendre cette subtilité, revenons à la définition de la susceptibilité de charge dans le cas général (1.9), page 27. Comme la fonction de perturbation est maintenant périodique, elle ne tend pas vers zéro à l'infini et nous ne pouvons plus faire une transformation de Fourier pour arriver à l'équation (1.10). Par contre, à la place de la transformation de Fourier continue il est toujours possible de faire le développement en série de Fourier :

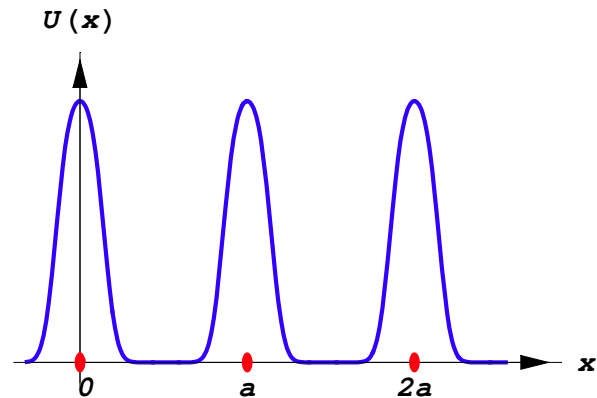


FIGURE 1.17:

Le potentiel de perturbation périodique. Les impuretés sont locales et espacées de la distance a l'une de l'autre.

$$\delta\rho(q_n) \equiv \int_{-a/2}^{a/2} e^{iq_n x} \rho(x) dx = \chi(q_n) \delta V(q_n) \quad (1.16)$$

où q_n est un vecteur du réseau réciproque ; $q_n = 2\pi n/a$, n est un nombre entier.

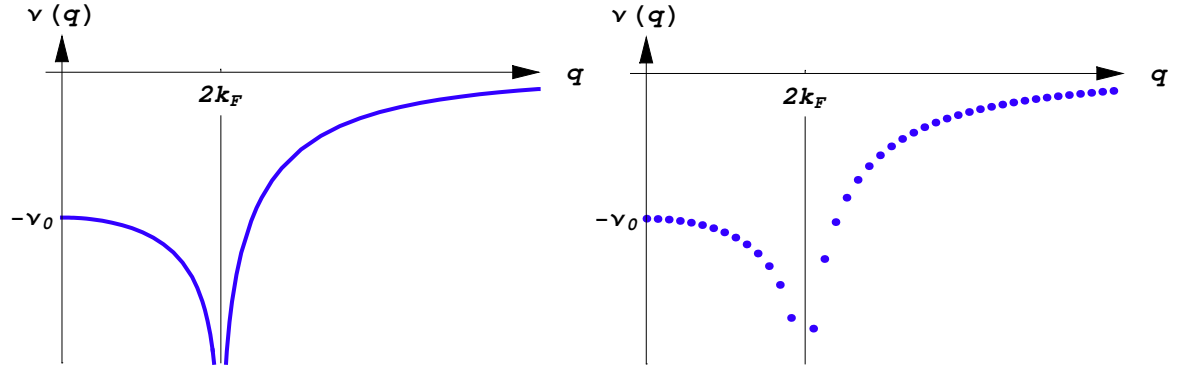


FIGURE 1.18: La susceptibilité de charge pour un fil infini (gauche) et pour le réseau de fils (droite). Dans le cas périodique la susceptibilité diverge seulement si la condition de commensurabilité est satisfaite $k_F a = \pi n$

Il est évident que les oscillations de Friedel seront d'autant plus importantes qu'on approchera du vecteur d'onde réciproque $2k_F = q_n = 2\pi n/a$. La condition d'amplification de l'oscillation de Friedel (commensurabilité sur réseau) est $k_F a = \pi n$. La dernière condition correspond à l'image physique simple. Soit deux impuretés espacées de la distance a l'une de l'autre. Comme les oscillations de Friedel ont une fréquence spatiale $2k_F$, elles seront en accord l'une avec l'autre à condition de l'égalité de leurs phases ; $2k_F a = 2\pi n$.

Pour confirmer ces résultats, obtenus à l'aide d'arguments avec les mains, je ferai un calcul exact de la densité de charge. Supposons qu'on ait un potentiel local périodique (Fig.1.17), créé par N impuretés.²³ En négligeant l'interaction électronique nous allons retrouver d'abord la structure de bande dans l'approche d'électrons libres pour ce problème et, ensuite, calculer la densité électronique comme une fonction de la position x ; $\rho(x) \sim \int_0^{k_F} |\psi_k(x)|^2 dk$. L'Hamiltonien de ce problème périodique s'écrit sous la forme suivante :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{n=0}^{N-1} U(x - na) \quad (1.17)$$

L'équation qui définit les valeurs propres de cet Hamiltonien est donnée par :

$$\hat{H}|\psi_k\rangle = E|\psi_k\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\psi_k\rangle \quad (1.18)$$

²³Le calcul analogue à celui qui suivra est fait en détail dans l'article [KD05]. Je reproduit ici juste les points nécessaires pour trouver la densité locale de particules. En cas de difficulté je renvoie le lecteur à la section 1.6 page 62.

Nous décrivons le potentiel d'impureté à l'aide de la matrice \hat{S} :

$$\begin{pmatrix} A' \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B' \\ A \end{pmatrix} \equiv \hat{S} \begin{pmatrix} B' \\ A \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

Dans le cas du potentiel symétrique il est possible de paramétriser la matrice \hat{S} par deux phases indépendantes :

$$\hat{S} = e^{i\psi} \begin{pmatrix} i \sin \phi & \cos \phi \\ \cos \phi & i \sin \phi \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

On vérifie sans difficulté que la matrice est aussi unitaire et invariante par inversion du temps, $\hat{S}^\dagger \hat{S} = 1$ et $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^*$. Dans le cas général les deux phases sont des fonctions de l'énergie : $\phi = \phi(k)$ et $\psi = \psi(k)$. Les propriétés de transport électronique dépendent seulement de la phase ϕ , car la phase ψ représente une rotation globale de la matrice de diffusion et ne change pas les propriétés physiques du système.

Le problème étant invariant par translation spatiale, l'Hamiltonien peut être diagonalisé simultanément avec l'opérateur de translation \mathbb{T} . Par suite la fonction d'onde propre s'écrit comme une fonction de Bloch :²⁴

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} && \text{pour } -a < x < 0 \\ \psi_k(x+a) &= e^{ik'a} \psi_k(x) && k' \in [-\pi/a, \pi/a] \end{aligned}$$

Les vecteurs k et k' ont une signification très différente ; le vecteur k est directement lié à l'énergie du système, $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, et k' est un vecteur du réseau réciproque, il définit la valeur propre de l'opérateur de translation, $\mathbb{T}|\psi\rangle = \exp(ik'a)|\psi\rangle$. La relation entre ces deux variables fournit la structure de bande du problème : $E(k')$.

La structure de bande est obtenue à partir de l'équation séculaire. Pour y parvenir nous utilisons la définition de la matrice de diffusion (1.19) et la propriété de la fonction de Bloch, qui nous donne la solution sur un intervalle $0 < x < a$:

$$A_1 = e^{i(k'-k)a} A_0 \quad B_1 = e^{i(k'+k)a} B_0$$

Finalement l'équation séculaire prend la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} te^{i(k-k')a} - 1 & re^{2ika} \\ r & te^{i(k+k')a} - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = 0$$

Elle nous permet d'obtenir la structure de bande du problème,

$$\cos(ka + \psi) = \cos \phi \cos k'a \quad (1.21)$$

ainsi que la dépendance des paramètres A_0 et B_0 en fonction de l'énergie :

$$(te^{i(k-k')a} - 1)A_0 - re^{2ika}B_0 = 0$$

²⁴il faut distinguer deux variables différentes, pour lesquelles on utilise la même notation ψ , la fonction d'onde et le paramètre de phase globale dans la matrice \hat{S} .

$$B_0 = A_0 e^{-ika} \frac{\sin k'a \cos \phi - \sin(ka + \psi)}{\sin \phi}$$

Je souligne ici que la *condition de commensurabilité* $k_F a = \pi n$ correspond au remplissage entier des bandes. Cette propriété est une conséquence directe de la structure de bande (1.21). A partir de l'équation séculaire, B_0 peut être exprimé en fonction de A_0 , la probabilité de trouver un électron dans le point x s'écrit comme :

$$\begin{aligned} |\psi_k(x)|^2 &= |A_0|^2 + |B_0|^2 + 2\text{Re}(A_0 B_0^* e^{2ikx}) = \\ &= |A_0|^2 \left\{ 1 + \left[\frac{\sin k'a \cos \phi - \sin(ka + \psi)}{\sin \phi} \right]^2 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{\sin k'a \cos \phi - \sin(ka + \psi)}{\sin \phi} \cos 2k(x - a/2) \right\} \end{aligned}$$

En factorisant cette expression une forme plus simple est obtenue :

$$\begin{aligned} |\psi_k(x)|^2 &= 2|A_0|^2 \frac{\sin(ka + \psi) - \sin k'a \cos \phi}{\sin^2 \phi} \times \\ &\quad \times (\sin(ka + \psi) + \sin \phi \cos 2k(x - a/2)) \end{aligned}$$

La constante A_0 est définie à l'aide de la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$N \int_{-a}^0 |\psi_k(x)|^2 dx = 1$$

où N est le nombre de liens dans notre réseau, ainsi Na est la longueur du fil considéré. L'expression finale pour le module au carré de la fonction d'onde normalisée est :

$$|\psi_k(x)|^2 = \frac{1}{Na} \frac{\sin(ka + \psi) + \sin \phi \cos 2k(x - a/2)}{\sin(ka + \psi) + \sin \phi \sin(ka)/(ka)} \quad (1.22)$$

Pour trouver la densité d'électronique à basse température nous devons sommer $|\psi_k(x)|^2$ sur tous les états propres jusqu'à l'énergie de Fermi. Si nous considérons un fil de taille finie, mais très long, $N \gg 1$, le spectre du problème sera quasi continu avec les valeurs de k' qui définissent la discrétisation : $k' = \frac{2\pi}{aN} \times \text{entier}$. En conséquence la somme sur les états propres peut être remplacée par l'intégrale sur l'énergie :

$$\sum_{k'} \cdot = \frac{aN}{2\pi} \int dk' \cdot = \frac{aN}{2\pi} \int dk \left| \frac{dk'}{dk} \right| \cdot$$

Ayant négligé la dépendance en énergie de la matrice de transfert,²⁵ la densité électronique est donnée par :

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \sum_{k'} |\psi_{k(k')}(x)|^2 = \quad \text{pour } 0 < x < a \quad (1.23) \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} \frac{|\sin(ka + \psi)| [\sin(ka + \psi) + \sin \phi \cos 2k(x - a/2)]}{\sqrt{\cos^2 \phi - \cos^2(ka + \psi)} [\sin(ka + \psi) + \sin \phi \sin(ka)/(ka)]} \end{aligned}$$

²⁵c'est par exemple le cas où l'énergie de Fermi est très élevée, $k_F a \gg 1$, et on développe ces fonctions en série de Taylor, $\phi \approx \phi(k_F)$ et $\psi \approx \psi(k_F)$

Cette expression finale est relativement complexe, mais elle permet de faire un calcul numérique direct. Le spectre en soi possède les gaps énergétiques définis par l'expression $\cos^2 \phi > \cos^2(ka + \psi)$, en conséquence l'intégrale (1.23) n'est calculée que sur toutes les valeurs autorisées de k .

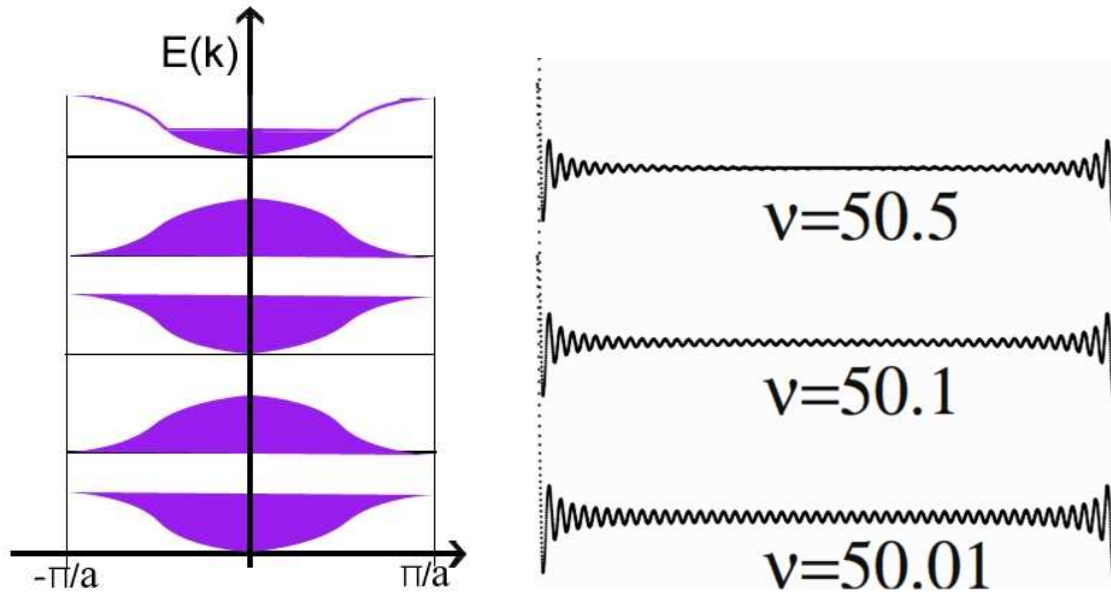


FIGURE 1.19: Calcul numérique via la réponse linéaire (1.18) des oscillations de Friedel pour différents facteurs de remplissage de bandes ν , voir annexe B. Plus on remplit la dernière bande ($k_F a \approx \pi \nu$) plus les oscillations sont importantes. La condition de commensurabilité $k_F a = \pi \nu$ correspond au remplissage entier des bandes.

Comme la densité électronique est une fonction périodique $\rho(x + a) = \rho(x)$, une des possibilités pour l'évaluer consiste en la développer en série de Fourier et ensuite en analyser l'une après l'autre chaque composante pour déterminer la présence d'oscillation. Sans développer cette analyse assez lourde, j'attire l'attention sur le fait que toutes les conditions données dans la section 1.3.1 page 25 sont satisfaites : le spectre est quasi continu près de l'énergie de Fermi et la fonction d'onde d'une énergie donnée oscille à la fréquence $2k$. Donc les oscillations à la fréquence $2k_F$ de la densité électronique doivent se manifester. L'Équation (1.23) intégrée par partie donne en effet le comportement de Friedel à grande distance :

$$\int_{k_F}^{k_F} f(k) \cos(2ky) dk = f(k_F) \frac{\sin(2k_F y)}{2y} - \frac{1}{2y} \int_{k_F}^{k_F} f'(k) \sin(2ky) dk, \text{ pour } y \gg k_F^{-1}$$

$$\int_{k_F}^{k_F} f(k) \cos(2ky) dk = F(k_F) \cos(2k_F y) + 2y \int_{k_F}^{k_F} F(k) \sin(2ky) dk, \text{ pour } y \ll k_F^{-1}$$

où $y \equiv x - a/2$, $y = 0$ indique la position au milieu des impuretés; $f(k)$ est le facteur multiplicatif dans (1.23), qu'on peut approcher par $f(k) \approx$

$\sin \phi (\cos^2 \phi - \cos^2(ka + \psi))^{-1/2}$, si $k_F a \gg 1$; $F(k)$ est la primitive de la fonction $f(k)$. La valeur $f(k)$ diverge comme la racine carrée dès qu'on se rapproche du remplissage entier, $f(k) \sim |k - k_F|^{-1/2}$. Finalement on conclut par une analyse superficielle que :

$$\rho(x) \sim \frac{\sin 2k_F x}{x} \quad \text{pour le remplissage partiel}$$

$$\rho(x) \sim \frac{\sin 2k_F x}{\sqrt{x}} \quad \text{pour le remplissage entier } k_F a = n\pi$$

Les oscillations de Friedel jouent un rôle plus important pour le remplissage entier.

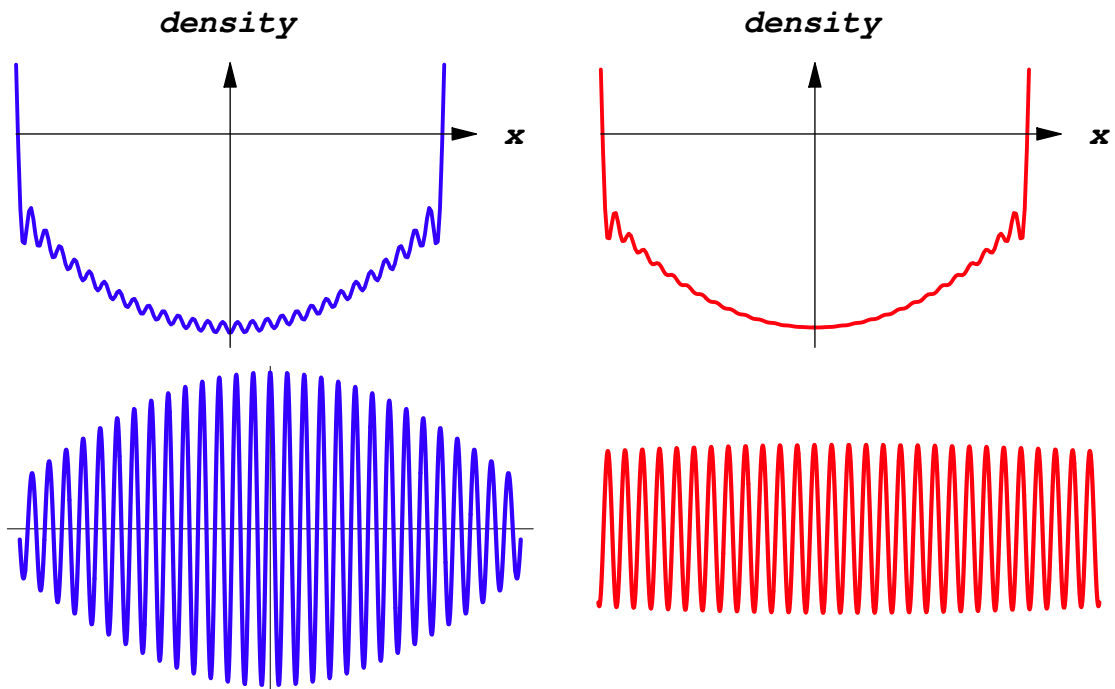


FIGURE 1.20: Calcul numérique direct (1.24) des oscillations de Friedel pour le potentiel périodique de type δ . Comme pour le résultat de l'approximation de la réponse linéaire Fig.1.19, les oscillations disparaissent à demi-remplissage, par contre, la hauteur du pic de la densité ne change pas brutalement au passage du remplissage entier (gauche) vers le remplissage partiel (droite). En regardant juste la contribution de la dernière bande (en bas), on voit clairement la domination de la partie proche du gap énergétique $k_F a \approx n\pi$ (en bas à gauche). Dans cet exemple $L = 2a/5$ et $n=30$, de sorte que le potentiel d'impureté joue un rôle important : $L/\lambda_F = 6$.

Pour confirmer nos conclusions je donne quelques résultats numériques. Nous commençons par l'analyse du calcul numérique (Fig.1.20) de la densité électronique pour le potentiel de type δ , $V(x) = \hbar^2 \delta(x)/(2mL)$. Dans ce cas la dépendance des paramètres de la matrice \hat{S} en énergie est simple : $\cot \phi(k) = -2kL$ et $\psi \equiv \phi$, voir

équation A.19 page 142, qui nous donne la structure de bande suivante :

$$\cos(k'a) - \cos(ka) = \frac{\sin(ka)}{2kL} \quad \text{avec } \hbar k = \sqrt{2mE}$$

où k' est le vecteur du réseau réciproque qui prend l'ensemble des valeurs discrètes $k'_n = 2\pi \frac{n}{Na}$, Na étant la longueur totale du fil. La densité est définie par l'équation :

$$\rho_\delta(y) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{|\cos k - (2kL + k^{-1}) \sin k| \cos(2ky)}{\sqrt{(2kL)^2 - (2kL \cos k + \sin k)^2} (\cos k + (k^{-1} - 2kL) \sin k)} \quad (1.24)$$

Pour simplifier j'ai supposé $a = 1$; par l'analyse dimensionnelle on retrouve facilement la dépendance en a . Comme pour le résultat de l'approximation de la réponse linéaire Fig.1.19, les oscillations disparaissent à demi-remplissage, par contre, la hauteur du pic de la densité ne change pas brutalement au passage du remplissage entier vers le remplissage partiel. En regardant juste la contribution de la dernière bande, on voit clairement la domination de la partie proche du gap énergétique $k_F a \approx n\pi$. Notons que dans cette exemple le rapport entre l'énergie caractéristique du potentiel de perturbation $k_{\text{imp}} = 2\pi/L$ et l'énergie de Fermi k_F n'est pas négligeable ($k_{\text{imp}}/k_F = 1/6$). En conséquence la contribution des états de très basse énergie $k \approx 0$, qui sont fortement modifiés par la présence du potentiel périodique, rajoute une modulation à la densité moyenne.

Considérons encore un autre exemple de matrice de diffusion constante, $\hat{S}(k) = \text{const}$. Physiquement ceci correspond au cas de très grande densité électronique $k_F a \gg 1$, on peut alors développer la matrice de diffusion en série de Taylor et supposer qu'elle soit constante près de la surface de Fermi. $\hat{S}(k) = \hat{S}(k_F) + (k - k_F)\hat{S}' \approx \text{const}$. Sur la Fig. 1.21 il n'est pas simple de distinguer les oscillations de densité dans la bande entière ou dans la moitié de bande, mais la transformation de Fourier met tout à sa place : le pic de la contribution de la bande entière est environ deux fois plus haut que pour le demi remplissage.

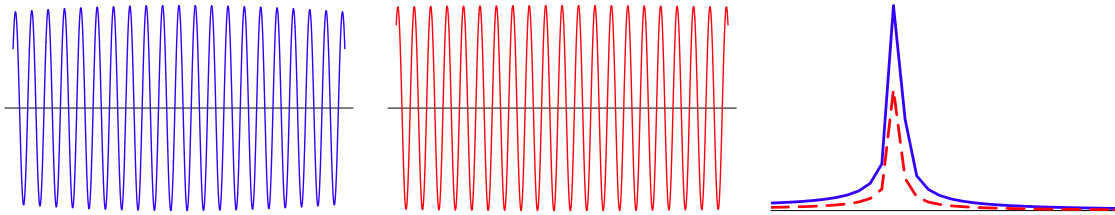


FIGURE 1.21: Contribution de la dernière bande aux oscillations de Friedel pour une matrice de diffusion constante. $\hat{S} = \text{const}$, $\psi = \pi/5$ et $\phi = \pi/3$. Remplissage entier est à gauche, sa TF est à droite (la ligne continue). Remplissage demi-entier est au milieu, sa TF est donnée par la courbe en pointillé. Même si les amplitudes dans les deux cas sont les mêmes, dans le cas commensurable (remplissage entier) les oscillations de Friedel ont un pic plus marqué au vecteur d'onde $2k_F$.

Récapitulatif de la section :

A quelle conclusion arrive-t-on pour la question de l'influence du facteur de remplissage

$\nu = k_F a / \pi$ sur la forme des oscillations de Friedel ? Dans les trois exemples de calcul numérique le passage du remplissage commensurable vers le remplissage incommensurable se manifeste de différentes manières : notamment la forme des oscillations varie plus en fonction du potentiel d'impureté ou de la méthode de calcul que du facteur de remplissage : (*cas A* Fig. 1.19) pour le calcul des oscillations à partir de la susceptibilité de charge on obtient la frustration des oscillations de Friedel, la densité moyenne étant constante ; (*cas B* Fig. 1.20) le calcul exact des oscillations de Friedel pour le même potentiel δ , fait apparaître en plus une modulation de la densité moyenne et enfin (*cas C* Fig. 1.21) pour la matrice de diffusion constante c'est le spectre des oscillations qui est différent. Cependant pour le transport électronique toutes ces propriétés ont une signification unique : *le remplissage commensurable favorise la localisation électronique*, car pour tous ces exemples les oscillations de Friedel sont plus intenses à remplissage entier.

Dans la section suivante, j'expliquerai la construction algébrique pour pouvoir obtenir la structure de bande de n'importe quel réseau de longueur unique.

1.4 Solution de l'équation de Schrödinger définie sur un graphe

Dans cette section, j'introduirai un formalisme algébrique, qui nous permettra de généraliser la notion de théorie de bandes pour les réseaux équidistants,²⁶ qui ne sont pas forcément périodiques, Fig. 1.2 page 13. Nous adapterons à notre situation les idées originales de Kottos et Smilansky [KS97].

Supposons qu'on ait un réseau quelconque formé de fils quantiques. Dans le cas de forte densité électronique dans les brins, on peut négliger les effets d'interaction entre les électrons (voir note ¹³ en bas de la page 19). Un modèle théorique qui décrira ce réseau consiste à supposer que les électrons se propagent sans interaction dans les brins unidimensionnels et qu'ils soient diffusés par un potentiel local situé aux points de croisement des brins. Ce potentiel, qui n'a aucune raison d'être le même pour les jonctions différentes,²⁷ peut être décrit par la matrice de diffusion introduite dans la section 1.2 page 20. Traduit dans le langage des mathématiciens, on doit résoudre une équation différentielle, $\psi'' + k^2\psi = 0$,²⁸ définie sur le graphe avec les conditions aux limites données par la matrice de diffusion. La solution dans chaque brin s'écrit sous la forme :

$$\psi(x) = A_{ij}e^{-ikx} + A_{ji}e^{ikx} \quad (1.25)$$

où A_{ij} est l'amplitude de l'onde propageant de site j vers site i . L'origine de coordonnée $x = 0$ est choisie au milieu du brin. La solution de l'équation de Schrödinger sur le

²⁶réseau de fils de longueur unique

²⁷On voit que même les nombres de coordination de chaque jonction ne sont pas égaux.

²⁸C'est l'équation de Schrödinger à une dimension, $k \stackrel{\text{def}}{\leftarrow} \sqrt{2mE/\hbar^2}$

graphe doit obéir aux conditions limites dans les jonctions :

$$A_{ij} = \sum_m^{(j)} e^{ikL_{ij}/2} S_{im}^{(j)} e^{ikL_{jm}/2} A_{jm} \quad (1.26)$$

L_{ij} est la longueur du fil $\langle ij \rangle$ et la sommation est faite sur tous les premiers voisins du site j . La formule (1.26) dit simplement que l'amplitude de l'onde allant du site j vers le site i (A_{ij}) est égale à la somme des amplitudes venant de tous les sites voisins m du site j . Chacune de ces dernières est multipliée par le facteur de phase $\exp(ikL_{jm}/2)$, dû à la propagation du centre du lien $\langle jm \rangle$ vers le nœud j , ensuite est diffusée par le site j avec l'amplitude de probabilité $S_{im}^{(j)}$ et enfin atteint le centre du lien $\langle ij \rangle$ en accumulant le facteur de phase $\exp(ikL_{ij}/2)$. On voit clairement que (1.26) n'est rien d'autre que l'équation aux valeurs propres écrite dans une certaine base. Cette équation est plus transparente une fois écrite dans sa forme vectorielle. On va définir alors l'espace de Hilbert auxiliaire attaché aux liens du réseau. En effet si l'on fixe l'énergie k , la fonction d'onde est déterminée complètement par $2N_L$ amplitudes, N_L étant le nombre de fils dans le graphe. Donc l'ensemble des amplitudes $\{A_{ij}\}$ peut être représenté comme un vecteur $|A\rangle$ dans l'espace de Hilbert de dimension $2N_L$. Chaque lien est décrit par deux vecteurs de base, $|ij\rangle$ et $|ji\rangle$, comme les ondes ont toujours deux directions possibles de propagation. Comme cette espace de Hilbert est de dimension finie, la base orthonormée peut être choisie, $\langle mn|ij\rangle = \delta_{mi}\delta_{nj}$. On définit le vecteur $|A\rangle = \sum_{\langle ij\rangle} A_{ij}|ij\rangle$ et l'opérateur de longueur $\hat{L} = \sum_{\langle ij\rangle} L_{ij}|ij\rangle\langle ij|$. La forme vectorielle de l'équation (1.26) s'écrit comme :

$$|A(k)\rangle = e^{ik\hat{L}/2} \hat{T} e^{ik\hat{L}/2} |A(k)\rangle \quad (1.27)$$

où on a introduit l'opérateur de diffusion \hat{T} , qui contient toutes les informations sur l'amplitude de transfert de chaque site :

$$\hat{T} = \sum_j \sum_{i,m}^{(j)} |ij\rangle S_{im}^{(j)} \langle jm| \iff S_{im}^{(j)} = \langle ij|\hat{T}|jm\rangle \quad (1.28)$$

$S_{im}^{(j)}$ est l'élément de la matrice de diffusion, qui correspond à l'amplitude de probabilité de transmission du site m vers le site i à travers le nœud j . Les valeurs propres de l'équation de Schrödinger sont données par l'équation séculaire :

$$\det(e^{ik\hat{L}} - \hat{T}) = 0 \quad (1.29)$$

Ici il faut remarquer que l'opérateur de diffusion \hat{T} dépend lui de l'énergie k , et malgré sa forme simple l'équation n'est pas facile à résoudre. Calculons le commutateur $[\hat{L}, \hat{T}]$ pour voir à quelle condition on peut diagonaliser ces deux opérateurs simultanément :

$$[\hat{L}, \hat{T}] = \sum_j \sum_{i,m}^{(j)} |ij\rangle S_{im}^{(j)} (L_{ji} - L_{jm}) \langle jm| \quad (1.30)$$

Donc la condition $[\hat{L}, \hat{T}] = 0$ est équivalente à l'égalité de longueurs des brins dans le graphe, $a \stackrel{\text{def}}{\iff} L_{ji}$ pour tous les liens. Comme l'opérateur de diffusion est unitaire

$TT^\dagger = I$, ses valeurs propres se trouvent sur le cercle de rayon un : $\hat{T}|\alpha\rangle = e^{-i\theta_\alpha}|\alpha\rangle$, où α parcourt $2N_L$ valeurs possibles. Les valeurs propres de k sont données par $2N_L$ équations implicites :

$$ak_{\alpha,n} = \theta_\alpha(k_{\alpha,n}) + 2\pi n \geq 0 \quad (1.31)$$

A hautes énergies $ka \gg 1$, les fonctions $\theta(k)$ varient lentement sur l'intervalle $2\pi n < ka < 2\pi(n+1)$, alors, pour chaque valeur de n , nous avons $2N_L$ solutions des équations (1.31), Fig. 1.22. Si le nombre de liens est grand, on obtiendra la structure de bande généralisée $k_{\alpha,n}$: chaque bande est numérotée par un nombre entier n et les états propres à l'intérieur d'une bande sont indexés par $2N_L$ valeurs de α . Il est important de noter ici que cette structure de bande généralisée ne repose pas sur l'invariance par translation du réseau, elle est complètement indépendante du théorème de Bloch. Même en cas de réseau invariant par translation, les deux notions ne coïncident pas. Le formalisme général exposé ici donne $2N_L = ZN_s$ états par bande, pour un réseau de Bravais de coordination Z , comportant N_s sites. Pour ce même réseau, une bande de Bloch contient N_s états. Donc une bande au sens généralisé est la réunion de Z bandes de Bloch.

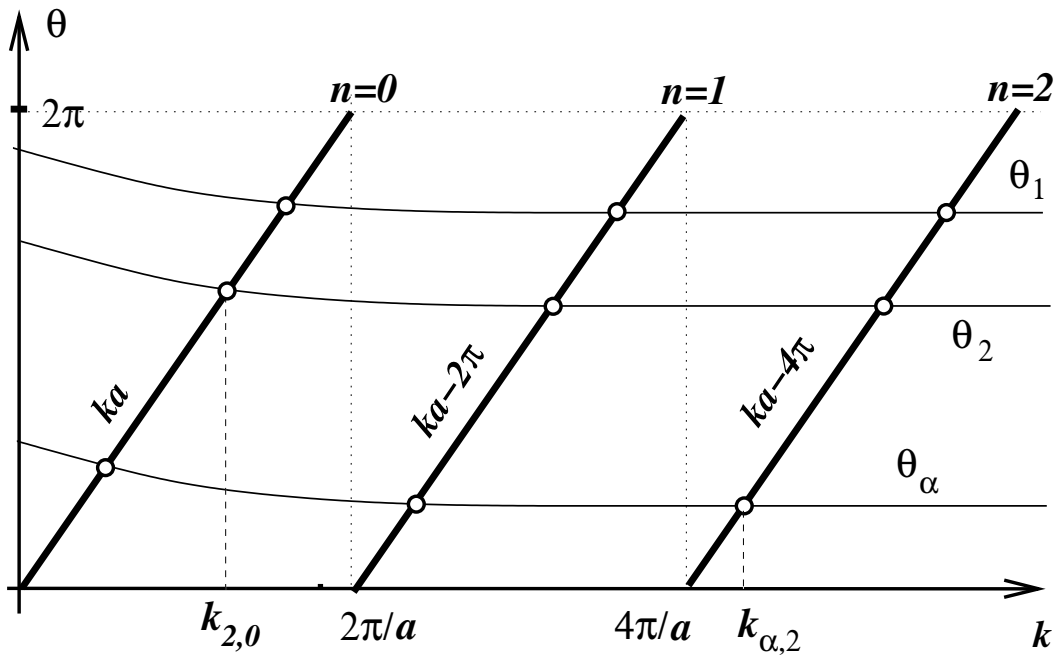


FIGURE 1.22: Les solutions de (1.31). Pour chaque intervalle de longueur 2π il y a $2N_L$ valeurs propres énergétiques. Si le nombre de liens est très grand, on obtiendra la structure de bande généralisée.

Si la matrice de transmission était indépendante de l'énergie ($\theta_\alpha = \text{const}$), le spectre serait parfaitement périodique.²⁹ Enfin je note que la condition de l'égalité des longueurs de brins peut être assouplie, il suffit qu'il existe une Δk telle que

²⁹Pour la plupart des calculs en physique on s'intéresse aux énergies proches de l'énergie de Fermi et cette supposition est donc tout à fait logique

$\exp(i\Delta k\hat{L}) = 1$. Cette condition signifie que les longueurs des fils du réseau doivent être commensurables i.e. égales à zéro modulo une longueur, $L_{ij} = an_{ij}$ où n_{ij} sont les nombres entiers. Dans ce cas les opérateurs \hat{L} et \hat{T} commutent toujours, car pour chaque brin de longueur supérieure à celle de a on peut introduire les jonctions fictives caractérisées par les matrices de transmission parfaite. Donc on obtiendra à nouveau le réseau équidistant.

Pour finir je donne quelques exemples de la mécanique quantique qui confirme nos conclusions sur la théorie de bandes généralisée.

1. Considérons un seul fil quantique de longueur a avec les conditions aux bords périodiques. Les solutions sont données par les ondes planes $\psi(x) \sim \exp(\pm ikx)$. La quantification de l'énergie apparaît due à la taille finie du système : $k_n a = 2\pi n$. On voit que pour chaque intervalle $2\pi m < ka \leq 2\pi(m+1)$, il y a toujours deux valeurs propres de la base des solutions de l'équation de Schrödinger, comme le prédit le formalisme algébrique (un seul lien, $2N_L = 2$).
2. Prenons un exemple de deux brins de longueur a liés par la matrice de transmission parfaite. Ce problème est bien connu en mécanique quantique sous le nom du puits potentiel infini : $V(x) = 0$ pour $|x| < a$ et $V(\pm a) = \infty$. On trouve facilement qu'il y a, comme on prétend, $2N_L = 4$ solutions dans chaque intervalle énergétique de longueur 2π : deux paires $k_n^{(+)} a = \pi(1/2 + n)$ et deux impaires $k_n^{(-)} a = \pi n$.
3. Dans le troisième exemple on rajoute à l'origine des coordonnées un δ -potentiel : $V(x) = \alpha\delta(x)$ pour $|x| < a$ et $V(\pm a) = \infty$. C'est un réseau comportant deux fils liés par la matrice de diffusion \hat{S}_δ , voir A.19 page 142. Les états propres ne sont pas triviaux, comme dans les deux exemples précédents, mais on conserve toujours cette propriété d'avoir les quatre états par intervalle de 2π : deux impaires $k_n^{(-)} a = \pi n$ et deux paires, donnés par les solutions de l'équation, $\tan(ka) = -\hbar^2 k / (m\alpha)$, sur l'intervalle en question.

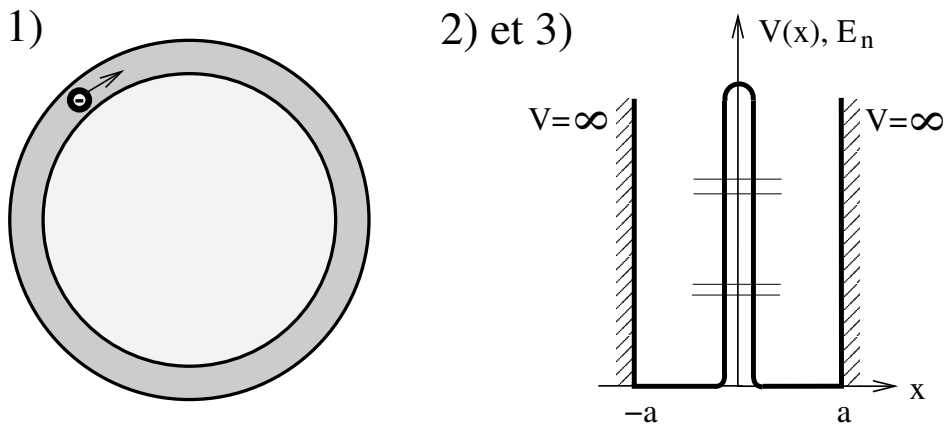


FIGURE 1.23: Trois exemples où on voit la structure de bande généralisée : un anneau et deux fils joints dans un point.

Récapitulatif de la section :

Dans cette section nous avons généralisé la notion de la structure de bande pour une

grande variété de réseaux, dits équidistants, Fig. 1.2 page 13. La puissance du formalisme algébrique introduit ici est indispensable pour établir l'équation du groupe de renormalisation, que nous obtenons dans le chapitre 1.6 page 62.

1.5 Bosonisation

Pour les problèmes traitant le transport électronique dans les réseaux de filaments quantiques il y a une question naturelle qui se pose : quel paramètre faut-il traiter en perturbation ? Du point de vue expérimental, la résistance d'un échantillon doit dépendre de la qualité du gaz bidimensionnel et de la perfection de la gravure des fils dans ce gaz. Pour un théoricien, ceci indique l'existence d'au moins deux paramètres d'origine physique différente. Schématiquement, on pourra dire qu'il y a le paramètre de la force de potentiel dans les jonctions U et le paramètre d'interaction électronique, qu'on notera K .³⁰ L'Hamiltonien du problème général s'écrira comme une somme de trois termes :

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_{\text{cin}} + \hat{U}_{\text{jonc}}^{(U)} + \hat{H}_{\text{int}}^{(K)} \quad (1.32)$$

où \hat{H}_{cin} est l'Hamiltonien d'électrons libres, \hat{U}_{jonc} décrit le potentiel dans les jonctions et \hat{H}_{int} est le terme d'interaction électronique dans les fils. N'ayant pas les moyens de résoudre le problème initial, on est obligé de faire appel à la théorie de perturbation. Plusieurs voies sont possibles : soit on trouve la description d'électrons en interaction dans un fil quantique et on introduit le potentiel de diffusion dans les croisements, soit on trouve d'abord la solution de l'équation de Schrödinger dans une géométrie du réseau et ensuite on étudie les effets d'interaction.

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \begin{cases} (\hat{H}_{\text{cin}} + \hat{H}_{\text{int}}) + \hat{U}_{\text{jonc}} & \text{bosonisation} \\ (\hat{H}_{\text{cin}} + \hat{U}_{\text{jonc}}) + \hat{H}_{\text{int}} & \text{physique du solide} \end{cases} \quad (1.33)$$

La première approche nécessite l'utilisation de la méthode de la *bosonisation*, qui permet justement de réécrire l'Hamiltonien d'électrons en interaction en fonction d'opérateurs bosoniques libres. Cette approche permettant d'exprimer le coefficient de transmission de fils, est utilisé dans les nombreuses problèmes physiques [SS95, SS04, FHK98]. Dans la deuxième approche on résout d'abord le problème de physique des solides et ensuite on branche l'interaction électronique. Chacune de ces deux approches n'est valide que dans une certaine région de l'espace des paramètres Fig.1.24.

Dans ce qui suit, je décrirai ces deux approches théoriques, en commençant par les éléments essentiels de la technique de bosonisation. Ensuite, dans un exemple d'un seul fil avec des impuretés périodiquement placées,³¹ je donnerai les différents cas de figure possibles obtenus par une analyse superficielle. Le cas d'un réseau de fils à faible interaction électronique est traité en détail dans la section 1.6.

³⁰On choisit la notation courante pour le Liquide de Luttinger. La seule chose qu'il faut connaître pour l'instant est que $K = 1$ décrit les électrons sans interaction et $K > 1$ ($K < 1$) correspond respectivement au cas attractif (répulsif).

³¹A deux dimensions nous pouvons modéliser chaque jonction de fils par un potentiel local d'impureté. Le problème $1D$ avec les impuretés périodiquement placées est donc préliminaire.

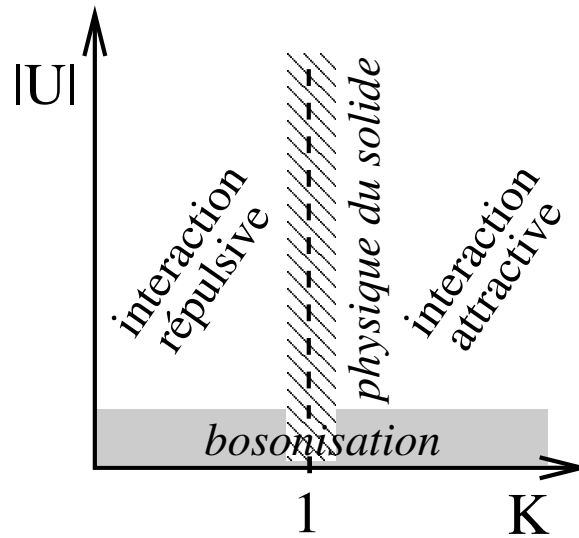


FIGURE 1.24: Schéma des domaines de validité pour l'approche de bosonisation et l'approche de physique du solide. U caractérise le potentiel dû aux nœuds et K est la force d'interaction électronique. $K = 1$ correspond au cas d'électrons sans interaction.

1.5.1 Des fermions vers les bosons

La physique du gaz électronique unidimensionnel diffère nettement de celle de gaz bi- ou tri-dimensionnel. Nombreux facteurs contribuent à cette spécificité; comme la topologie de la surface de Fermi, constituée seulement de deux points, ou le fait qu'une impureté ne peut être contournée par les électrons, ce qui rend plus difficile l'écrantage du potentiel de Coulomb et en conséquence la formation de quasi-particules. Dans cette section, j'introduirai d'abord la notion du *Liquide de Luttinger* (LL), qui décrit le gaz électronique unidimensionnel, puis je donnerai les éléments de la technique de bosonisation,³² qui permettront de traiter les interactions électroniques d'une façon non-perturbative.

Nous allons maintenant traiter une théorie simple d'électrons sans spins. Considérons d'abord un Hamiltonien d'électrons sans interaction, qu'on a réussi à diagonaliser par une méthode quelconque,

$$\hat{H}_0 = \sum_k \varepsilon_0(k) a_k^\dagger a_k \quad (1.34)$$

où a_k^\dagger est l'opérateur de création d'un électron ayant une énergie $\varepsilon_0(k)$, les règles d'anti-commutation sont habituelles : $\{a_{k'}, a_k^\dagger\} = \delta_{k,k'}$. En l'absence d'interaction, les électrons remplissent les niveaux énergétiques jusqu'à l'énergie de Fermi E_F . Toutes les propriétés physiques³³ d'un tel système à basse température sont définies par la tangente à la

³²Je donne juste les éléments essentiels de la technique de bosonisation, pour plus de détail j'envoie le lecteur à [Saf97, Dou99].

³³comme la densité d'états, la vitesse électronique, la conductivité etc.

bande énergétique au niveau de Fermi. Tomonaga [Tom50] a donc proposé de linéariser le spectre autour de l'énergie de Fermi et de restreindre les excitations électroniques possibles en introduisant un paramètre de cut-off Λ . Mais dans l'approche du groupe de renormalisation, il est souvent plus commode de relâcher cette contrainte ($\Lambda \rightarrow \infty$) pour arriver au modèle de Luttinger [Lut63], Fig. 1.25.

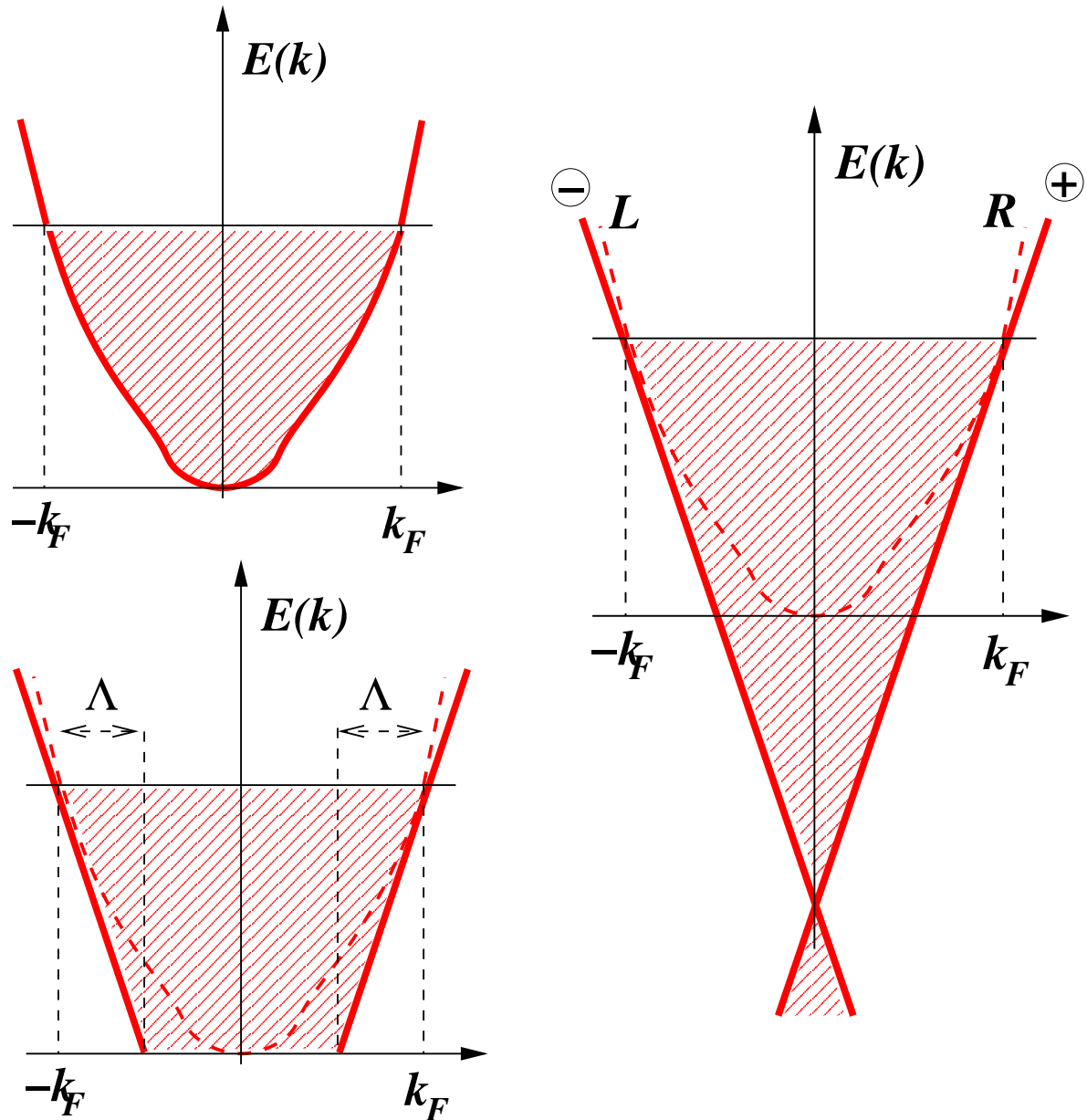


FIGURE 1.25: Linéarisation du spectre d'énergie. Le modèle de Tomonaga (en bas) introduit le cut-off Λ sur les excitations possibles. Le modèle de Luttinger (à droite) relâche cette contrainte. Les branches sont notées par des indices L, R ou $+, -$ selon des auteurs.

L'Hamiltonien d'électrons sans interaction dans le modèle de Luttinger s'écrit comme une somme infinie :

$$\hat{H}_0 = v_F \sum_k \{(k - k_F) a_{Rk}^\dagger a_{Rk} - (k + k_F) a_{Lk}^\dagger a_{Lk}\} \quad (1.35)$$

où $a_{L,R}^\dagger$ sont respectivement les opérateurs de création d'un électron sur la branche gauche et droite et où v_F caractérise la pente de la structure de bande au niveau de Fermi, soit la vitesse de Fermi. En supposant que le gaz unidimensionnel se trouve sur un anneau de longueur L , on quantifie les valeurs de k possibles, comme les entiers multiples de $\frac{2\pi}{L}$.

Le modèle de Luttinger peut être facilement diagonalisé en présence d'un potentiel extérieur quelconque, par contre le branchement d'interactions électroniques même très simple³⁴ rend cet Hamiltonien assez compliqué pour être résolu analytiquement. Pour cette raison, on essayera de réécrire cet Hamiltonien en termes d'excitations bosoniques, qui écrivent les fluctuations de densité autour de la surface de Fermi. Ceci semblera une complication au départ, mais nous verrons plus tard que l'Hamiltonien d'interaction électronique prendra exactement la même forme que celui sans interaction. Il suffira donc de résoudre le problème sans interaction pour avoir la solution même en présence d'interaction.

L'opérateur de la densité électronique nous servira dans la suite d'une excitation élémentaire :

$$\rho_r(q) = \sum_k a_{r,k+q}^\dagger a_{r,k} \quad (1.36)$$

r indique les branches, $r = 1$ correspond à la branche droite et $r = -1$ à la branche gauche. Les règles de commutation³⁵ pour ces opérateurs révèlent leur caractère bosonique. Ce sont les excitations de type particule-trou.

$$\begin{aligned} [\rho_r(q), \rho_{r'}(q')] &= \frac{rq'L}{2\pi} \delta_{rr'} \delta_{q+q'} \\ [\hat{H}_0, \rho_r(q)] &= rv_F q \rho_r(q) \end{aligned} \quad (1.37)$$

La dernière équation montre que les opérateurs $\rho_R(q)$ et $\rho_L(-q)$ peuvent être interprétés comme les opérateurs de création, pour q positive, ou d'annihilation, pour q négative, d'une excitation bosonique portant l'énergie $v_F q$. L'Hamiltonien bosonique qui satisfait ces nouvelles règles de commutation s'écrit comme :

$$\hat{H}_0 = \frac{\pi v_F}{L} \sum_q : \{ \rho_R(q) \rho_R(-q) + \rho_L(-q) \rho_L(q) \} : \quad (1.38)$$

On introduit l'ordre normal de l'opérateur \mathcal{O} par $:\mathcal{O}:$, de sorte que l'état fondamental soit d'énergie zéro. Remarquons que cette expression exprimée à l'aide d'opérateurs fermioniques est de la même forme que le terme d'interaction de type densité-densité, par

³⁴comme l'interaction ponctuelle de Hubbard

³⁵la démonstration n'est pas du tout triviale. Il faut appliquer le commutateur à un état ayant un nombre fini d'excitations particule-trou.

exemple l'interaction de Coulomb. Ce fait nous laisse croire que le terme d'interaction doit adopter une écriture similaire à celui de l'Hamiltonien libre \hat{H}_0 .

Le premier pas vers la bosonisation étant achevé,³⁶ on voudrait pouvoir écrire l'Hamiltonien d'interactions électroniques en terme d'opérateurs bosoniques. Il est nécessaire alors d'introduire l'opérateur de champ fermionique, qui détruit un électron dans le point x :³⁷

$$\psi_r(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} a_{r,k}, \quad \text{pour } x \in [0, L] \quad (1.39)$$

L'opérateur de la densité électronique dans l'espace réel s'écrira comme :

$$\rho_r(x) \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} \frac{1}{L} \sum_q e^{iqx} \rho_r(q) = \psi_r^\dagger(x) \psi_r(x) \quad (1.40)$$

Le terme d'interaction électronique à deux particules prendra la même forme que l'Hamiltonien libre (1.38).

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{r,r'} \int V(x-x') \rho_r(x) \rho_{r'}(x') \sim \sum_{q,r,r'} V(q) \rho_r(q) \rho_{r'}(-q)$$

On pourrait s'arrêter à ce stade et essayer de diagonaliser l'Hamiltonien total par une transformation unitaire, mais en fait l'introduction de nouveaux *opérateurs de phases bosoniques* permet d'éviter même cette procédure. L'Hamiltonien (1.38) a une forme simple, mais les opérateurs de densité ont des règles de commutation (1.37) qui ne sont pas tout à fait bosoniques, dues à la présence du facteur multiplicatif q . Essayons de remplacer ces opérateurs par d'autres, dont le commutateur est constant. Il est facile d'établir les règles de commutation pour les opérateurs de densité et de courant total :

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \rho_R(x) + \rho_L(x) & [\rho(x), \rho(x')] &= 0 \\ J(x) &= v_F \rho_R(x) - v_F \rho_L(x) & [J(x), J(x')] &= 0 \\ [\rho(x), J(x')] &= -\frac{iv_F}{\pi} \frac{d}{dx} \delta(x-x') \end{aligned} \quad (1.41)$$

Si l'on intègre la dernière équation par rapport à x , on obtiendra des opérateurs avec les règles de commutation standards :

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi} \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x}, \quad J(x) = v_F \Pi_\Phi(x) \Rightarrow [\Phi(x), \Pi_\Phi(x')] = i\delta(x-x') \quad (1.42)$$

Ces équations définissent d'une façon implicite l'opérateur de phase bosonique Φ et son conjugué Π_Φ . Mais on voit qu'il est possible de définir la deuxième paire d'opérateurs en faisant la même opération versus x' :

$$\rho(x) = -\Pi_\Theta(x), \quad J(x) = \frac{v_F}{\pi} \frac{\partial \Theta(x)}{\partial x} \Rightarrow [\Theta(x), \Pi_\Theta(x')] = i\delta(x-x') \quad (1.43)$$

³⁶Si l'on voulait être rigoureux on devrait vérifier que les espaces de Hilbert engendrés par ces deux types d'excitations sont équivalentes, voir [Hal81, Dou99]

³⁷je rappelle que $r = 1 \Leftrightarrow R$ et $r = -1 \Leftrightarrow L$

Les opérateurs de densité gauche et droite s'expriment d'une façon simple à l'aide de ces nouveaux opérateurs, appelés dans la littérature les opérateurs de phases bosoniques.³⁸

$$2\rho_r = r\Pi_\Phi - \frac{1}{\pi} \frac{\partial\Phi}{\partial x} = \frac{1}{\pi} \frac{\partial\Theta}{\partial x} - r\Pi_\Theta \quad (1.44)$$

On arrive enfin à l'Hamiltonien bosonisé (1.38) dans sa forme la plus utilisée :

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \pi v_F \sum_r \int_0^L dx : \rho_r^2(x) : &= \frac{v_F}{2} \int_0^L dx : \{ \pi \Pi_\Phi^2(x) + \pi^{-1} \left(\frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \} : \\ \text{ou d'une façon équivalente,} &= \frac{v_F}{2} \int_0^L dx : \{ \pi \Pi_\Theta^2(x) + \pi^{-1} \left(\frac{\partial\Theta(x)}{\partial x} \right)^2 \} : \end{aligned} \quad (1.45)$$

Cette écriture de l'Hamiltonien possède une propriété remarquable, en fait tous les termes d'interaction ponctuelle du type densité-densité ont exactement la même forme. Le seul terme pertinent à basse énergie est le processus de diffusion vers l'avant :³⁹

$$\hat{H}_{\text{int}} = g \int_0^L dx \rho_L(x) \rho_R(x) = \frac{g}{4\pi} \int_0^L dx : \{ -\pi \Pi_\Phi^2(x) + \pi^{-1} \left(\frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \} :$$

L'Hamiltonien des électrons en interaction sera :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int_0^L dx : \{ \pi (v_F - \frac{g}{2\pi}) \Pi_\Phi^2(x) + \pi^{-1} (v_F + \frac{g}{2\pi}) \left(\frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \} :$$

En introduisant la vitesse de Fermi renormalisée on obtient l'Hamiltonien d'oscillations harmoniques indépendantes :

$$\hat{H} = \frac{\tilde{v}_F}{2} \int_0^L dx : \{ \pi K \Pi_\Phi^2(x) + (\pi K)^{-1} \left(\frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \} : \quad (1.46)$$

$$\tilde{v}_F = \sqrt{(v_F - \frac{g}{2\pi})(v_F + \frac{g}{2\pi})} \quad K = \sqrt{\frac{v_F - \frac{g}{2\pi}}{v_F + \frac{g}{2\pi}}} \quad (1.47)$$

Souvent dans la littérature c'est cette forme bosonisée de l'Hamiltonien qu'on appelle modèle du Liquide de Luttinger (LL).⁴⁰ Pour être capable de décrire les impuretés ponctuelles dans le LL il faut inverser les relations (1.44 et 1.40) en exprimant les opérateurs du champ fermionique (1.39) en fonction de phases bosoniques. Je présente ici le résultat sans détail de calcul [Hal81] :

$$\psi_r^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-irk_F x} : \exp\{i(r\Phi(x) - \Theta(x))\} : \quad (1.48)$$

³⁸Je souligne que les opérateurs de phases ne commutent pas entre eux.

³⁹Dans le modèle de "g-ologie" il est souvent appelé processus g_2 . Pour simplifier les notations on notera la constante d'interaction par g . Pour plus de détails voir [Dus02, page 30-32].

⁴⁰ $K > 1$ ($K < 1$) correspond respectivement au cas attractif (répulsif).

Récapitulatif de la section :

Dans cette section on a montré comment on peut décrire les fermions en interaction à une dimension à l'aide d'opérateurs bosoniques (1.46). L'avantage principal de cette description est que les interactions entre les fermions sont traitées d'une façon non-perturbative. En plus on est désormais capable de prendre en compte toutes sortes d'impuretés présentes dans le fil, car on a su exprimer les opérateurs de champ fermionique en termes bosoniques (1.48).

1.5.2 Différents scénarios possibles pour le modèle de Frenkel-Kontorova quantique.

Le cas d'une seule jonction de fils quantiques a été étudié en détail dans la limite de faible impureté [KF92b, KF92a], ainsi que dans la limite de faible interaction électronique [YGM94]; une expression très générale de flot de renormalisation pour la matrice de transfert a été obtenue dans [LRS02], Fig. 1.26.

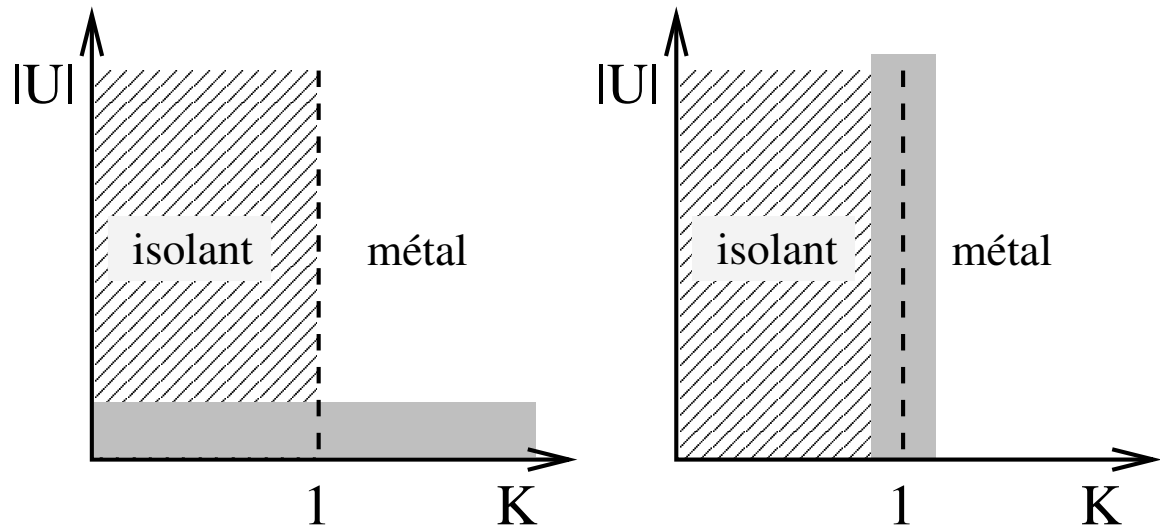


FIGURE 1.26: Une impureté placée dans le fil quantique supprime sa conductivité à température zéro, dans le cas d'interaction électronique répulsive ($K < 1$). Si les électrons étaient attractifs ils ne verraient aucune impureté à basse température. Kane et Fisher (à gauche) [KF92a] ont exploré le domaine de faible potentiel d'impureté. Puis Matveev et al. [YGM94] (à droite) ont complété ces études pour le potentiel quelconque.

Le but final étant de pouvoir considérer les réseaux de Liquides de Luttinger, on commence par l'analyse du cas simplifié d'un seul fil avec les impuretés ponctuelles placées d'une façon périodique à la distance a l'une de l'autre. Ce modèle possède la propriété principale qu'on voudrait étudier : ayant l'invariance par translation spatiale ce réseau doit être fortement sensible au facteur de remplissage électronique (commensurabilité sur réseau, section 1.3).

Tout d'abord nous allons déduire l'expression pour l'Hamiltonien du problème et ensuite nous analysons les trois cas de figures suivants :

- 1) remplissage entier $2k_F a = 2\pi n$, où $n \in \mathbb{N}$,
- 2) remplissage rationnel $2k_F a = 2\pi \frac{p}{q}$, où $p, q \in \mathbb{N}$,
- 3) cas non-commensurable $2k_F a = 2\pi\nu$, où $\nu \notin \mathbb{Q}$.

Dans l'Hamiltonien d'électrons en interaction (1.46) on rajoute un ensemble d'impuretés ponctuelles de la forme $\psi^\dagger(x = na)\psi(x = na)$. Seul le terme de rétrodiffusion ne sera pas trivial :

$$\hat{H}_{\text{imp}} = -U \sum_n \psi_n^\dagger \psi_n = -U \sum_n \cos(2k_F a + 2\Phi_n), \text{ où } \Phi_n \equiv \Phi(x=na) \text{ et } \Psi_n \equiv \Psi(x=na)$$

L'Hamiltonien total du modèle, qui porte le nom le modèle de Frenkel-Kontorova quantique (FKQ),⁴¹ prend la forme suivante :

$$\hat{H}_{FK} = \frac{v_F}{2} \int_0^L dx \left\{ \pi K \Pi_\Phi^2(x) + (\pi K)^{-1} \left(\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \right\} - U \sum_n \cos(2k_F a n + 2\Phi_n) \quad (1.49)$$

Nous allons dans la suite classifier les différents régimes de ce modèle. Pour chaque régime le diagramme de phase possible sera identifié. La classification des régimes est inspirée par le travail de S. Aubry [Aub80, Aub83] pour le modèle de Frenkel-Kontorova classique. Les propriétés du modèle FKQ [FK38] sont déterminée par les valeurs des trois paramètres physiques : l'intensité d'interaction électronique K , la force du potentiel d'impureté U et le paramètre de commensurabilité $k_F a$. Supposons d'abord que le potentiel d'impureté tend vers l'infini $U \rightarrow \infty$ de sorte qu'on peut négliger les deux premiers termes dans l'équation (1.49).⁴²

$$\hat{H} \approx -U \sum_n \cos(2k_F a n + 2\Phi_n) \quad (1.50)$$

Le champ de phase bosonique $\Phi(x)$ dans l'état fondamental sera accroché dans les points $x_n = na$ par la condition de minimum d'énergie : $\Phi_n = -k_F a n \pmod{\pi}$.⁴³ Si $k_F a/\pi$ est un nombre irrationnel, les valeurs de la phase Φ couvriront tout l'intervalle $[0, 2\pi]$. Par contre si $k_F a/\pi$ est un nombre rationnel, ces valeurs formeront un ensemble fini de mesure nulle. Essayons de prendre en compte le deuxième terme de l'Hamiltonien initial de FKQ (1.49) :

$$\hat{H} \approx \frac{1}{2\pi K} \int_0^L \left(\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right)^2 dx - U \sum_n \cos(2k_F a n + 2\Phi_n) \quad (1.51)$$

⁴¹Le modèle de Frenkel-Kontorova classique consiste en une chaîne de billes dans un potentiel périodique et liées par des ressorts de longueur identique.

⁴² $\Phi_n \equiv \Phi(x = na)$.

⁴³on pourrait être étonné par un bref passage d'un problème de la mécanique quantique vers un problème de la mécanique analytique. En fait, en absence du terme contenant l'opérateur conjugué à la phase les deux problèmes sont équivalents. A titre exemplaire on pourrait considérer le problème aux valeurs propres suivant $\hat{H}|\psi\rangle \equiv \hat{x}^2|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle$. Le spectre est continu $\varepsilon \in [0, \infty)$ et la fonction d'onde de l'état fondamental $\varepsilon_0 = 0$ est donnée par $\langle x|0\rangle = \delta(x)$, $\hat{H}\langle x|0\rangle = x^2\delta(x) = 0$.

Nous obtenons en effet l'Hamiltonien de Frenkel-Kontorova classique :⁴⁴ le terme avec les dérivés joue le rôle du potentiel élastique (énergie des ressorts liants les billes) et la partie en cosinus est l'énergie du potentiel oscillant. La condition de minimum d'énergie conduit à l'expression qui doit être valable en dehors des impuretés :

$$\frac{d^2}{dx^2}\Phi_{\min}(x) = 0 \Leftrightarrow \Phi_{\min}(x) = Ax + B, \quad \text{pour tous } x \neq na$$

Nous pouvons donc ramener ce modèle à un problème plus simple, car les états de plus basse énergie peuvent être calculés à partir de l'Hamiltonien discret :⁴⁵

$$\hat{H}_{FKcl} = \sum_{n=0}^{N_s-1} \frac{1}{2\pi K} \frac{(\Phi_{n+1} - \Phi_n)^2}{a} - U \cos(2k_F a n + 2\Phi_n) \quad (1.52)$$

En imposant les conditions aux points limites par $\Phi(0) = \Phi(L) \bmod \pi$,⁴⁶ nous arrivons à deux cas de figure différents. Pour le remplissage rationnel ($k_F a / \pi \in \mathbb{Q}$) les solutions de plus basse énergie sont des lignes droites fermées $\Phi(x) = -k_F x \bmod \pi$, Fig. 1.27. Dans le cas incommensurable ($k_F a / \pi \notin \mathbb{Q}$) les solutions en forme de lignes droites ne satisfont plus des conditions aux limites. A grand U il est clair que la solution doit être proche d'une ligne droite en ayant au moins une fracture (*kink*) pour être périodique. Comme l'endroit de la fracture n'est pas fixé, il y a toute une famille de solutions de plus basse énergie. En augmentant l'énergie élastique ($KU \searrow$) nous favorisons la création des fractures et la surface occupée par des solutions fondamentales se dilate de plus en plus. A faible potentiel d'impureté (U) l'ensemble des solutions fondamentales devient dense sur tout le plan $(x, \Phi(x))$, Fig. 1.30.

Quelle est la différence principale entre ces deux remplissages ? En effet, pour le remplissage rationnel les états de plus basse énergie sont séparés les uns des autres, en conséquence pour faire une transformation d'un état fondamental vers un autre, nous sommes obligés de passer par un état de plus haute énergie. Intuitivement cela signifie que ce système possède un gap énergétique pour les remplissages rationnels. Par contre dans le cas incommensurable la dernière affirmation n'est plus valable : comme c'était montré sur la figure 1.27 les états de plus basse énergie sont étalés sur l'intervalle et nous pouvons imaginer l'existence d'une transformation infinitésimale entre eux. Ceci indique qu'à remplissage irrationnel le système peut se trouver dans un état conducteur.⁴⁷

En ayant exploité la région de $K \rightarrow 0$ pour le modèle FKQ une conclusion importante peut être tirée : *le modèle de Frenkel-Kontorova classique décrit un isolant*

⁴⁴ou plus rigoureusement de la classe des modèles de Frenkel-Kontorova

⁴⁵ N_s est le nombre de sites du réseau.

⁴⁶Ca veut dire que le système contient le nombre entier de particules, comme $\int_0^L \rho(x) dx \equiv (\Phi(0) - \Phi(L))/\pi$ est le nombre total de particules compté par rapport à une mer de Dirac.

⁴⁷On peut faire une analogie avec le mode de Goldstone pour les états fondamentaux ayant une symétrie continue. Cette question nécessite une discussion supplémentaire, car ce n'est pas vraiment la symétrie des états fondamentaux qui permet d'avoir les excitations de basse énergie.

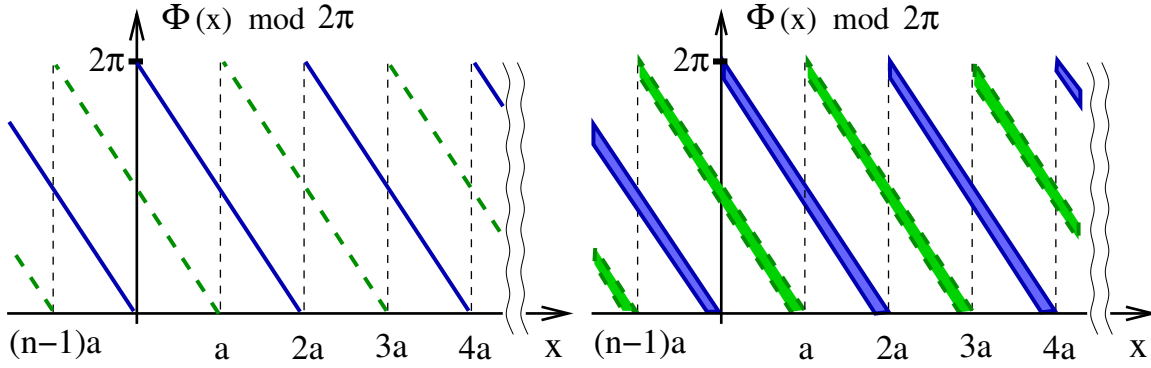


FIGURE 1.27: A grand U , les deux états de plus basse énergie du modèle de Frenkel-Kontorova classique pour le remplissage rationnel (à gauche) sont des lignes droites; $k_F a / \pi = 1/2 \in \mathbb{Q}$. L'ensemble des solutions de basse énergie est étalé autour de la ligne droite $[0, 2\pi]$ dans le cas incommensurable (à droite) : $k_F a / \pi \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$.

à remplissages rationnels et dans le cas incommensurable au moins à faible potentiel possède l'état fondamental métallique.

Avant de passer à la classification il est utile de considérer la limite d'électrons sans interaction $K = 1$. L'Hamiltonien (1.49) se réécrit comme :

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_n \frac{1}{L} \delta(x - na) \right\}$$

La diagonalisation de cet opérateur simultanément avec le générateur de translation nous donne son spectre, défini par une équation implicite :

$$\cos(k'a) - \cos(ka) = \frac{\sin(ka)}{2kL} \quad \text{avec } \hbar k = \sqrt{2mE}$$

où k' est le vecteur du réseau réciproque qui prend l'ensemble des valeurs discrètes $k'_n = 2\pi \frac{n}{L}$. La présence du potentiel d'impuretés périodiques ouvre le gap énergétique dans le spectre de l'Hamiltonien d'électrons libres pour les valeurs de remplissage des bandes entières⁴⁸ $k'_F a = \pi n$, où $n \in \mathbb{N}$.

Ces deux cas limites nous permettent de prévoir les diagrammes de phase pour différents facteurs de remplissage. Il est naturel de distinguer trois domaines de définition du facteur de remplissage :

- 1) le cas commensurable (remplissage entier) $k_F a = \pi n$, où $n \in \mathbb{N}$;
- 2) le remplissage rationnel, $k_F a = \pi p/q$, où p et $q \in \mathbb{N}$;
- 3) le cas incommensurable (remplissage irrationnel) $k_F a / \pi \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$.

Remplissage entier

Nous commençons par l'analyse du cas le plus simple, notamment le cas du remplissage

⁴⁸je souligne que cette affirmation est valable pour le remplissage entier et non pas rationnel

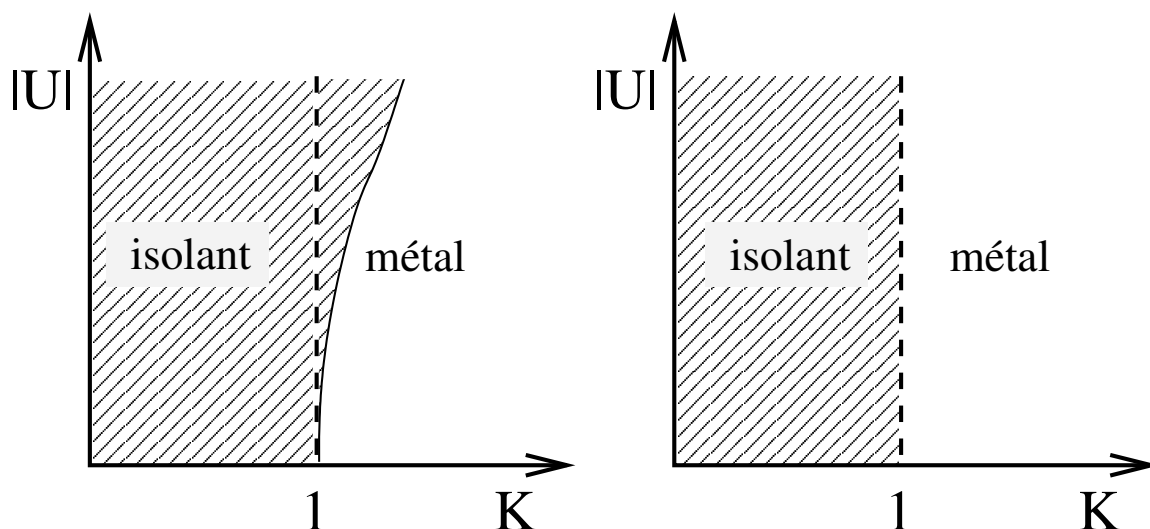


FIGURE 1.28: Deux scénarios possibles du diagramme de phase pour le cas commensurable, $k_F a = \pi n$, où $n \in \mathbb{N}$. Le groupe de renormalisation à faible interaction électronique $K \approx 1$ donne le diagramme de la droite. Le flot de renormalisation devant être arrêté pour le cut-off de l'ordre $\hbar v_F/a$, le diagramme de gauche est plus plausible physiquement, voir la section 1.6 page 62.

entier, $k_F a = \pi n$, où $n \in \mathbb{N}$. Comme il a été montré dans la partie précédente pour toutes valeurs du potentiel d'impureté le système est isolant pour les deux valeurs critiques du coefficient d'interaction électronique $K = 0$ ou $K = 1$. La région entière entre ces deux valeurs critiques, $K \in [0, 1]$ doit décrire alors une phase isolante. Cette région correspond au cas d'interaction répulsive entre les électrons. A $K = 1$ le spectre des fermions sans interaction a un gap, d'autant plus grand que U est grand. Il est a priori difficile à dire si ce gap se referme tout de suite, dès que K devient positif,⁴⁹ ou si la transition se fait dans la région d'interaction électronique attractive. Dans la section 1.6 nous montrons par le calcul du groupe de renormalisation dans la région de faible interaction électronique $K \approx 1$, que ceci est illustré sur la partie droite de la figure 1.28. Toutefois cette prédiction du groupe de renormalisation est valable tant que l'on sonde le système à des échelles d'énergies éloignées du niveau de Fermi de plus de $\hbar v_F/a$, donc des échelles de longueurs petites devant a . A plus basse énergie, la renormalisation de U se ralentit considérablement lorsque l'on entre dans le régime bidimensionnel. Finalement on obtient le diagramme de phase intuitif présenté à gauche de la figure 1.28.

Remplissage rationnel

Dans le cas rationnel $k_F a = \pi p/q$ à très forte interaction électronique répulsive ($K \rightarrow 0$), comme nous avons mentionné précédemment, il y a un gap dans le spectre des modes collectifs. Introduisant de petites fluctuations quantiques $K \ll 1$, on doit pouvoir estimer leur effet sur ce gap. Dans la région de faible interaction $K \approx 1$ l'état

⁴⁹ ceci correspond à la coupure du fil en deux bouts dans le cas d'une seule impureté

fondamental se trouve dans la phase métallique, car le remplissage des bandes est partiel. En fait, on s'attend dans ce cas à un diagramme de phases de la forme :

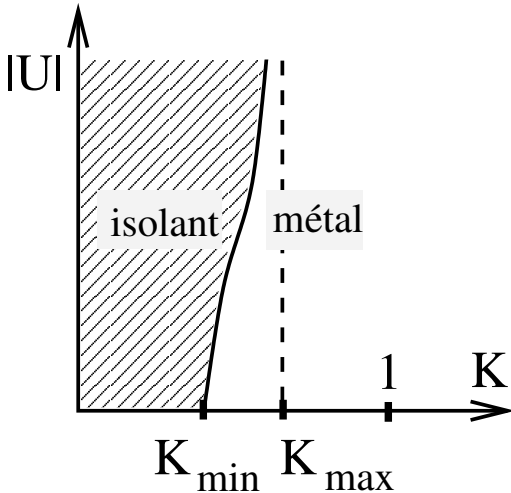


FIGURE 1.29:
 $K_{\max} < 1$, car aucun gap ne s'ouvre pour les fermions libres $K = 1$;
 $K_{\min} > 0$, car dans la limite classique $K \rightarrow 0$, nous avons un état commensurable.

Dans le régime métallique, il pourrait être intéressant d'étudier des fonctions d'onde variationnelles qui prennent en compte les deux aspects : tendance des impuretés à couper la chaîne, mais l'existence d'une mer de Dirac de solitons du champ Φ . La transition métal-insolant serait donc liée à une perte de mobilité de ces solitons.

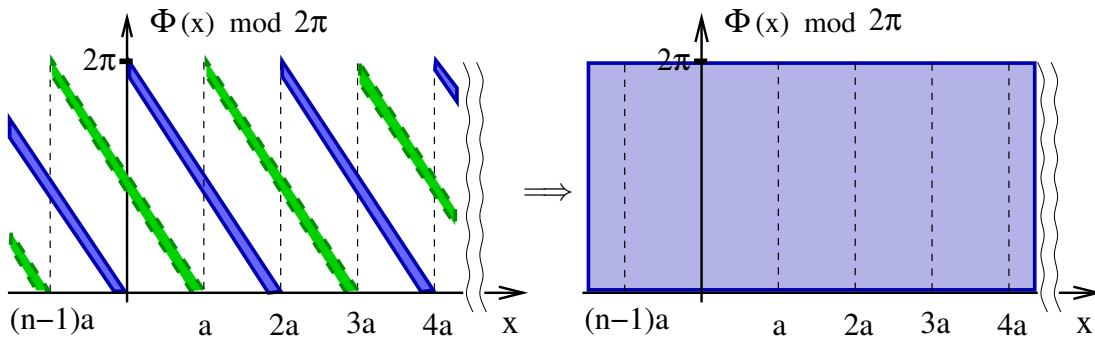


FIGURE 1.30: A remplissage irrationnel $\rho \equiv k_F a / \pi \in \mathbb{R}$, l'augmentation respective de l'énergie élastique ($KU \searrow$) fait croître la surface occupée par les états de plus basse énergie. A la valeurs critique du potentiel d'impureté $U_c(\rho)$ l'ensemble des solutions fondamentales devient dense sur tout le plan $(x, \Phi(x))$, les phasons acquièrent la mobilité sur tout le réseau.

Remplissage irrationnel

Le cas du remplissage irrationnel est a priori le plus difficile. Comme nous avons vu plus haut même dans la limite classique $K \rightarrow 0$, il est difficile d'identifier l'état fondamental. Cette région de K nécessite une explication plus détaillée. Le modèle FK classique subi une transition de phase, appelée la transition de brisure d'analyticité (TBA) [Aub83], dont nous expliquons ici le principe. L'augmentation respective de l'énergie élastique ($KU \searrow$) fait croître la surface occupée par les états de plus basse

énergie. A la valeur critique du potentiel d'impureté $U_c(\rho)$ l'ensemble des solutions fondamentales devient dense sur tout le plan $(x, \Phi(x))$. Exprimons ceci autrement pour un problème légèrement modifié, soit le système de grande taille avec les extrémités libres. *Le nombre de particules dans un tel système n'est pas toujours entier, il y est seulement si la solution fondamentale est périodique (modulo π), car $\int_0^L \rho(x)dx \equiv [\Phi(0) - \Phi(L)]/\pi$. De plus $2k_F a$ joue désormais le rôle du potentiel chimique.* On peut s'en convaincre en remplaçant Φ_n par $\tilde{\Phi}_n \equiv \Phi_n + k_F a n$ dans (1.52) et obtenir ainsi en terme linéaire de type $\mu(\tilde{\Phi}_L - \tilde{\Phi}_0)$. Il est utile d'introduire la notation du *nombre de rotation* par $\nu = N/N_s$, où N_s est le nombre de sites du réseau.⁵⁰ Si le système a le nombre de rotation rationnel au départ et nous essayons d'injecter les particules en variant le potentiel chimique ($2k_F a$), curieusement, à cause de la présence d'impuretés, ce système préférera rester à nombre de rotation rationnel dans un intervalle fini de variation de $2k_F a$. En traçant la dépendance du nombre de rotation ν en fonction du potentiel chimique nous obtenons une courbe continue avec un nombre infini des plateaux, qui porte le nom de *l'escalier du diable*, Fig. 1.31. En effet la présence du potentiel d'impureté permet de choisir les solutions fondamentales fermées même à nombre de rotation irrationnel "proche"⁵¹ d'une valeur rationnelle. Ce phénomène est appelé le *mode locking*, voir Appendice C. L'intervalle de mode locking est différent pour chaque potentiel chimique rationnel, et il devient plus large si l'on augmente le potentiel d'impureté U .

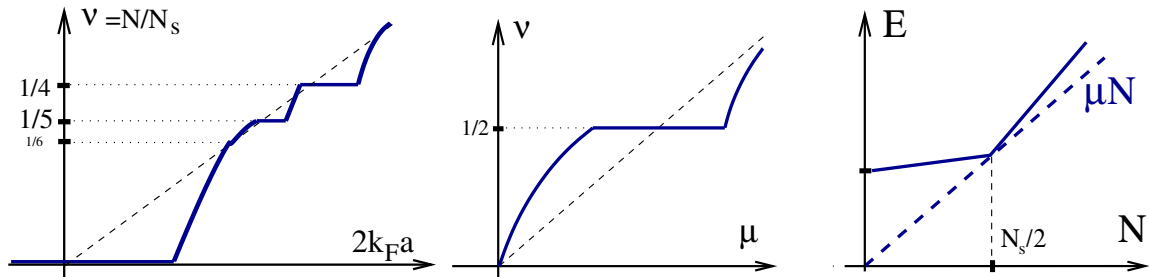


FIGURE 1.31: Lien entre le mode locking (à gauche) et l'isolant de Mott (au milieu). Dans les deux cas le système est caractérisé par des plateaux dans la dépendance du nombre de particules ($N = N_s \nu$) en fonction du potentiel chimique (μ pour l'isolant de Mott et $2k_F a$ pour le mode locking). Le système garde le nombre de particules constant dans une région de variation du potentiel chimique.

Un lien peut être établi entre l'isolant de Mott et le mode locking. Si la force effective d'interaction électronique dans un système change brusquement avec la distance, l'énergie de ce système, en fonction du remplissage électronique, possède un "cusp" à une valeur du remplissage $\nu = N/N_s$; $dE/dN_+ \neq dE/dN_-$ (Fig. 1.31 à droite). Le système devient isolant à cette valeur de remplissage et porte le nom d'isolant de

⁵⁰nous utilisons cette notation pour ne pas confondre le paramètre de remplissage $2k_F a$, qui joue le rôle du potentiel chimique pour le problème avec des extrémités libres, avec le nombre de particules par site $\nu = N/N_s$.

⁵¹La notion "proche" peut être défini rigoureusement par l'introduction de la hiérarchie des nombres rationnels.

Mott.⁵² Considérons l'ensemble grand canonique où le nombre de particules n'est pas fixé, mais où nous pouvons changer le potentiel chimique. Dans ce cas le système minimise son énergie grand canonique $E(N) - \mu N$. Il est clair que la rupture de la dérivée de l'énergie engendre un plateau dans la dépendance du nombre de particules dans le système en fonction du potentiel chimique. Mais c'est exactement le mode locking.

Une propriété importante distingue ces cas commensurable et incommensurable. A nombre de rotation rationnel (ν) pour passer d'un état de plus basse énergie vers un autre nous sommes obligés de franchir une barrière énergétique, appelée la barrière de Peierls-Nabarro. En conséquence l'état fondamental est toujours isolant. Par contre, à nombre de rotation irrationnel et à faible potentiel d'impureté U , il est possible de construire un groupe compact qui laisse invariant l'ensemble des états fondamentaux. L'existence de ce groupe permet d'introduire le mode de Goldstone (appelé *le mode de phason*), qui se propagera sur tout le réseau. Pour chaque nombre de rotation irrationnel il existe une valeur critique de $U_c(\rho)$ où les phasons perdent leur mobilité. En augmentant le potentiel d'impureté nous élargissons la mesure totale d'intervalles de mode locking et au moment où elle arrive à la valeur 1 (couvre tout l'intervalle, $U > \sup_{\rho}[U_c(\rho)]$) nous observons une transition de phase vers un état isolant pour toutes valeurs du nombre de rotation, Fig. 1.32 [Aub80].⁵³

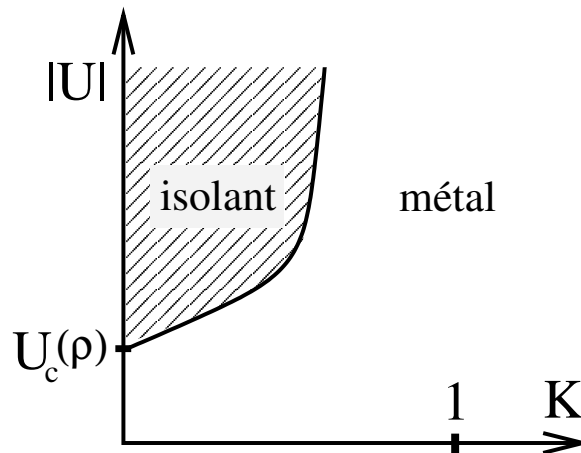


FIGURE 1.32: Diagramme de phase possible à remplissage incommensurable $k_F a = \pi\rho$, où $\rho \notin \mathbb{Q}$. Comme le remplissage est partiel le système est métallique si les électrons sont libres ($K \approx 0$). Dans la région classique $K \rightarrow 0$ le système subit la transition de phase par brisure d'analyticité (TBA) et devient isolant à fort potentiel d'impuretés $|U| > U_c(\rho)$.

Récapitulatif de la section :

Dans cette section nous avons identifié l'Hamiltonien d'électrons en interaction

⁵²Par exemple le modèle de Hubbard $1D$ avec l'interaction entre les plus proches voisins est un isolant de Mott à demi-remplissage.

⁵³cette transition porte le nom de la transition de brisure d'analyticité (TBA), car la fonction qui décrit l'état fondamental perd l'analyticité au point de transition. Je souligne que la transition se fait pour chaque valeur de ρ .

dans le potentiel ponctuel périodique (1.49), qui appartient à la classe de potentiels du modèle de Frenkel-Kontorova quantique. Ensuite les diagrammes de phase pour les trois types de valeurs du remplissage ont été proposés, figures 1.28, 1.29 et 1.32.

1.5.3 Approche variationnelle quantique

Quelle méthode faut-il choisir pour pouvoir résoudre le modèle de Frenkel-Kontorova quantique (1.49 [HL00]), si même son analogue classique (1.27) possède des états fondamentaux non-triviaux à remplissage irrationnel [ZCS02] ? En plus de la théorie de perturbation standard, on pourrait essayer d'appliquer diverses approximations proposées pour le modèle XY quantique. Une approche variationnelle quantique est particulièrement appropriée [HC00] pour étudier la région de faibles fluctuations quantiques, dans le cas où l'état fondamental classique est fortement dégénéré. Dans ce chapitre nous allons donner un exemple de calcul dans l'approche variationnelle, et ensuite nous expliquons comment elle peut être appliquée au modèle de Frenkel-Kontorova quantique.

Pour comprendre le principe de fonctionnement de l'approche variationnelle il est utile est de considérer d'abord un exemple simple d'un rotateur. L'Hamiltonien d'un seul rotateur est donné par :

$$\hat{H} = -\frac{g}{2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{1}{g} \cos \phi \quad (1.53)$$

Notons que cet Hamiltonien est invariant sous les translations de 2π . Nous nous intéressons à la région de faibles fluctuations quantiques : $g \ll 1$. En absence de fluctuations quantiques l'état fondamental est fortement dégénéré : $\phi_m = 2\pi m$, où $n \in \mathbb{Z}$.

Considérons un Hamiltonien d'oscillateur $\hat{H}_{\text{osc}} = \frac{h}{2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\phi^2}{2h}$, qui nous servira à fabriquer des fonctions d'onde variationnelles. L'état fondamental de \hat{H}_{osc} est donné par $\Psi_0(\phi) \sim \exp[-\phi^2/(2h)]$. De la même façon, on définit les fonctions d'onde translattées :

$$\Psi_m(\phi) \sim \exp\left(-\frac{(\phi - 2\pi m)^2}{2h}\right) \quad \text{où } m \in \mathbb{Z} \quad (1.54)$$

La fonction variationnelle doit posséder toutes les symétries de l'Hamiltonien qu'on étudie. Cette condition est facilement satisfaite en prenant la somme des états translattés pour la fonction d'essai :

$$\Psi(\phi) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \Psi_m(\phi) \quad (1.55)$$

L'approche variationnelle consiste en la minimisation de la valeur moyenne de \hat{H} (1.53) dans cet état, par rapport au paramètre h :

$$\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle_h}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_{l=0}^{\infty} (2 - \delta_{l,0}) \left[\frac{g^2}{2h^2} \left(\frac{h}{2} - \pi^2 l^2 \right) - (-1)^l e^{-h/4} \right] \exp(-\pi^2 l^2/h)}{g \sum_{l=0}^{\infty} (2 - \delta_{l,0}) \exp(-\pi^2 l^2/h)} \quad (1.56)$$

Ces sommes convergent très vite grâce à la présence des termes gaussiens. Pour évaluer la valeur de h qui minimise l'énergie il suffit de retenir seulement le terme $l = 0$: $\langle \hat{H} \rangle \approx g/(4h) - g^{-1} \exp(-h/4)$. La valeur de h qui minimise l'énergie est donnée par une équation implicite : $g = h \exp(-h/8)$. Comme $g \ll 1$, alors $h_{\min} \approx g$, ce qui revient à remplacer le potentiel $-1/g \cos \phi$ par $-1/g + \phi^2/(2g)$.

Les trois pas de l'approche variationnelle doivent être retenus :

- 1) Le premier pas consiste en la recherche et la diagonalisation d'un Hamiltonien proche du problème initial. Pour les problèmes de théorie des champs, ceci aboutit dans la plupart des cas à un Hamiltonien harmonique, dont la diagonalisation peut être faite par la quantification canonique, voir section 3.3.⁵⁴
- 2) Ensuite, nous composons un état d'essai qui possède le nombre maximal des symétries de l'Hamiltonien initial, de sorte à ne pas rater la physique du système. Notamment des processus tunnel entre les différents minima équivalents du problème classique, reliés entre eux par des symétries.
- 3) La troisième partie est purement calculatoire : il faut minimiser la valeur moyenne de \hat{H} dans l'état d'essai.

Essayons d'appliquer le principe variationnel pour le modèle FKQ (1.49) :

$$\hat{H}_{FK} = \frac{v_F}{2} \int_0^L dx \left\{ \pi K \Pi_\Phi^2(x) + (\pi K)^{-1} \left(\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \right\} - U \sum_n \cos(2k_F a n + 2\Phi_n) \quad (1.57)$$

Identifions d'abord les symétries du problème, pour comprendre quelles contraintes il faut imposer à la fonction d'onde d'essai. L'Hamiltonien FKQ possède une symétrie discrète $\Phi(x) \mapsto \Phi(x) + \pi$, et une symétrie continue $\Theta(x) \mapsto \Theta(x) + \alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}$. Que signifient ces symétries ? Il est commode de regarder les générateurs de ces transformations unitaires (1.44) :

$$\begin{aligned} \Pi_\Phi(x) &= \frac{1}{L} \sum_{q \neq 0} (\rho_R(q) - \rho_L(q)) e^{-iqx} + \frac{1}{L} (\hat{N}_R - \hat{N}_L) \\ \Pi_\Theta(x) &= -\frac{1}{L} \sum_{q \neq 0} (\rho_R(q) + \rho_L(q)) e^{-iqx} - \frac{1}{L} (\hat{N}_R + \hat{N}_L) \end{aligned} \quad (1.58)$$

Ici j'ai extrait la composante de Fourier à $q = 0$, qui a signification physique simple de nombre de particules sur chaque branche L ou R : $\hat{N}_r \equiv \rho_{r(q=0)}$.⁵⁵ Le générateur des transformations $\Theta(x) \mapsto \Theta(x) + \alpha$ est la charge totale, qui est bien conservée. Une première contrainte sur la fonction d'onde est donc :

$$\int_0^L \Pi_\Theta(x) dx = N = \text{const}$$

⁵⁴Les Hamiltoniens quadratiques (harmoniques) sont les seuls (à quelques exceptions près en 1+1 dimensions), qu'on sait résoudre explicitement dans la théorie de champs.

⁵⁵j'utilise r comme l'indice des branches : $r = 1 \Leftrightarrow R$ et $r = -1 \Leftrightarrow L$.

N est le nombre total de particules compté par rapport à une mer de Dirac de référence. Soit en utilisant la définition de Π_Θ , il s'exprime d'une façon équivalente par :

$$\int_0^L \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} dx = \Phi(L) - \Phi(0) = \pi N \quad (1.59)$$

Le générateur de $\Phi(x) \mapsto \Phi(x) + \alpha$ est le courant total $\hat{J} = v_F(\hat{N}_R - \hat{N}_L)$ qui n'est plus conservé lorsqu'il y a des impuretés $U \neq 0$. Toutefois, la parité de \hat{J}/v_F est bien conservée, ce que l'on traduit par la symétrie de translation discrète $\Phi(x) \mapsto \Phi(x) + \pi$. La fonction d'onde, qui appartient à la représentation irréductible de cette transformation unitaire ($\hat{V} = \exp(i\pi(\hat{N}_R - \hat{N}_L))$), satisfait l'une des deux contraintes suivantes :

$$\begin{aligned} \hat{V}|\Psi\rangle &= |\Psi\rangle && \text{pour les états, tels que } \hat{N}_R = \hat{N}_L \pmod{2} \\ \hat{V}|\Psi\rangle &= -|\Psi\rangle && \text{pour les états, tels que } \hat{N}_R \neq \hat{N}_L \pmod{2} \end{aligned} \quad (1.60)$$

En construisant des fonctions d'ondes variationnelles, il est important de satisfaire (1.59) et (1.60) simultanément. La charge sur chaque branche étant entière la fonction d'onde du système doit rester en plus inchangée lorsque $\Theta \mapsto \Theta + 2\pi$ ou $\Phi \mapsto \Phi + 2\pi$.

Le pas suivant du principe variationnel consiste en la résolution du problème classique (avec les fluctuations quantiques nulles) et en la diagonalisation de l'Hamiltonien approché (harmonique). L'état fondamental étant facilement identifiable seulement à remplissage rationnel (Fig. 1.27 page 51), dans la suite nous analysons juste le cas commensurable $k_F a = \pi n$, $n \in \mathbb{N}$.⁵⁶ Dans la limite classique ($K \mapsto 0$) à remplissage entier, les fonctions d'onde sont les états où $\Phi(x)$ prend une valeur constante égale à πm .⁵⁷ Appelons $|\Psi_m\rangle_{\text{cl}}$ ces états. Si K est petit, nous pouvons dans un premier temps supposer les fluctuations harmoniques, donc développer chaque cosinus dans la somme $U \sum_n \cos(2\Phi_n)$ en $U(1 - 2\Phi_n^2)$,⁵⁸ et ensuite obtenir des fonctions d'onde gaussiennes $|\Psi_m\rangle_{\text{gaus}}$, dont l'allure du support est montrée sur la figure 1.33. Je souligne ici que l'image du support du champ $\Phi(x)$ (Fig. 1.33) capture parfaitement la physique d'oscillations de Friedel. Les composantes de Fourier de la densité électronique proches de $\pm 2k_F$ sont localement données par les termes de rétrodiffusion $\psi_R^\dagger(x)\psi_L(x)$ (composante $\approx 2k_F$) et $\psi_L^\dagger(x)\psi_R(x)$ (composante $\approx -2k_F$). Soit avec le champ bosonique (1.48) $\exp(\pm 2i\Phi(x))$. Or pour le champ gaussien $\langle \exp(i\Phi) \rangle = \exp(-\langle \Phi^2 \rangle / 2)$, plus le champ $\Phi(x)$ fluctue, plus l'amplitude des oscillations de Friedel est faible et vice versa. L'intuition est alors la suivante : plus Φ est "ordonné" et plus on est proche d'un état cristallin, avec le vecteur d'onde $q = 2k_F$. Les fonctions $|\Psi_m\rangle_{\text{gaus}}$ fluctuent autour de la valeur $\Phi(x) = m\pi$ (comparez avec l'eq. 1.54), nous pouvons donc facilement satisfaire la condition (1.59). Pour satisfaire (1.60) il suffit de prendre les combinaisons paires ou

⁵⁶le cas du remplissage rationnel est tout à fait analogue, par contre le cas incommensurable nécessite d'abord la compréhension d'état fondamental classique [ZCS02].

⁵⁷nous nous rappellerons que la phase Φ est définie modulo 2π

⁵⁸ $\Phi_n \equiv \Phi(x = na)$

impaires :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_+ &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} |\Psi_m\rangle_{\text{gaus}}, & \text{pour } \hat{N}_R = \hat{N}_L \pmod{2} \\ |\Psi\rangle_- &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} (-1)^m |\Psi_m\rangle_{\text{gaus}}, & \text{pour } \hat{N}_R \neq \hat{N}_L \pmod{2} \end{aligned} \quad (1.61)$$

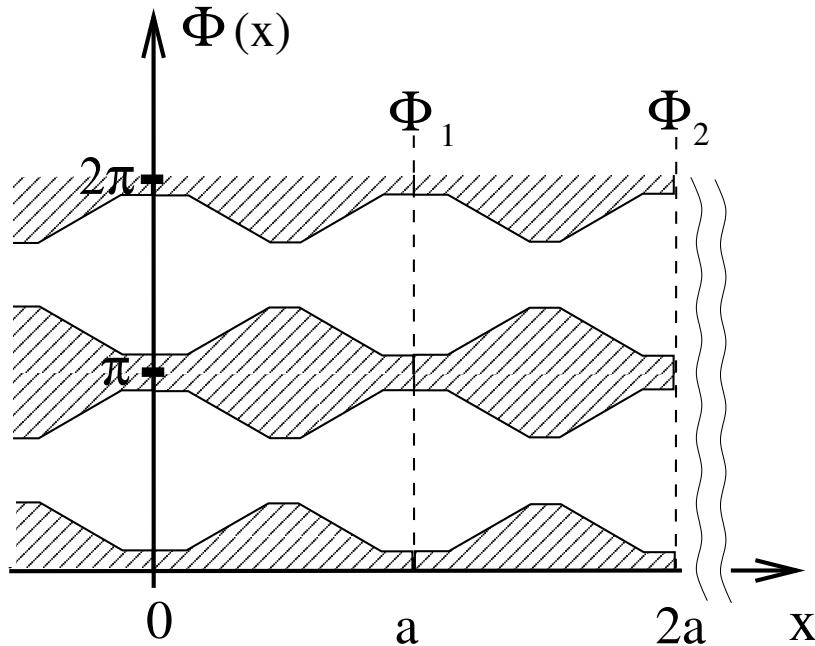


FIGURE 1.33: Le support du champ $\Phi(x)$ dans le régime de faibles fluctuations quantiques ($K \rightarrow 0$). Les fluctuations de Φ sont petites autour de chaque impureté, elles atteignent le maximum entre les impuretés, là où les oscillations de Friedel sont minimales.

Notons que cette image physique simple donnée par ces fonctions d'onde "gaussiennes" n'est pas tout à fait en accord avec l'image suggérée par le groupe de renormalisation pour une seule impureté [KF92a]. Kane et Fisher montrent dans leur travail que le terme de rétrodiffusion (terme en U) ne joue pas un grand rôle à haute énergie, mais devient de plus en plus pertinent à basse énergie. Pour reproduire alors ce résultat il faut admettre qu'à courte distance la valeur de $\langle \Phi^2(0) \rangle$ est grande et que les recouvrements entre différents minima classiques jouent un rôle important. Par contre, à grande distance (basse énergie), il faut montrer que tout se passe comme si ces processus tunnels n'intervenaient plus.

Nous allons trouver dans la suite les fonctions gaussiennes, dont nous avons besoin pour la construction des fonctions d'onde variationnelles (1.61). L'état fondamental classique dans le cas commensurable ne diffère pas de l'état fondamental pour une seule impureté, ce qui nous permet de prendre la solution du problème harmonique correspondant au cas d'une seule impureté,⁵⁹ tout en choisissant le paramètre variationnel

⁵⁹il faut toutefois changer les conditions aux limites sur le champ Φ , car pour un réseau, $\Phi(x) = \Phi(x + a)$.

de sorte que nous puissions reproduire le support de la fonction d'onde, montrée sur la figure 1.33.⁶⁰

L'idée est de remplacer le problème à une impureté ponctuelle $U\psi^\dagger(x=0)\psi(x=0)$ par le problème avec une impureté localisée décrite par la matrice de diffusion :

$$\hat{S}(k) = \begin{pmatrix} r'(k) & t(k) \\ t'(k) & r(k) \end{pmatrix} \quad (1.62)$$

Ce sont les coefficients de cette matrice qui peuvent être pris comme paramètres de minimisation dans l'approche variationnelle. Notons que toute la dépendance en k est à déterminer, ce qui correspond à une infinité de paramètres variationnels. Mais c'est à travers de cette dépendance en k qu'on peut espérer retrouver l'image physique donnée par le groupe de renormalisation [KF92a]. Nous commençons par considérer le problème à une impureté ponctuelle (de type δ), la généralisation pour une impureté locale étant plus simple à faire plus tard. La densité de lagrangien pour le cas d'une seule impureté ponctuelle à $x = 0$ s'écrit comme :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2K} \left\{ \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 - g\Phi(x)^2 \delta(x) \right\} \quad \text{où } g \stackrel{\text{def}}{\iff} KU, \quad g > 0 \quad (1.63)$$

Les équations du mouvement classique correspondantes sont :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = -g\Phi(x, t)\delta(x) \quad (1.64)$$

En cherchant la solution dans la forme $\Phi(x, t) = \Psi(x) \exp(ikt)$ nous obtenons une équation de Schrödinger standard :

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + g\delta(x) \right] \Psi(x) = k^2 \Psi(x)$$

La généralisation pour une impureté localisée est désormais transparente, il suffit de remplacer la fonction $g\delta(x)$ par un potentiel local $V(x)$, que nous pouvons décrire à l'aide de la matrice \hat{S} .

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x) = k^2 \Psi(x)$$

Le Lagrangien de ce problème étant aussi quadratique nous pouvons le résoudre par la quantification canonique, voir section (3.3). En conséquence il suffit de trouver une base complète orthogonale du problème classique. Nous fabriquons cette base à partir des états de diffusion :

$$\begin{aligned} \Psi_{k \rightarrow}(x) &= e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & \text{pour } x < 0 \\ \Psi_{k \rightarrow}(x) &= t(k)e^{ikx}, & \text{pour } x > 0 \end{aligned} \quad (1.65)$$

⁶⁰le support de la fonction d'onde gaussienne pour une seule impureté s'étale sur tout l'intervalle $[0, 2\pi]$ à grande distance de l'impureté.



$x < 0$, respectivement ($x > 0$) sont les notations abrégées pour signifier que la particule se trouve à gauche (à droite) de la région où le potentiel extérieur est non nul.

$$\begin{aligned}\Psi_{k\leftarrow}(x) &= t'(k)e^{-ikx}, & \text{pour } x < 0 \\ \Psi_{k\leftarrow}(x) &= e^{-ikx} + r'(k)e^{+ikx}, & \text{pour } x > 0\end{aligned}\quad (1.66)$$



Par continuation analytique de la matrice de diffusion (voir l'annexe A.4) nous pouvons démontrer que ces états forment une base orthonormée dans l'espace des solutions. La relation de complétude est donnée par :

$$\delta(x - x') = \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} (\Psi_{k\rightarrow}(x)\Psi_{k\rightarrow}^*(x') + \Psi_{k\leftarrow}(x)\Psi_{k\leftarrow}^*(x'))$$

La solution de l'équation du mouvement quantique s'écrit tout simplement :

$$\begin{aligned}\hat{\Phi}(x, t) &= \int_0^\infty \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \Psi_{k\rightarrow}(x)\hat{a}(k) + \Psi_{k\leftarrow}(x)\hat{b}(k) \right\} e^{-ikt} + \{\text{h.c.}\} \\ \hat{\Pi}(x, t) &= \partial\hat{\Phi}/\partial t = \int_0^\infty \frac{kdk}{i\sqrt{2\pi}} \left\{ \Psi_{k\rightarrow}(x)\hat{a}(k) + \Psi_{k\leftarrow}(x)\hat{b}(k) \right\} e^{-ikt} + \{\text{h.c.}\}\end{aligned}\quad (1.67)$$

Où \hat{a} et \hat{b} sont les opérateurs d'annihilation bosoniques :

$$\begin{aligned}[\hat{a}(k), \hat{a}^\dagger(k')] &= \delta(k - k') & [\hat{b}(k), \hat{b}^\dagger(k')] &= \delta(k - k') \\ [\hat{a}(k), \hat{b}(k')] &= 0 & [\hat{a}(k), \hat{b}^\dagger(k')] &= 0\end{aligned}$$

Nous écrivons alors un état gaussien comme le fondamental à zéro particule dans l'espace de Fock généré par l'ensemble des opérateurs de création-annihilation :⁶¹

$$|\Psi\rangle_{\text{gaus}} \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} |\Omega\rangle, \quad \text{où } |\Omega\rangle \text{ est défini par } \hat{a}(k)|\Omega\rangle = \hat{b}(k)|\Omega\rangle = 0$$

La valeur de l'opérateur de phase bosonique $\Phi(x)$ dans cet état est nulle : $\langle\Omega|\hat{\Phi}(x, t)|\Omega\rangle = 0$. Pour obtenir un état gaussien centré autour d'une autre valeur moyenne, dont nous avons besoin pour construire un état variationnel de type (1.61), il suffit d'y appliquer un opérateur de translation dans l'espace : $|\Omega_m\rangle = \exp[-i2\pi m \int dx \hat{\Pi}(x)]|\Omega\rangle$, de sorte que $\langle\Omega_m|\hat{\Phi}(x, t)|\Omega_m\rangle = 2\pi m$. La construction d'états

⁶¹il ne faut pas confondre la fonction d'onde du problème gaussien $|\Psi\rangle_{\text{gaus}}$ (comme dans l'Eq. 1.61) avec les états "in", qu'on note aussi par la même lettre de l'alphabet grec.

variationnels devient alors triviale, car la condition (1.59) est satisfaite automatiquement et la condition (1.60) peut être réalisée en prenant la somme d'états décalés comme c'était proposé dans (1.61). Les états variationnels s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned} |\mathcal{O}\rangle_+ &= \sum_m \exp \left[i2\pi m \int_0^L \hat{\Pi}(x) dx \right] |\Omega\rangle \\ |\mathcal{O}\rangle_- &= \sum_m (-1)^m \exp \left[i2\pi m \int_0^L \hat{\Pi}(x) dx \right] |\Omega\rangle \end{aligned} \quad (1.68)$$

Nous arrivons enfin à la dernière étape de l'approche variationnelle, l'évaluation de l'énergie de chaque état essai $\langle \mathcal{O} | \hat{H}_{FKQ} | \mathcal{O} \rangle$ l'Eq. (1.57) et la minimisation de cette énergie par rapport au paramètre variationnel $\hat{S}(k)$. Ce dernier pas de l'approche variationnelle présente en soi un problème calculatoire, qui n'est pas conceptuel,⁶² néanmoins la minimisation de l'énergie par rapport à $\hat{S}(k)$ pourrait révéler des problèmes considérables. Nous avons vu (1.5.3) que même dans l'exemple d'un seul rotateur cette étape n'était franchie que dans une certaine approximation. La difficulté supplémentaire ici est que, contrairement au cas du rotateur, la physique de haute énergie suppose que l'on prenne en compte le recouvrement entre minima classiques éloignés, ce d'autant plus que la force du potentiel périodique est petite. Le cas du réseau d'impureté est plus favorable à l'approche variationnelle, car cela tend à réduire les effets de fluctuations de champ Φ , donc les recouvrements entre fonctions d'onde gaussiennes $\langle \Psi_{m\text{gaus}} | \Psi_{m'\text{gaus}} \rangle$ pour $m \neq m'$ seront plus faibles dans le cas du réseau que dans le cas de l'impureté. Ayant trouvé un autre chemin nous étions obligés de laisser cette dernière étape de côté pour pouvoir exploiter plus en détail l'approche alternative, que je présente dans la section finale de ce chapitre.

Récapitulatif de la section :

Dans cette section, ayant donné les détails de l'approche de *bosonisation*, nous avons introduit la notion du *Liquide de Luttinger*. A l'aide de cette technique nous avons obtenu l'Hamiltonien de *Frenkel-Kontorova quantique (FKQ)*, qui décrit un fil unidimensionnel d'électrons en interaction en présence d'un jeu périodique d'impuretés. Nous avons fini par l'étude de cet Hamiltonien à l'aide de l'*approche variationnelle quantique*, valable dans la région de fortes interactions électroniques répulsives.

1.6 Réseaux réguliers de Liquides de Luttinger

1.6.1 Présentation de l'article

Je termine ce chapitre par la présentation de l'article [KD05], où nous avons étudié les propriétés de transport des réseaux 2D de fils électroniques unidimensionnels

⁶²l'Hamiltonien \hat{H}_{FKQ} s'exprime en fonction d'opérateurs de création-annihilation à l'aide de (1.67) et l'état d'essai (1.68) est une combinaison d'états cohérents formés à partir du vide $|\Omega\rangle$. En conséquence l'évaluation de l'énergie moyenne se ramène au calcul des commutateurs.

dans l'approximation de faible interaction électronique.⁶³ Dans ce travail nous avons établi la dépendance de la résistance en fonction de la température pour différents remplissages électroniques en utilisant une approche par le groupe de renormalisation adaptée aux systèmes périodiques. Le grand avantage de la méthode théorique utilisée est qu'elle nous a permis d'étudier directement les réseaux réguliers $2D$ ou même plus généralement les réseaux équidistants, Fig. 1.2. Ces calculs théoriques peuvent être directement appliqués aux études expérimentales du transport électronique dans les réseaux bidimensionnels de fils quantiques.

J'ai directement inclus l'article étant donné que nous avons fait un effort pédagogique au moment de sa rédaction et dans la mesure où il s'inscrit parfaitement dans la suite de cette thèse.

1.6.2 Article [KD05]

1.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés de transport électronique dans les réseaux de fils unidimensionnels. Nous avons abordé ce problème en explorant deux régions des paramètres caractérisant ses réseaux. Dans le régime de forte interaction électronique (faible potentiel d'impureté) nous avons utilisé l'approche de bosonisation. Dans la limite de faible interaction électronique (potentiel d'impureté quelconque) nous avons construit l'approche basée sur le groupe de renormalisation adapté aux systèmes périodiques. Les effets de commensurabilité sur réseau ont été mis en évidence. Nos résultats peuvent être testés sur les réseaux de filaments quantiques et dans une perspective plus lointaine sur les nanotubes de carbone.⁶⁴

⁶³l'approche utilisée est valable dans la même région des paramètres du problème que dans le travail de Yue et al. [YGM94], voir la figure 1.26.

⁶⁴pour l'instant on arrive à fabriquer seulement les différentes jonctions des nanotubes.

Regular networks of Luttinger liquids

K. Kazymyrenko and B. Douçot

*Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Énergies, CNRS UMR 7589, Université Paris VI and VII,
4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France*

(Received 10 July 2004; revised manuscript received 12 October 2004; published 17 February 2005)

We consider arrays of Luttinger liquids, where each node is described by a unitary scattering matrix. In the limit of small electron-electron interaction, we study the evolution of these scattering matrices as the high-energy single particle states are gradually integrated out. Interestingly, we obtain the same renormalization group equations as those derived by Lal, Rao, and Sen, for a system composed of a single node coupled to several semi-infinite one-dimensional wires. The main difference between the single node geometry and a regular lattice is that in the latter case, the single particle spectrum is organized into periodic energy bands, so that the renormalization procedure has to stop when the last totally occupied band has been eliminated. We therefore predict a strongly renormalized Luttinger liquid behavior for generic filling factors, which should exhibit power-law suppression of the conductivity at low temperatures $E_F/(k_F a) \ll k_B T \ll E_F$, where a is the lattice spacing and $k_F a \gg 1$. At lower temperatures [$k_B T \ll E_F/(k_F a)$], a regular network is generally a coherent conductor, but with a much lower Fermi velocity than for a noninteracting electron gas. Some fully insulating ground states are expected only for a discrete set of integer filling factors for the electronic system. A detailed discussion of the scattering matrix flow and its implication for the low energy band structure is given on the example of a square lattice.

DOI: 10.1103/PhysRevB.71.075110

PACS number(s): 71.10.Pm, 72.10.Fk, 73.21.Hb, 73.23.Ad

I. INTRODUCTION

For the past two decades, transport properties of quantum wires have received a lot of attention.^{1,2} Besides metallic systems, two-dimensional electron gases induced in GaAs/AlGaAs heterostructures have displayed a rich variety of quantum effects such as Aharonov-Bohm resistance oscillations in a ring geometry,^{3,4} and persistent currents.^{5,6} Since the electronic transport mean free path in such artificial nanostructures can be as large as several micrometers, most scattering processes for electronic quasiparticles occur at the nodes between several conducting wires. Their influence has been extensively studied in the context of the breakdown of the quantum Hall effect in narrow channels. Experiments have revealed that the Hall resistance measured in a four probe geometry disappears at low magnetic fields.^{7,8} Theoretical studies have emphasized the role of quantum mechanical resonances in the scattering amplitudes of electrons at the junctions between the main channel and voltage probes.^{9,10} In experimental systems, confining potentials remain smooth in the vicinity of such junctions, and this induces a rather robust collimation mechanism for incoming electrons.^{11,12} This semiclassical picture has been confirmed by spectacular experiments involving junctions with various shapes.¹³ More recently, coherent Aharonov-Bohm oscillations have been measured in ballistic arrays with the dice lattice geometry,¹⁴ in agreement with the predictions of simple models for noninteracting electrons.^{15,16}

In parallel to this mostly single electron physics, dramatic electron-electron interaction effects have been demonstrated in transport measurements on various ballistic conductors with very few transverse conduction channels. For instance, tunneling into edges of a two-dimensional electronic droplet in the fractional quantum hall effect (FQHE) regime has shown current versus voltage curves with power law

behavior¹⁷ in qualitative (though not really quantitative) agreement with theoretical models based on the chiral Luttinger liquid picture.¹⁸ Measurements of shot noise associated to tunneling processes from one edge to another through a quantum point contact have also provided a convincing demonstration of the presence of fractionally charged quasiparticles in the FQHE phase.^{19–21} Another family of one-dimensional quantum conductors are carbon nanotubes. In particular, single wall nanotubes have shown a strong reduction of the single particle density of states at low energies,^{22,23} compatible with the Luttinger liquid model.^{24,25}

These two main lines of research just outlined can be naturally combined and lead us to consider the subject of networks of interconnected quantum wires, each of them being described as a Luttinger liquid. As a first step in this direction, several systems with nanotube crossings have been synthesized.^{26–29} On the theoretical side, many studies of Luttinger liquids crossing at one node are now available,^{30–34} including extensions to more complex geometries.³⁵ In this paper, we consider a regular network of Luttinger liquids. As already mentioned, the main source of electron scattering in ballistic structures arises from the nodes of the network. For noninteracting electrons, these nodes are simply described by a scattering matrix,^{36–38} and the full band structure (in the absence of disorder) can be retrieved from the knowledge of this matrix. However, as first shown by Kane and Fisher for a single impurity in a Luttinger liquid, interaction effects induce a variation of the dressed scattering matrix as a function of the incoming electron energy.^{39,40} One way to interpret this in physical terms is via the notion of Anderson's orthogonality catastrophe: in the limit of a tunnel barrier, an electron jumping across the barrier leaves a dipolar charged excitation which is very far from any eigenstate of the interacting system. A rather complicated collective relaxation process follows any single electron tunneling event. A re-

markable prediction made in these works is a dramatic qualitative difference between repulsive and attractive interactions. In the former case, the effective impurity potential grows as the typical energy becomes closer to the chemical potential. So a single impurity is sufficient to disconnect completely an infinite Luttinger liquid at $T=0$ for repulsive interactions. Conversely, any static impurity becomes transparent in the low energy limit in the case of attractive interactions.

An appealing picture for these effects has been proposed by Yue, Glazman, and Matveev.⁴¹ They have shown that renormalization of the transmission amplitude may be attributed to scattering of an incoming electron on Friedel density oscillations induced by the scatterer. From this picture, they have developed an alternative renormalization approach, which is perturbative in the electron-electron interaction, but nonperturbative in the strength of the impurity potential. This framework has been used later in references,^{32,35} and we shall adopt a similar procedure here. Note that a third type of renormalization scheme, involving the full momentum dependence of the electronic self-energy, has been implemented in a series of papers.⁴²⁻⁴⁴

The main novel feature in regular arrays in comparison to simpler geometries as a few connected wires is the existence of commensurability effects between the Fermi wavelength of electrons and the lattice period. In a noninteracting electron picture, we expect an energy gap in the spectrum when the average electron number in each unit cell of the lattice is an integer. As we shall see later, the band structure for a two-dimensional network yields a gapped excitation spectrum whenever some integer numbers of bands are filled. For interacting electrons, commensurability effects may also be understood by considering the pattern of Friedel density oscillations. In a one-dimensional geometry, these oscillations exhibit a dominant wave vector equal to $2k_F$, where k_F is the Fermi wave vector for a noninteracting one-dimensional wire with the same electronic density. Let us denote by a the distance between two nodes. Friedel oscillations originating from different nodes share the same global phase if $2k_F a$ is an integer times 2π , which simply means that the average number of electrons along a segment of length a is integer. Therefore, in the case of repulsive interactions, we expect an insulating ground state in the commensurate case, where the Kane-Fisher mechanism will disconnect all the wires incoming at the same node. For incommensurate fillings, we predict a strongly renormalized Fermi liquid, where the partially filled band crossing the Fermi level becomes much less dispersive than for the original noninteracting band structure. We suggest that these effects should be in principle observable in networks of ballistic wires where the electronic density could be controlled by a uniform gate potential. By changing the gate voltage, these systems are expected to undergo a succession of metal-insulator transitions. The difference between an interacting system and a non-interacting one will be manifested by power-law dependences for the conductance as a function of temperature at fixed bias voltage, or as a function of V at fixed T ,^{39,40} provided both $k_B T$ and eV remain higher than an energy scale Δ which is the renormalized band splitting in the incommensurate case, or the single particle gap in the commensurate one.

This paper is organized as follows: In Sec. II, we consider a simpler problem, namely a one-dimensional chain of regularly spaced impurities. We set up a renormalization group method for weakly interacting electrons which is closely related to those developed in Refs. 32 and 41, but where the periodicity of the system is explicitly taken into account. Section III generalizes this approach to any lattice composed of links of the same length, assumed to be large compared to the Fermi wavelength. We show explicitly that the scattering matrices at each node of such lattices is renormalized exactly in the same way as for a single node connecting semi-infinite wires.^{32,41} This is the central result of the present work. As an illustration with possible experimental relevance, Sec. IV considers a two-dimensional square lattice of Luttinger liquids. We show that although the evolution of the scattering matrix of the nodes as the typical energy scale is reduced yields a rather trivial low-energy fixed point where all the links become disconnected, some interesting qualitative changes in the quasiparticle band structure take place along this renormalization group flow.

II. ONE-DIMENSIONAL WIRE WITH A PERIODIC IMPURITY POTENTIAL

The goal of this section is to adapt the simple renormalization group procedure initiated in Refs. 32 and 41 to the case of a periodic potential. The main idea developed in these works is to dress the bare scattering amplitude by a correction due to the interaction of an incoming electron with the Friedel density oscillation induced by the impurity. This approach treats the electron-electron interaction as the perturbation. Because the continuous spectrum of particle-hole excitations in the metallic wire exhibits a finite density of states down to arbitrary low energy, the first order correction to the scattering amplitude diverges as $\ln(|k-k_F|d)$, where k is the incoming electron's wave vector, and d is the spacial range of the bare impurity potential. This type of infrared divergence is very similar to those encountered in the Kondo problem, and Yue *et al.* proposed to treat them with a renormalization group method inspired by Anderson's "poor man's scaling" approach.⁴⁵ The idea is to integrate out gradually single particle-hole excitations which participate in the Friedel oscillation, starting from those furthest from the Fermi level. As the electron bandwidth D is continuously reduced, the bare impurity potential is renormalized so that the low energy physical properties of the system are kept unchanged. The renormalization procedure stops at a low energy scale with is the larger scale among the thermal broadening $k_B T$, the bias voltage eV , or the incoming electron energy $\hbar|k-k_F|v_F$.

As already stated in the Introduction, the presence of an array of scattering centers (such as nodes in a wire network) brings qualitatively new features. In the low energy regime, Friedel oscillations originating from different centers are expected to interfere, so we cannot follow the renormalization flow obtained in Refs. 32 and 41 for a single scatterer down to arbitrary low energies. Furthermore, commensuration effects between the average electronic density and the superlattice structure play a crucial role. By contrast to the single

impurity case, we expect an insulating ground-state only for an integer average filling of each supercell. For incommensurate filling factors, we expect a crossover from the one-dimensional behavior following Kane and Fisher's predictions at high energy, towards a strongly renormalized coherent conductor at low energy with finite conductance. The formation of these conducting states in a regular array is analogous to transmission resonances of a single wire in the presence of a finite number of impurities.⁴⁰ Whereas the resonant energies form a discrete set in the latter case, they accumulate along finite energy intervals (the Bloch energy bands) for an infinite regular array of impurities.

In a periodic system, the natural way to implement this "poor man's scaling" approach is to integrate out energy bands one after the other, starting from those most remote from the Fermi level. In the incommensurate case, the last band, which crosses the Fermi level is partially filled, so it is natural to stop the procedure after the last fully occupied band has been integrated out. In any renormalization method, we have to decide which low-energy quantities will be required to remain constant as high energy modes are eliminated. In the presence of a periodic potential, it is natural to prescribe that single quasiparticle energies should not change under the renormalization group flow (RGF).

A. Band structure for a periodic array of point scatterers

Let us first consider a noninteracting problem along an infinite one-dimensional wire with a periodic potential. The corresponding Hamiltonian is

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{n=0}^{N-1} V(x-na), \quad (1)$$

where a denotes the spacial period of the potential, namely the distance between two successive impurities. $V(x)$ is a localized potential, so for instance we impose that $V(x)=0$ when $|x|$ is larger than a range d , $d \ll a$. The effect of each scatterer is described by a scattering matrix \hat{S} . Suppose first we have only one of them, centered at the origin $x=0$. Let us consider scattering states with the energy $E_0(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$, k being positive. Away from the impurity, that is for $|x| > d$, we may represent the corresponding wave function as a superposition of plane-waves, see Fig. 1:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{for } x < -d \\ A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} & \text{for } x > d. \end{cases} \quad (2)$$

Since Schrödinger's equation is linear and of second order, we may express the outgoing amplitudes A' and B' linearly as a function of the incoming ones A and B'

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t & r' \\ r & t' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B' \end{pmatrix} \equiv \hat{S} \begin{pmatrix} A \\ B' \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where $\{r, t, r', t'\}$ are two pairs of reflection and transmission coefficients for left and right sides of the node. In principle, these four coefficients do depend on the energy of the particle or equivalently on its wave vector k . In this paper, we shall neglect this variation, since the dominant contribution

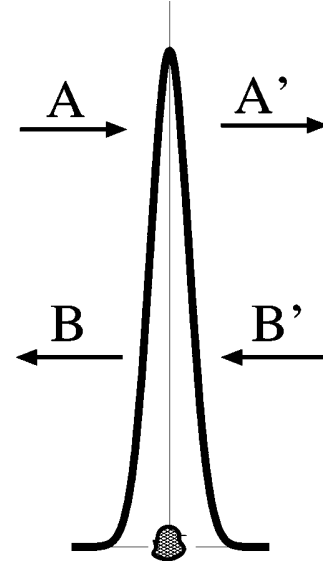


FIG. 1. Localized impurity potential may be represented by an \hat{S} matrix that connects amplitudes of incoming (A, B') and outgoing (A', B) plane waves outside the impurity.

processes involve virtual excitation of particle-hole pairs in the vicinity of the Fermi level. A more complete approach would consider the Taylor expansion of \hat{S} in powers of $k - k_F$, but all terms beyond the 0th order one are irrelevant according to the classification of perturbations around a noninteracting one-dimensional fermion system. At least for not too large interactions, they are not supposed to change the qualitative picture of the system behavior. As usual, this \hat{S} matrix is unitary. Assuming time reversal invariance of the Hamiltonian implies $t=t'$ and if $V(x)$ is an even function of x , we have also $r=r'$. In this case, we may parametrize \hat{S} by two angles ($0 \leq \phi \leq \pi/2$, $0 \leq \psi < 2\pi$)

$$\hat{S} = e^{i\psi} \begin{pmatrix} \cos \phi & \pm i \sin \phi \\ \pm i \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (4)$$

For a periodic array of identical scatterers, eigenstates may be obtained as Bloch functions, namely we may impose the condition

$$\psi(x+a) = e^{ik'a} \psi(x),$$

where k' is chosen in the first Brillouin zone $[-\pi/a, \pi/a]$. On each x interval $[na+d, (n+1)a-d]$, we write the eigenstate with energy $E_0(k)$ as

$$\psi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}.$$

The above periodicity condition implies

$$A_n = e^{i(k'-k)an} A_0,$$

$$B_n = e^{i(k'+k)an} B_0.$$

Equation (3) can now be written for each impurity site, which gives

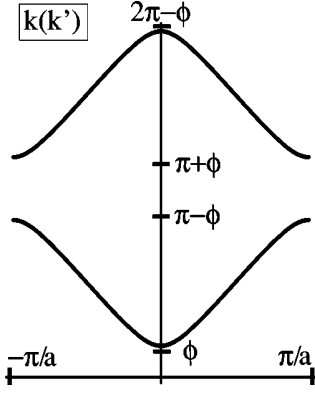


FIG. 2. Band structure for 1D wire of noninteracting electrons with periodic impurities. BS is 2π periodic in k . A set of gaps $(-\phi+2\pi n, \phi+2\pi n)$ and $(\pi-\phi+2\pi n, \pi+\phi+2\pi n)$ is present for any value of the \hat{S} matrix.

$$\begin{pmatrix} A_{n+1}e^{ika(n+1)} \\ B_{n+1}e^{-ika(n+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t & r' \\ r & t' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n e^{ika(n+1)} \\ B_{n+1} e^{-ika(n+1)} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Replacing A_n and B_n by their expressions in terms of A_0 and B_0 , we get the following secular equation:

$$\begin{vmatrix} te^{i(k-k')a} - 1 & r' \\ re^{i2ka} & t' e^{i(k+k')a} - 1 \end{vmatrix} = 0 \quad (6)$$

which determines the dispersion relation implicitly via k , the energy being $E_0(k)$, the lattice momentum k' behaving as an external parameter. Using a normalization condition on the wave function, we could get (A_0, B_0) as functions of (k', \hat{S}) .

In the particular case of spacially even and time-reversal invariant potentials, we may use the above parametrization for \hat{S} in Eq. (6), which yields

$$\cos(ka + \psi) = \cos \phi \cos(k'a). \quad (7)$$

For a given value of the lattice momentum k' , the possible values of ka appear in two equally spaced families, with a period 2π for each of them. The allowed values of $ka + \psi$ belong to the intervals $[-\pi + \phi + 2\pi n, -\phi + 2\pi n]$ and $[\phi + 2\pi n, \pi - \phi + 2\pi n]$, where n is an integer. We recall that k should be *positive*, in order not to count each eigenstate twice. The values of $ka + \psi$ lying in intervals $[-\phi + 2\pi n, \phi + 2\pi n]$, and $[\pi - \phi + 2\pi n, \pi + \phi + 2\pi n]$ correspond then to energy gaps. These gaps are of course larger when the reflexion coefficient is larger, see Fig. 2.

For a noninteracting electron system, the Fermi sea contains an integer number n of filled bands whenever the average electronic density corresponds exactly to n electrons per unit cell. For generic filling factors, the Fermi level crosses a partially filled band for a lattice momentum k'_F . The corresponding Fermi group velocity is then

$$v_F^{*(0)} = v_F \frac{dk}{dk'}(k'_F) = v_F \frac{\cos \phi |\sin(k'_F a)|}{\sqrt{1 - \cos^2 \phi \cos^2(k'_F a)}}, \quad (8)$$

where $v_F = \hbar k'_F / m$ is the Fermi velocity of a uniform noninteracting gas with the same density.

B. Switching on electron-electron interactions

In a Luttinger liquid, the effective interaction becomes non-local in the low-energy limit. To show this, it is convenient to decompose the electron creation operators $\Psi_\sigma^+(x)$ (where $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ denotes the spin component along a fixed direction) into a right moving part $\Psi_{R\sigma}^+(x)$ and a left-moving part $\Psi_{L\sigma}^+(x)$, where $\Psi_{R\sigma}^+$ ($\Psi_{L\sigma}^+$) involves the Fourier modes k close to k_F ($-k_F$). With this decomposition, the local electron density $\rho(x)$ is written as follows:

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \Psi_\sigma^+(x) \Psi_\sigma(x) \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} [\Psi_{R\sigma}^+(x) \Psi_{R\sigma}(x) + \Psi_{L\sigma}^+(x) \Psi_{L\sigma}(x)] \\ &+ \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} [\Psi_{R\sigma}^+(x) \Psi_{L\sigma}(x) + \Psi_{L\sigma}^+(x) \Psi_{R\sigma}(x)]. \end{aligned} \quad (9)$$

The first two terms are smooth fields, meaning that their Fourier transforms involve only small wave vectors compared to k_F . But the last two terms are centered around the wave vectors $\pm 2k_F$ so they are rapidly oscillating. For a spin-rotation invariant Hamiltonian, the effective low energy description of a Luttinger liquid involves three independent parameters: the velocities v_c and v_s of collective charge and spin excitations, and a dimensionless constant K which depends on the strength of electron-electron interactions and controls the exponents entering the correlation functions. Since transport properties are mostly affected by the value of K ,³⁹ we shall not consider here the renormalizations of v_c and v_s away from their common value v_F for a noninteracting system. Therefore, it is sufficient to consider the following interaction:

$$H_{\text{int}} = \frac{U_0}{2} \int_{-L/2}^{L/2} dx \rho_0(x)^2, \quad (10)$$

where $\rho_0(x)$ is the long wavelength part of the total density:

$$\rho_0(x) = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} [\Psi_{R\sigma}^+(x) \Psi_{R\sigma}(x) + \Psi_{L\sigma}^+(x) \Psi_{L\sigma}(x)].$$

Here L denotes the total length of the system. Later, we shall assume periodic boundary conditions, and that L encloses an integer number N of periodic cells, so $L = Na$. With this choice of interaction, we have

$$v_c = v_F \left(1 + \frac{2U_0}{\pi \hbar v_F} \right)^{1/2},$$

$$v_s = v_F,$$

$$K = \left(1 + \frac{2U_0}{\pi \hbar v_F} \right)^{-1/2}.$$

So $K=1$ for a noninteracting system, $K>1$ for attractive interactions, and $K<1$ for repulsive interactions. For our purpose, it is convenient to view this effective interaction as deriving from a *nonlocal* potential $U(x-y)$ such that its Fourier transform $\tilde{U}(k)$ vanishes outside a finite window cen-

tered around $k=0$ and whose width is smaller than $2k_F$. The interaction strength U_0 is defined as $\tilde{U}(k=0)$. With this notation, we have

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy \rho_0(x) U(x-y) \rho_0(y). \quad (11)$$

In this section, we are considering the combined effect of impurity scattering and interactions. Renormalizations of the effective scattering matrix \tilde{S} are naturally detected via the electron self-energy $\Sigma(k, k', \omega)$. But since our system exhibits only a discrete translation symmetry, we may only conclude that $k' - k$ should be an integer multiple of the basic reciprocal lattice vector $2\pi/a$. This self-energy is then a relatively complicated object. More information on its real-space structure for a single impurity may be found in Refs. 42 and 43. To analyze it in a simple way we shall compute the first order correction $E_1(k)$ with respect to U_0 to the single electron energy $E_0(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Here k stands for a single particle level, close to the Fermi energy, and labelled by the combination of a Bloch quasi-momentum k' and a band index. This correction $E_1(k)$ is given by the sum of a Hartree term and of an exchange term. In the case of an unpolarized electron system, we have

$$E_1(k) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy \sum_{q < k_F} \psi_k^*(x) \psi_q^*(y) U(x-y) \times [2\psi_q(y) \psi_k(x) - \psi_q(x) \psi_k(y)]. \quad (12)$$

For local potentials, the Hartree and the exchange contributions cancel each other, when the spins of the two electrons involved are parallel. But as we have recalled before, our two-body effective potential is in fact nonlocal, so we have to analyze both terms in more detail. Our expression for $E_1(k)$ involves integrals of the form:

$$I_U(f, g) = \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy f^*(x) U(x-y) g(y)$$

where $f(x)$ and $g(y)$ are Bloch functions satisfying

$$\frac{f(x+a)}{f(x)} = \frac{g(y+a)}{g(y)} = e^{i\theta}, \quad 0 < \theta \leq 2\pi.$$

Since U is short-ranged in space (though it is *not* a delta function), we may take safely the thermodynamic limit $L \rightarrow \infty$. Writing $f(x) = \sum_n \tilde{f}_n e^{i(2\pi n + \theta)x/a}$ and an analogous series for $g(y)$, we obtain

$$I_U(f, g) = L \sum_n \tilde{f}_n^* \tilde{U} \left(\frac{2\pi n + \theta}{a} \right) \tilde{g}_n \approx LU_0 \sum_{|n| \leq k_F a} \tilde{f}_n^* \tilde{g}_n. \quad (13)$$

Let us first consider the Hartree term. Because we chose single particle eigenstates of the Bloch form, the corresponding local particle density is periodic with period a . A little elementary algebra shows that

$$|\psi_k(x)|^2 = \frac{1}{Na} \frac{\sin(ka + \psi) \pm \sin(\phi) \cos \left[2k \left(x - \frac{a}{2} \right) \right]}{\sin(ka + \psi) \pm \sin(\phi) \sin(ka)/(ka)} \quad (14)$$

for $0 < x < a$. As expected, the amplitude of the local density oscillation is stronger when the bare reflexion coefficient is larger, or equivalently when $|\sin(\phi)|$ is larger. The n th Fourier amplitude of this local density is equal (for $n \neq 0$) to:

$$\frac{\mathcal{A}_k}{2Na} \left(\frac{\sin(ka - \pi n)}{ka - \pi n} + \frac{\sin(ka + \pi n)}{ka + \pi n} \right),$$

where the numerical coefficient \mathcal{A}_k is close to unity. As shown in Eq. (13) above, we are interested in the case where $|n| \ll k_F a$, and since k is close to k_F , this amplitude is small by a factor $1/(k_F a)$. A similar conclusion holds for the Fourier amplitudes of $|\Psi_q(x)|^2$ if we assume that the most important effects come from filled states where q is close to k_F . Therefore, we do not expect strong renormalizations coming from the Hartree term.

Let us now turn to the exchange term. The product $\Psi_q^*(y) \Psi_k(y)$ is the sum of four oscillating terms proportional to $e^{\pm i(k-q)y}$ and $e^{\pm i(k+q)y}$. The last two terms are fast oscillations which will be filtered out by the nonlocal potential, as in Eq. (13). Keeping only the first two oscillations, we can cast the exchange contribution to $E_1(k)$ as follows:

$$E_1(k) = c \frac{U_0}{a} (k'_F + N_F \pi) - \frac{U_0}{2\pi a} \sin^2 \phi \int \frac{dq'}{\sin(k + \psi) \sin[q(q') + \psi]} \times \frac{\sin[q(q') - k]}{q(q') - k}. \quad (15)$$

In this equation, we have replaced combinations such as ka , qa , by new dimensionless variables k , q . The integral symbol stands for a summation over all the N_F completely filled bands, including possibly a last partially filled band with a dimensionless momentum k'_F such that $0 \leq k'_F < \pi$. For each completely filled band, the integration variable q' runs from 0 to π , and q in Eq. (15) is a function of the lattice momentum q' solution of the dispersion relation (7). For the last partially filled band (incommensurate case), the q' integral runs from 0 to k'_F . As already mentioned, we have assumed that parameters (ψ, ϕ) are not depending on the incoming energy. Note that contributions from the Hartree term will modify only the numerical coefficient c whose precise value is not important here.

C. Renormalization approach

Let us introduce the notation $\Lambda_0 = \pi N_F$, which plays the role of a large momentum cut-off. As in all schemes inspired by Anderson's "poor man's scaling," we shall assume it is possible to construct a sequence of models where filled bands are eliminated one after the other, starting from the most remote from the Fermi level. When the first n bands

have been eliminated, the new value of Λ is set equal to $\Lambda_0 - \pi n$. At each step, we require that the quasiparticle energy [$E_{\text{tot}}(k) = E_0(k) + E_1(k) \equiv E_0(k) + U_0 \mathcal{E}_1(k)$] for k close to the Fermi wave vector should remain unchanged. To compensate for the reduction of the cut-off from Λ_0 to Λ , we have to adjust \hat{S} -matrix parameters $\{\psi, \phi\}$ so they become functions of running cutoff Λ . This is expressed by the following prescription:

$$E_{\text{tot}}(\psi_0, \phi_0, k) = E_0(\psi(\Lambda), \phi(\Lambda), k) + U_0 \mathcal{E}_1(\psi(\Lambda), \phi(\Lambda), k, \Lambda). \quad (16)$$

Since for $U_0=0$, this condition implies $E_0(\psi_0, \phi_0, k) = E_0(\psi(\Lambda), \phi(\Lambda), k)$, we see that in this case $(\psi_0, \phi_0) = (\psi(\Lambda), \phi(\Lambda))$ for any Λ , so we may write the following Taylor series:

$$\psi(\Lambda, U_0, \psi_0, \phi_0, \Lambda_0) \equiv \psi_0 + U_0 \bar{\psi}(\Lambda, \psi_0, \phi_0, \Lambda_0) + O(U_0^2),$$

$$\phi(\Lambda, U_0, \psi_0, \phi_0, \Lambda_0) \equiv \phi_0 + U_0 \bar{\phi}(\Lambda, \psi_0, \phi_0, \Lambda_0) + O(U_0^2).$$

We now try to keep band structure (16) unchanged for any k

$$\begin{aligned} E_0(\psi_0, \phi_0, k) + U_0 \mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda_0) \\ = E_0(\psi_0 + U_0 \bar{\psi}(\Lambda), \phi_0 + U_0 \bar{\phi}(\Lambda), k) \\ + U_0 \mathcal{E}_1(\psi_0 + U_0 \bar{\psi}(\Lambda), \phi_0 + U_0 \bar{\phi}(\Lambda), k, \Lambda). \end{aligned}$$

Keeping the first order terms in U_0 gives

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial E_0}{\partial \psi} \right|_{\psi_0} \bar{\psi}(\Lambda) + \left. \frac{\partial E_0}{\partial \phi} \right|_{\phi_0} \bar{\phi}(\Lambda) = \mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda_0) \\ - \mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda). \end{aligned} \quad (17)$$

This is a nontrivial constraint, since $\partial E_0 / \partial \psi|_{\psi_0}$ and $\partial E_0 / \partial \phi|_{\phi_0}$ depend on k but do not depend on Λ . On the contrary, $\bar{\psi}$ and $\bar{\phi}$ depend on Λ but not on k . The possibility to enforce this requirement is not obvious *a priori*, and when it occurs, we may call our model *renormalizable* (at least to this lowest order).

Let us now evaluate the right-hand side of this equation. Suppose we integrate out just one band, then $\Lambda_0 - \Lambda = \pi$, which is assumed to be much smaller than Λ . While computing $\mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda_0) - \mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda)$ in Eq. (15), the integral involves only one band far from the Fermi level. Therefore, we may further approximate $q(q') - k$ by $-\Lambda$. This yields

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda_0) - \mathcal{E}_1(\psi_0, \phi_0, k, \Lambda) \simeq \frac{c(\Lambda_0 - \Lambda)}{a} \\ + \frac{1}{\Lambda} \frac{1}{2\pi a} \frac{\sin^2 \phi_0}{\sin(k + \psi_0)} \int_0^\pi dq' \frac{\sin[q(q') - k]}{\sin[q(q') + \psi_0]}. \end{aligned} \quad (18)$$

From (7) the derivatives involved in the left-hand side of Eq. (17) are

$$\left. \frac{\partial E_0}{\partial \psi} \right|_{\psi, k = \text{const}} \simeq -\frac{\hbar v_F}{a},$$

$$\left. \frac{\partial E_0}{\partial \phi} \right|_{\psi, k = \text{const}} \simeq \frac{\hbar v_F}{a} \tan \phi \cot(k + \psi).$$

We have linearized the bare dispersion relation: $E_0(k) = \hbar^2 k^2 / (2ma^2) \approx \text{const} + (\hbar v_F / a)k$. The notation “ $k = \text{const}$ ” means more precisely that the Bloch crystal momentum k' and the band index have to be maintained constant while varying ϕ or ψ . Introducing these expressions for the derivatives and the result (18) in Eq. (17) shows that indeed the k dependencies on both sides can be made to match, which expresses the renormalizability of our model to first order in interaction strength. This fixes the form of the functions $\bar{\psi}(\Lambda)$ and $\bar{\phi}(\Lambda)$:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(\Lambda, \psi_0, \Lambda_0) = \frac{1}{\hbar v_F} \left(c(\Lambda - \Lambda_0) \right. \\ \left. - \frac{\sin^2 \phi_0}{2\pi} \ln \frac{\Lambda}{\Lambda_0} \int_0^\pi dq' \cot[q(q') + \phi_0 + \psi_0] \right), \end{aligned}$$

$$\bar{\phi}(\Lambda, \phi_0, \Lambda_0) = -\frac{1}{4\pi\hbar v_F} \sin(2\phi_0) \ln \frac{\Lambda}{\Lambda_0}.$$

Finally we construct the RGF equation:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \Lambda} = \frac{U_0}{\pi\hbar v_F} \left(c + \frac{\sin^2 \phi}{2\pi} \frac{1}{\Lambda} \int_0^\pi dq' \cot[q(q') + \psi] \right), \quad (19)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \ln \Lambda} = -\frac{U_0}{4\pi\hbar v_F} \sin 2\phi. \quad (20)$$

We see from Eq. (4) that the parameter ψ is a global phase in the scattering matrix, which does not affect any physical property of the system besides an overall shift of the single particle spectrum. In particular, it does not generate any density oscillation. Moreover the associated RGF equation explicitly involves the running cut-off Λ , and the notion of fixed point loses its meaning here.

Therefore, we now turn to $\phi(\Lambda)$, for which a simple RGF equation arises, and which solution is given by

$$\tan \phi = (\Lambda_0 / \Lambda)^\alpha \tan \phi_0, \quad (21)$$

where $\alpha = U_0 / (2\pi\hbar v_F)$. The corresponding transmission coefficient $T(\Lambda)$ on a given impurity is

$$T(\Lambda) = \cos^2[\phi(\Lambda)] = \frac{T_0(\Lambda/\Lambda_0)^{2\alpha}}{R_0 + T_0(\Lambda/\Lambda_0)^{2\alpha}}, \quad (22)$$

where T_0 is the transmission coefficient for a single impurity in absence of interaction, and $R_0 = 1 - T_0$. This result agrees with the expression obtained for a single impurity⁴¹ in the absence of spin backscattering, namely when $\bar{U}(2k_F) = 0$. Again, this approach assumes small electron-electron interactions. In the case of strong interactions, where K is no longer close to 1, the bosonization method shows that for the single impurity problem, α should be replaced by $(1 - K)/2$.⁴⁰ These two expressions for the exponent coincide at small U_0 if terms of order U_0^2 or higher are neglected.

For a commensurate system ($k_F a = \pi n$, n integer), the non-interacting ground-state is already gapped, so we expect a true insulator as well in the presence of repulsive interactions. The difference between a traditional band insulator and the one obtained here in the presence of interactions is the nontrivial energy dependence of the impurity scattering matrix and the corresponding behavior of the Landauer conductance, Eq. (22). For an incommensurate system, we have a partially filled band crossing the Fermi level in the absence of interaction. Since our renormalization procedure assumed a gradual elimination of fully occupied bands, it has to break down after the last of those bands has been integrated out. Treating the remaining partially occupied band in a heuristic way, we simply assume that it corresponds to a strongly renormalized Luttinger liquid, whose effective Fermi velocity v_F^* is much reduced compared to the Fermi velocity $v_F = \hbar k_F / m$ of a uniform noninteracting gas with the same density. More precisely, we have, according to Eq. (8):

$$v_F^* \approx v_F \cos \phi_S \sin(k'_F a),$$

where $\phi_S \approx \pi/2$ is the value of ϕ when the renormalization procedure stops, which corresponds to

$$\frac{\Lambda_0}{\Lambda} = \frac{k_F a}{\pi}.$$

Note that the denominator in Eq. (8) is then very close to unity. Using Eq. (21), we get

$$v_F^* = v_F \left(\frac{\pi}{k_F a} \right)^\alpha \cot \phi_0 \sin(k'_F a). \quad (23)$$

III. GENERALIZATION OF RG PROCEDURE TO A LARGE CLASS OF LATTICES

In the previous section we introduced the main ideas we used to obtain the RGF equation for a 1D lattice. We wish now to show that renormalizability of this particular 1D system is not a simple coincidence, but a general property of any network (not necessarily periodic), provided the two following assumptions hold, namely all the links have the same length, which has to be large compared to the Fermi wavelength. Let us begin to follow the same procedure as in one dimension. Suppose that we have a network of equal length wires. Any junction point is described by an unitary \hat{S} matrix which dimension is equal to the number of wires joining at this node. For each link, stationary single electron states can be written as the sum of two plane waves,

$$\psi(x) = A_{ij} e^{-ikx} + A_{ji} e^{ikx}, \quad (24)$$

where A_{ij} is the amplitude of the wave that propagates from node j to node i , if the x coordinate is oriented from i to j . Solving Schrödinger's equation is equivalent to connect these various amplitudes via node scattering matrices

$$A_{ij} = \sum_m^{(j)} e^{ika} S_{im}^{(j)} A_{jm}. \quad (25)$$

Here $\sum_m^{(j)}$ means that we sum over first neighbors m of node j . We notice that this has indeed the form of an eigenvalue

equation written in some basis. Following the idea of Kottos and Smilansky⁴⁶ we introduce a finite dimensional Hilbert space associated to the lattice links. Each link ij is represented by two orthonormal vectors $|ij\rangle$ and $|ji\rangle$. The dimension of this auxiliary Hilbert space is therefore $2N_L$ (N_L is the total number of links). One may rewrite Eq. (25) in its vector form

$$\hat{T}|A(k)\rangle = e^{-ika}|A(k)\rangle, \quad (26)$$

where the \hat{T} operator incorporates information about the scattering matrices of all nodes,

$$\hat{T} = \sum_j \sum_{i,m}^{(j)} |ij\rangle S_{im}^{(j)} \langle jm| \Leftrightarrow S_{im}^{(j)} = \langle ij|\hat{T}|jm\rangle. \quad (27)$$

As this operator \hat{T} is unitary and defined in a finite dimensional Hilbert space, it could be diagonalized as $\hat{T}|\alpha\rangle = e^{-i\theta_\alpha}|\alpha\rangle$, where α takes $2N_L$ values and θ_α is real. So we obtain families of eigenvalues for the single electron energy $E = \hbar^2 k^2 / 2m$,

$$ak_{\alpha,n} = \theta_\alpha + 2\pi n \geq 0. \quad (28)$$

We emphasize that this periodic structure of the single particle spectrum is a special feature of constant link length networks. A brief discussion of the more general case is given in Appendix C. Because of this periodicity, and despite the absence of any translational symmetry, we may still introduce a notion of energy band for such lattices. More precisely, in this setting, an energy band corresponds to fixing n and allowing for all possible values of θ . Note that this notion of band does not exactly coincide with the more familiar notion from the Bloch theory of translational invariant lattices. For simple Bravais lattices, the number of states in each Bloch band is the number of unit cells which is equal to the number of sites N_S . If Z is the coordination number, we have $ZN_S = 2N_L$, so our generalized bands contain Z usual Bloch bands for a Bravais lattice. At this stage, we have so far a band structure equation written in operator form. In order to obtain renormalization flow for the \hat{S} -matrix we need to compute first the electron-electron contribution as in Eq. (12) to the single electron energy and then the variation in the unperturbed energy due to an arbitrary \hat{S} -matrix change $\partial E_0 / \partial \hat{S}$.

As in one dimension, the main contribution to the electronic self-energy is given by the exchange term. Let us consider a pair of single particle eigenstates labelled by k and q , where these labels should in fact be viewed as pairs (α, n) and (β, m) , m and n being integers according to the above description of the spectrum. State k is close to the Fermi level, but state q is far from it, at a distance corresponding to the current energy cut-off Λ . Along a link ij , we denote by $[\Psi_k^*(x)\Psi_q(x)]_0$ the slowly varying component of $\Psi_k^*(x)\Psi_q(x)$. A simple computation shows that:

$$\frac{1}{L} \int_i^j \left[|\Psi_k^*(x) \Psi_q(x)|_0 \right]^2 = |A_{ij}(k)|^2 |A_{ij}(q)|^2 + |A_{ji}(k)|^2 |A_{ji}(q)|^2 + [A_{ji}^*(k) A_{ij}(k) A_{ij}(q) A_{ji}^*(q) + \text{H.c.}] \frac{\sin(k-q)L}{(k-q)L}. \quad (29)$$

The first part summed over fully completed band does not depend on energy:

$$\begin{aligned} & \sum_{q \in \text{Band}} \sum_{i,j} |A_{ij}(k)|^2 |A_{ij}(q)|^2 + |A_{ji}(k)|^2 |A_{ji}(q)|^2 \\ &= \sum_{q \in \text{Band}} \sum_{\langle ij \rangle} |A_{ij}(k)|^2 |A_{ij}(q)|^2 = \sum_{\langle ij \rangle} \langle ij|k \rangle \langle k|ij \rangle \langle ij| \sum_{q \in \text{Band}} |q \rangle \\ & \times \langle q|ij \rangle = \sum_{\langle ij \rangle} \langle k|ij \rangle \langle ij|k \rangle = \langle k|k \rangle = 1. \end{aligned} \quad (30)$$

We used the fact that both $|q\rangle$ and $|ij\rangle$ form complete basis sets in our Hilbert space. The main expression to compute is then

$$I(k) = \sum_{q \in \text{Band}} \sum_{\langle jm \rangle} A_{jm}^*(k) A_{mj}(k) A_{jm}(q) A_{mj}^*(q) \sin(k-q)a, \quad (31)$$

where the sum over q is just a single band sum, namely m is fixed, and the sum is taken over the $2N_L$ values of β . The power of this algebraic formalism is that such sum is readily performed, without having to compute any integral. Indeed, we have

$$I(k) = \sum_q \sum_{\langle ij \rangle} \langle k|ij \rangle \langle ij|q \rangle \sin[(k-q)a] \langle q|ji \rangle \langle ji|k \rangle. \quad (32)$$

As shown in Appendix C, we may assume that the eigenvectors $|q\rangle$ are normalized to unity in the auxiliary Hilbert space attached to link amplitudes, provided the links have the same length, much larger than the Fermi wavelength. Therefore, we have the very useful completeness relation, that is

$$\sum_q |q\rangle e^{-iqa} \langle q| = \hat{T}. \quad (33)$$

After some simple algebra, we may cast $I(k)$ into the form

$$I(k) = e^{ika} \frac{i}{\alpha} \langle k| \sum_j \sum_{l,m} \langle j|l_j \rangle V_{lm}^{(j)} \langle jm|k \rangle = e^{ika} \frac{i}{\alpha} \langle k|\hat{\mathbf{V}}|k \rangle, \quad (34)$$

where the single node operators $\hat{\mathbf{V}}^{(j)}$ are defined by

$$\hat{\mathbf{V}}^{(j)} = \hat{F}^{(j)} - \hat{S}^{(j)} \hat{F}^{(j)\dagger} \hat{S}^{(j)}$$

and the diagonal matrix $\hat{F}^{(j)}$ by

$$F_{ii}^{(j)} = -\frac{1}{2} \alpha S_{ii}^{(j)}.$$

We have introduced as before the dimensionless parameter $\alpha = U_0 / (2\pi\hbar v_F)$.

To get the first order variation of the single electron energy under small changes in the node scattering matrix parameters we differentiate Eq. (26):

$$(d\hat{T})|k\rangle + \hat{T}|dk\rangle = -i(dk)a e^{-ika}|k\rangle + e^{-ika}|dk\rangle. \quad (35)$$

Applying $\langle k|$ to this equation and using $\langle k|\hat{T} = e^{-ika}\langle k|$ we obtain

$$dk = \frac{i}{a} e^{ika} \frac{\langle k|d\hat{T}|k\rangle}{\langle k|k\rangle}. \quad (36)$$

This allows us to calculate single electron energy variations due to \hat{S} -matrix changes. In the particular case of global phase transformation, the corresponding infinitesimal form reads: $d\hat{T} = i\hat{T}d\psi$. Clearly, the energy differential does not depend on energy any more since $dk = -d\psi/a$, so global phase shifts simply induce a global translation on the energy spectrum.

Following the same ideas as in 1D, we generalize the RGF equation to any \hat{S} -matrix parametrization. Equation (17) now becomes

$$\frac{\partial E_0}{\partial S}(\hat{S}_0, k) dS(\Lambda) = E_1(\hat{S}_0, k, \Lambda_0) - E_1(\hat{S}_0, k, \Lambda). \quad (37)$$

The left-hand side of this equation is equal to $\hbar v_F dk$, where dk is related to the small renormalization of \hat{T} by Eq. (36). To evaluate right-hand side, as before, we integrate just over one band of width 2π for the quantity $q_{\beta, m} a$, i.e. $d\Lambda = \Lambda - \Lambda_0 = -2\pi$,

$$\begin{aligned} \hbar v_F dk &= E_1(\hat{S}_0, k, \Lambda_0) - E_1(\hat{S}_0, k, \Lambda) = \frac{c U_0 (\Lambda_0 - \Lambda)}{a} \\ &- \frac{U_0}{a} \sum_{\Lambda < qa < \Lambda_0} \sum_{\langle jm \rangle} A_{jm}^*(k) A_{mj}(k) A_{jm}(q) A_{mj}^*(q) \\ &\times \frac{\sin(k-q)a}{(k-q)a} = -\frac{c U_0 d\Lambda}{a} - \frac{U_0}{a} \frac{1}{\Lambda} \left(-\frac{d\Lambda}{2\pi} \right) I(k). \end{aligned}$$

Constant c includes both the Hartree term and the part of exchange term that does not depend on k , so we do not precise its value since it renormalizes only the global phase of the \hat{S} -matrix.

Finally, we get the result $d\hat{T}/dl = -\hat{\mathbf{V}}$ that agrees completely with Lal, Rao, and Sen,³² obtained for a single node connecting an arbitrary number of semi-infinite 1D wires. In coordinate way of writing, it gives

$$\frac{d\hat{S}^{(j)}}{dl} = \hat{S}^{(j)} \hat{F}^{(j)\dagger} \hat{S}^{(j)} - \hat{F}^{(j)}, \quad (38)$$

where we just chose the usual cutoff parametrization: $\Lambda = \Lambda_0 e^{-l}$.

IV. TWO-DIMENSIONAL SQUARE LATTICE

We would like to illustrate the result of the previous section on one more example. This part could be interesting from an experimental viewpoint, since present nanofabrication techniques are now available to prepare networks of quantum wires with a very small number of transverse con-

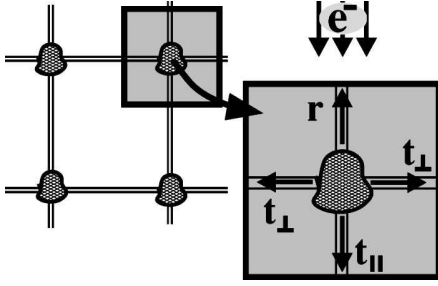


FIG. 3. Two-dimensional periodic grid of electron liquids with impurities. Each impurity could be represented by 3 complex parameters: r , reflection; t_{\parallel} , forward transmission; t_{\perp} , perpendicular transmission coefficients.

duction channels etched on a two-dimensional electron gas with high mobility, as illustrated for instance in Ref. 14. Let us now consider an infinite regular square lattice of perfect Luttinger wires. These one-dimensional conductors are only coupled at the lattice nodes which are described by a single 4×4 scattering matrix \hat{S} . To keep a simple model, we shall restrict ourselves to the case of a single conduction channel in each wire, although the case of several channels would clearly be of interest, both on the theoretical side, and with respect to possible experimental realizations. As mentioned in the Introduction, we shall not take into account any energy dependence of the scattering matrix, although detailed studies of the Schrödinger equation for a cross of wires with a finite width have exhibited a rich pattern of resonances.^{47,48} The main motivation for this simplified treatment is that in a renormalization group picture, smooth energy dependencies in the scattering matrix as a function of $E - E_F$ correspond to irrelevant operators, which should not alter drastically the way interactions drive the system to its low-energy fixed point. Labeling the four directions joining at a node as in Fig. 3, we shall consider a scattering matrix of the following form:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} r & t_{\parallel} & t_{\perp} & t_{\perp} \\ t_{\parallel} & r & t_{\perp} & t_{\perp} \\ t_{\perp} & t_{\perp} & r & t_{\parallel} \\ t_{\perp} & t_{\perp} & t_{\parallel} & r \end{pmatrix} \quad (39)$$

which corresponds to the most general form obeying time inversion and spacial D_4 dihedral symmetry, in combination with unitarity. The previous expressions involves three complex parameters, but as shown in Appendix A, unitarity leaves only three independent real variables. We have chosen the following parametrization:

$$\begin{aligned} r &= e^{i\psi}(e^{2i\phi_u} + e^{2i\phi_v} - 2)/4, \\ t_{\parallel} &= e^{i\psi}(e^{2i\phi_v} + e^{2i\phi_u} + 2)/4, \\ t_{\perp} &= e^{i\psi}(e^{2i\phi_v} - e^{2i\phi_u})/4, \end{aligned} \quad (40)$$

where $\phi_{u,v} \in [0, \pi[$ and $\psi \in [0, 2\pi[$. Note that two lines in the (ϕ_u, ϕ_v) plane are especially interesting:

$$\phi_u = \pi/2 \Rightarrow t_{\perp} = t_{\parallel} \quad (\text{symmetric case})$$

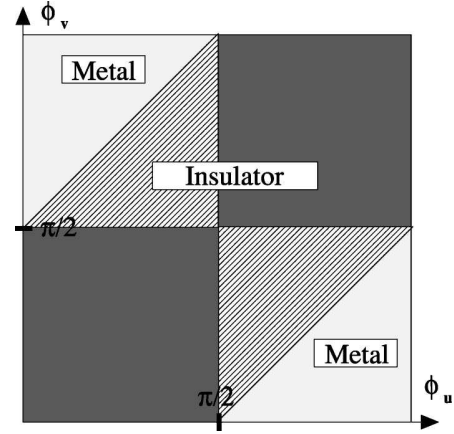


FIG. 4. Phase diagram for a noninteracting electron wire square grid. Contrary to the one-dimensional case, there are metallic states at integer filling factors for some values of the \hat{S} matrix. In these regions of the phase diagram, the single electron spectrum is gapless.

$$\phi_u = \phi_v \Rightarrow t_{\perp} = 0 \quad (\text{1D case}). \quad (41)$$

A. Band structure

The derivation of the band structure is standard, so it is outlined in Appendix B. This band structure is given by an implicit equation:

$$x(k, \mathbf{k}') + y(k, \mathbf{k}') = \beta \equiv \frac{2 \cos \phi_v}{\sin(\phi_u - \phi_v)}, \quad (42)$$

where

$$x(k, \mathbf{k}') \equiv \frac{\sin(ka + \psi)}{\cos \phi_u \cos(k'_x a) - \cos(ka + \psi + \phi_u)}, \quad (43)$$

$$y(k, \mathbf{k}') \equiv \frac{\sin(ka + \psi)}{\cos \phi_u \cos(k'_y a) - \cos(ka + \psi + \phi_u)}. \quad (44)$$

As usual, the energy of these states is given by the free electron dispersion $E_0(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Here, \mathbf{k}' is the two-dimensional lattice wave vector, such that $\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R})\Psi(\mathbf{r})$ for any \mathbf{r} on the wire network and any period \mathbf{R} of the square lattice.

As we found some interesting features in the band structure of noninteracting electrons in a two-dimensional square grid we will describe it more precisely. Contrary to one dimension, there are values of the scattering matrix, for which the single electron spectrum is no longer gapped, and these are located in Fig. 4. More precisely, in the clear regions of Fig. 4, the single particle spectrum is gapless. In the dark regions, it is gapped, leading to an insulator if the electronic density corresponds to filling an *even integer* number of bands. Finally, in the dashed regions, we obtain an insulator for an *odd integer* number of bands.

We still have a 2π periodic structure in ka , but the band-structure consists of two types of foils: normal and abnormal.

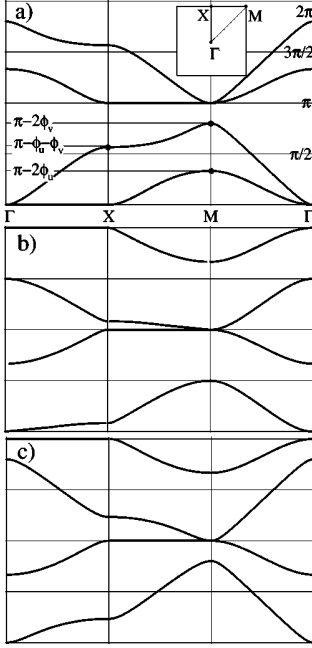


FIG. 5. Three characteristic band structure pictures for different values of the \hat{S} matrix: (a) Insulator, $0 < \phi_u, \phi_v < \pi/2$ (dark in Fig. 4); (b) insulator, $0 < \phi_u < \pi/2, \pi/2 < \phi_v < \pi, |\phi_u - \phi_v| < \pi/2$ (dashed line in Fig. 4); (c) conductor, $0 < \phi_u < \pi/2, \pi/2 < \phi_v < \pi, |\phi_u - \phi_v| > \pi/2$ (clear line in Fig. 4). The band structure is 2π periodic in k , and has four foils: two normal and two abnormal. Some foils are described as “abnormal” because of their strange curvature, revealed here by the flat part of these bands. Given the energy interval $0 < k < \pi$ one could obtain the $\pi < k < 2\pi$ interval by exchanging Γ and M points.

Normal bands resemble an ordinary band of a tight-binding model of square lattice crystal (a sort of deformed paraboloid). Abnormal bands are so called for their strange curvature. To get an idea of their form one could imagine a square rubber foil, attach its four extremities and then put inside a heavy cross. For a complete description, we give sections of the band structure in several directions for three characteristic values of the scattering matrix. Because of some important symmetries, we may restrict the domain of variation of $\{\phi_u, \phi_v\}$, and still get all the possible different physical pictures:

- (1) $k(\phi_u, \phi_v) = k(\phi_v, \phi_u)$,
- (2) $k(\pi - \phi_v, \pi - \phi_u) = -k(\phi_u, \phi_v)$.

These may be easily seen from form II of the dispersion relation, given in Appendix B. Both of them are reflection symmetries. Given the band structure for $k \in [0, \pi]$ and using the following symmetry: $k(k'_x, k'_y) + \pi = k(k'_x + \pi, k'_y + \pi)$, we easily expand it to the full interval $k \in [0, 2\pi]$ by replotting the same band originating from point M instead of Γ (see Fig. 5).

B. RGF equation for a two-dimensional grid

Following the same procedure as in the one-dimensional case, we first calculate Hartree and exchange contributions to

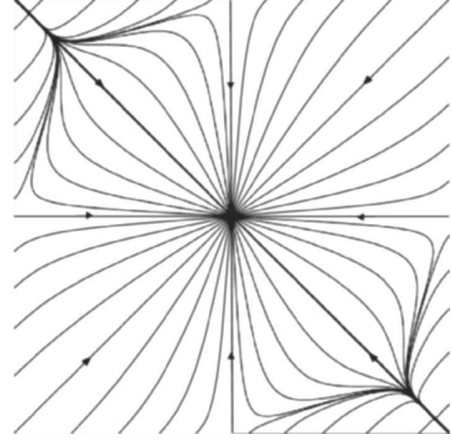


FIG. 6. RGF for the 2D square grid of wire. The only attractor is in the picture center for $\{\phi_u, \phi_v\} = (\pi/2, \pi/2)$.

single electron energy and then establish the equivalent of Eq. (17) or Eq. (37) for two dimensions and finally get the RGF equation. The main difference with the 1D case is that we have now three real parameters for the \hat{S} -matrix and electron-electron interactions should be evaluated along two perpendicular threads that form our grid. The condition to satisfy now reads:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0}{\partial \psi} \bar{\psi}(\Lambda) + \frac{\partial E_0}{\partial \phi_u} \bar{\phi}_u(\Lambda) + \frac{\partial E_0}{\partial \phi_v} \bar{\phi}_v(\Lambda) \\ = \mathcal{E}_1(\hat{S}_0, \mathbf{k}', \Lambda_0) - \mathcal{E}_1(\hat{S}_0, \mathbf{k}', \Lambda). \end{aligned} \quad (45)$$

As was proven in the previous section all networks with links of equal length are renormalizable, i.e., there is a set of functions $\bar{\phi}_u$, $\bar{\phi}_v$, and $\bar{\psi}$ depending only on Λ . Indeed the decomposition of the rhs of Eq. (45) on a basis of three functions depending on \mathbf{k}' is possible. The corresponding renormalization group flow equations are

$$\frac{d\phi_u}{dl} = \frac{\alpha}{8} [\sin 2\phi_v + 3 \sin 2\phi_u + \sin 2(\phi_v - \phi_u)], \quad (46)$$

$$\frac{d\phi_v}{dl} = \frac{\alpha}{8} [\sin 2\phi_u + 3 \sin 2\phi_v + \sin 2(\phi_u - \phi_v)], \quad (47)$$

where $\alpha = U_0 / (2\pi\hbar v_F)$. The only fixed points are $\phi_{u,v} = 0, \pi/2$, among which there is only one attractor for $\{\phi_u, \phi_v\} = \{\pi/2, \pi/2\}$. The global behavior of this flow is illustrated in Fig. 6. These properties of the RGF for a single node connecting four semi-infinite wires have already been described by Lal *et al.*³² and Das *et al.*³⁵ As for the one-dimensional example of Sec. II above, the new feature associated to a regular lattice is the presence of commensurability effects. We have to stop the renormalization procedure when all the completely filled bands have been eliminated. From Fig. 5, we expect to obtain one or two partially filled bands crossing the Fermi level. These bands are only very weakly dispersive, since the effective \hat{S} matrix for the nodes is then very close to its value at the vanishing transmission fixed point. Suppose now that this fixed point is approached from

the dark regions of the phase diagram shown in Fig. 4. If the filling factor corresponds to an *even integer*, the Fermi level lies in a gap of the renormalized band structure. Therefore, we may eliminate the remaining pair of filled bands, and the system is an insulator. Similarly, a true insulator is obtained for an *odd integer* filling factor, in the case where the $(\pi/2, \pi/2)$ fixed point is approached from the dashed regions in Fig. 4. Experimentally, one expects transitions between these commensurate insulators and strongly renormalized “heavy electron” metals at generic filling factors if the electronic density is controlled by a uniform external gate voltage.

Another interesting feature of this geometry is the fact that the flow may induce metal-insulator transitions for some commensurate filling factors at a *finite* energy scale. Indeed, for initial parameters lying in the clear regions of Fig. 4, corresponding to a gapless single electron spectrum, Fig. 6 shows that the system always reaches either the dashed or dark regions in a finite RG time. Experimentally, these RG flows may be visualized by gradually lowering the temperature, since at least qualitatively, the energy scale set by temperature plays the role of the moving cut-off Λ .

V. CONCLUSION

In this paper, we have studied a particular class of networks of Luttinger liquids, with nodes connected by links of a constant length. In the limit of long links, compared to the Fermi wavelength, we studied the evolution of the scattering matrix at the nodes, as the typical energy scale for the occupied states contributing to Friedel oscillations is getting closer to the Fermi level. The corresponding renormalization group flow turns to be identical to the one already found for a single node coupled to several semi-infinite 1D Luttinger liquids.³² This result is physically reasonable, since we have considered the limit of long links. However, we emphasize that these renormalization effects come from quasiparticle scattering on Friedel oscillations induced by the nodes, which are a rather complicated function of the lattice geometry. For instance, even in the limit of very long links, the amplitudes A_{ij} which determine the value of energy eigenfunctions along the links are obtained from a $2N_L \times 2N_L$ eigenvalue problem whose solution has a strongly nonlocal character.

The main difference between a regular lattice and a simple node coupled to infinite wires is that in the former case, we have to stop the renormalization procedure when the last occupied band has been integrated out. So instead of having completely disconnected wires in the low-energy limit, we expect in general a strongly renormalized conducting system with an effective Fermi velocity much reduced in comparison to a noninteracting system with the same density. These effects should be visible as a power-law behavior of the network conductance as a function of temperature. Insulating ground states are expected when the electronic density corresponds to filling some integer numbers of bands.

Of course, this work leaves many open questions. It would be interesting to generalize the present renormalization approach to lattices containing links with several differ-

ent lengths. In such situations, the spectrum no longer exhibits a simple periodic structure, and some signatures of quantum chaos, already manifested in the single particle density of states,⁴⁶ may also appear in the temperature dependence of the conductivity of an interacting system. Another open question is the influence of an external magnetic field, which also drastically modifies the single-particle spectrum. Finally, the limit of strong electron-electron interaction deserves further investigation, and in particular the possibility to develop some new metal-insulator transitions for noninteger but rational filling factors, generalizing the notion of a Wigner crystal. Such insulating states would naturally be pinned by the nodes of the lattice.

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank J. Dufouleur, G. Faini, D. Mailly, C. Naud, and J. Vidal for interesting discussions on various aspects of conducting wire networks.

APPENDIX A: PARAMETRIZATION OF THE \hat{S} MATRIX

In this appendix we will show that time-inversion, spacial D_4 dihedral symmetry combined with unitarity imply a parameterization of scattering matrix in terms of three real variables. For a two-dimensional square lattice, the most general form of the \hat{S} matrix is given by a 4×4 matrix:

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \\ C' \\ D' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_A & t_{BA} & t_{CA} & t_{DA} \\ t_{AB} & r_B & t_{CB} & t_{DB} \\ t_{AC} & t_{BC} & r_C & t_{DC} \\ t_{AD} & t_{BD} & t_{CD} & r_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}, \quad (\text{A1})$$

where A, B, C, D are the coefficients of incoming plane waves. Primed values denote coefficients of outgoing waves. At this stage, one has 16 complex parameters for this \hat{S} -matrix.

Unitarity condition ($\hat{S}^\dagger \hat{S} = I$) combined with time-inversion symmetry ($\hat{S}^{-1} = \hat{S}^*$) gives $\hat{S}' = \hat{S}$ (notice that \hat{S}' is the transposed matrix, not the conjugate). It leaves 10 complex parameters. Using four reflections of two types (1) $A \leftrightarrow B$, and (2) $A \leftrightarrow C, B \leftrightarrow D$ that generate the dihedral symmetry group D_4 consequently reduces this number to three complex variables. We obtain the \hat{S} -matrix in the form (39). Unitarity allows finally to express the scattering matrix with only 3 real parameters:

$$|r|^2 + 2|t_\perp|^2 + |t_\parallel|^2 = 1,$$

$$rt_\perp^* + r^* t_\perp + t_\perp^* t_\parallel + t_\parallel^* t_\perp = 0,$$

$$rt_\parallel^* + r^* t_\parallel + 2|t_\perp|^2 = 0.$$

Subtracting the third equation from the first one allows us to define a first real parameter ψ :

$$|r - t_\parallel| = 1 \Rightarrow r = t_\parallel - e^{i\psi}.$$

There remains two independent equations:

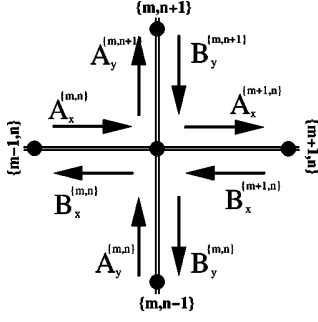


FIG. 7. In the 2D case, each node is indexed by a pair of numbers $\{m, n\}$. Incoming and outgoing plane waves are connected by the 4×4 scattering matrix.

$$2(|t_{\parallel}|^2 + |t_{\perp}|^2) = t_{\parallel} e^{-i\psi} + t_{\parallel}^* e^{i\psi}, \quad (\text{I})$$

$$2(t_{\perp}^* t_{\parallel} + t_{\perp} t_{\parallel}^*) = t_{\perp} e^{-i\psi} + t_{\perp}^* e^{i\psi}, \quad (\text{II})$$

$$2|t_{\parallel} + t_{\perp}|^2 = 2 \operatorname{Re}[(t_{\parallel} + t_{\perp}) e^{-i\psi}], \quad (\text{I} - \text{II})$$

$$2|t_{\parallel} - t_{\perp}|^2 = 2 \operatorname{Re}[(t_{\parallel} - t_{\perp}) e^{-i\psi}]. \quad (\text{I} + \text{II})$$

Two more real parameters are needed to complete the parametrization:

$$t_{\parallel} - t_{\perp} = \cos \phi_u e^{i(\phi_u + \psi)},$$

$$t_{\parallel} + t_{\perp} = \cos \phi_v e^{i(\phi_v + \psi)}.$$

Expressions of transmission and reflection coefficients as functions of these three real parameters are given in the main text, see Eq. (40). We remark on an interesting fact: in the case of perfect transmission ($r=0$), only the separate thread solution ($|t_{\parallel}|=1, t_{\perp}=0$) is possible.

APPENDIX B: BAND STRUCTURE FOR A SQUARE LATTICE OF WIRES

In this appendix we derive the band structure for a square lattice of wires of noninteracting electrons. As in the one-dimensional case, the wave function away from impurities (i.e., nodes here) could be written as combination of plane waves:

$$\psi_k(x) = A_i^{m,n} e^{ikx} + B_i^{m,n} e^{-ikx}, \quad (\text{B1})$$

where $i=\{x, y\}$ and the coefficients $\{A_x^{m,n}, A_y^{m,n}, B_x^{m,n}, B_y^{m,n}\}_{m,n}$ are defined in Fig. 7. By definition of the scattering matrix:

$$\begin{pmatrix} B_x^{m,n} \\ A_x^{m+1,n} \\ A_y^{m,n+1} \\ B_y^{m,n} \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} A_x^{m,n} \\ B_x^{m+1,n} \\ B_y^{m,n+1} \\ A_y^{m,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t_{\parallel} & t_{\perp} & t_{\perp} \\ t_{\parallel} & r & t_{\perp} & t_{\perp} \\ t_{\perp} & t_{\perp} & r & t_{\parallel} \\ t_{\perp} & t_{\perp} & t_{\parallel} & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x^{m,n} \\ B_x^{m+1,n} \\ B_y^{m,n+1} \\ A_y^{m,n} \end{pmatrix}, \quad (\text{B2})$$

Bloch periodicity condition for the wave function implies

$$\begin{aligned} A_x^{n,m} &= e^{i(k'_x - k)na} e^{ik'_y ma} A_x^{0,0}, \\ B_x^{n,m} &= e^{i(k'_x + k)na} e^{ik'_y ma} B_x^{0,0}, \\ A_y^{n,m} &= e^{i(k'_y - k)ma} e^{ik'_x na} A_y^{0,0}, \\ A_x^{n,m} &= e^{i(k'_y + k)ma} e^{ik'_x na} B_y^{0,0}. \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

Using the last two expressions, we obtain the secular equation:

$$\begin{vmatrix} t_{\parallel} e^{i(k-k'_x)a} - 1 & r e^{2ika} & t_{\perp} e^{i(k-k'_x)a} & t_{\perp} e^{i(k'_y - k'_x + 2k)a} \\ r & t_{\parallel} e^{i(k'_x + k)a} - 1 & t_{\perp} & t_{\perp} e^{i(k'_y + k)a} \\ t_{\perp} e^{i(k-k'_y)a} & t_{\perp} e^{i(k'_x - k'_y + 2k)a} & t_{\parallel} e^{i(k-k'_y)a} - 1 & r e^{2ika} \\ t_{\perp} & t_{\perp} e^{i(k'_x + k)a} & r & t_{\parallel} e^{i(k'_y + k)a} - 1 \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{B4})$$

Replacing scattering matrix elements by their parametrization (40), we get the implicit band-structure equation given in the main text (43). Here we propose two more different ways to write the same dispersion relation, where the combinations $ka + \psi$, $k'_x a$ and $k'_y a$ have been replaced, respectively, by the simpler notations k , k'_x , and k'_y :

$$\cos(k + \phi_u) \cos(k + \phi_v) + \cos k'_x \cos k'_y \cos \phi_u \cos \phi_v \quad (\text{I})$$

$$= \frac{1}{2} (\cos k'_x + \cos k'_y)$$

$$\times [\cos \phi_u \cos(k + \phi_v) + \cos \phi_v \cos(k + \phi_u)]$$

$$\begin{aligned} & \frac{\cos(k + \phi_u) - \cos \phi_u \cos k'_x}{\cos(k + \phi_u) - \cos \phi_u \cos k'_y} \\ & = - \frac{\cos(k + \phi_v) - \cos \phi_v \cos k'_x}{\cos(k + \phi_v) - \cos \phi_v \cos k'_y}. \end{aligned} \quad (\text{II})$$

The first form is useful to identify symmetries of band structure. The second form is useful to derive RGF equations directly without using the formalism developed in Sec. III. We remark that in the 1D case ($t_{\perp}=0$), and in the 2D symmetric case ($t_{\perp}=t_{\parallel}$) the band structure equations are the same, namely, $\cos(ka + \psi + \phi) = \cos \phi \cos(k'a)$.

APPENDIX C: ANY LATTICE GENERALIZATION

In this part we will discuss particular points met in Sec. III of this article. First of all we could obtain the dispersion relation for any network, i.e., when the wires lengths are not necessarily equal. In that case Eq. (25) is modified into

$$A_{ij} = \sum_m^{(j)} e^{ikL_{ij}/2} S_{im}^{(j)} e^{ikL_{jm}/2} A_{jm}. \quad (\text{C1})$$

We choose the origin of coordinates needed to define the amplitudes A_{ij} at the centers of each link. This formula means that the amplitude of the wave going from node j to node i is the sum of amplitudes coming from all neighbors m of node j , multiplied by phase factors $\exp(ikL_{jm}/2)$ due to

propagation from the middle of link $\langle jm \rangle$ to the node j , then scattered on node j with probability amplitude $S_{im}^{(j)}$ and finally reaching the middle of link $\langle ij \rangle$ with a new phase factor $\exp(ikL_{ij}/2)$. We will now write the same equation in vector form. The expression will be more transparent and this permits us to express the secular equation for energy eigenvalues k in a compact form. If we fix the energy of the system then the stationary states are completely determined by $2N_L$ amplitudes, where N_L is the number of links. The factor 2 arises since each wave can propagate in two opposite directions on each link. So the set of amplitudes $\{A_{ij}\}$ could be presented as a vector $|A\rangle$ in a $2N_L$ -dimensional Hilbert space. We choose the orthonormal basis associated with network links $\langle mn|ij\rangle = \delta_{mi}\delta_{nj}$. Each link is represented by two basis vector $|ij\rangle$ and $|ji\rangle$, this orientation difference should be taken into account in various summations over first neighbors. We define the vector $|A\rangle = \sum_{\langle ij \rangle} A_{ij} |ij\rangle$ and the length operator $\hat{L} = \sum_{\langle ij \rangle} L_{ij} |ij\rangle \langle ij|$. The vector form of Eq. (C1) reads

$$|A(k)\rangle = e^{ik\hat{L}/2} \hat{T} e^{ik\hat{L}/2} |A(k)\rangle. \quad (\text{C2})$$

The possible values of k are given by

$$\det(e^{-ik\hat{L}} - \hat{T}) = 0. \quad (\text{C3})$$

One remarks that the periodicity of the spectrum (28) is lost in the general case, unless there exists a Δk such that $\exp(i\Delta k\hat{L}) = 1$. Let us be reminded that this periodicity of the spectrum allowed us to evaluate the integral $I(k)$ in Eq. (31): the contribution of each band was the same and we replaced the sum over any filled band just by sum over all the eigenvectors of operator \hat{T} .

The second point to be clarified is the spectral decomposition $\sum_q |q\rangle e^{-iqa} \langle q| = \hat{T}$. It holds only if $|q\rangle$ vectors form an

orthonormal basis. Orthogonality is clear as $|q\rangle$ is an eigenvector of a unitary operator,

$$\langle q|\hat{T}|k\rangle = e^{-iqa} \langle q|k\rangle = e^{-ika} \langle q|k\rangle. \quad (\text{C4})$$

Let us now evaluate the vector norm in the $|ij\rangle$ basis:

$$\langle q|q\rangle = \sum_{\langle ij \rangle} \langle q|ij\rangle \langle ij|q\rangle = \sum_{\langle ij \rangle} |A_{ij}(q)|^2. \quad (\text{C5})$$

But we know that the norm of wave function (24) in the physical Hilbert space should be equal to unity.

$$\int_{\text{network}} |\psi(x)|^2 dx = 1 = a \sum_{\langle ij \rangle} \left(|A_{ij}(q)|^2 + A_{ij}(q) A_{ji}^*(q) \frac{\sin(ka)}{ka} \right). \quad (\text{C6})$$

So if we demand $\langle q|q\rangle = 1$ we are doing an approximation neglecting the term proportional to $\sin(ka)/ka$. This approximation is legitimate in our case, as we consider systems where the typical number of electrons along each link between two nodes is large. Clearly, it will break down for links of the order of the Fermi wavelength. Supposing that $\langle q|q\rangle = 1$ is equivalent to identifying the norm in the (infinite dimensional) physical Hilbert space, with the norm associated with the orthonormal basis $|ij\rangle$ in the ($2N_L$ dimensional) auxiliary Hilbert space. The fact that our equations are not depending explicitly on the network scale parameter a is closely related to this approximation. So if one were to estimate finite size corrections to the RGF equation, one should take the physical normalization of the $|q\rangle$ basis into account. Such corrections would likely produce RGF equations where the nodes on the lattice are no longer renormalized independently of each other, by contrast to what we obtained in Sec. III; see Eq. (38).

- ¹G. Timp, R. E. Behringer, E. H. Westerwick, and J. E. Cunningham, in *Quantum Coherence in Mesoscopic Systems*, edited by B. Kramer (Plenum, New York, 1991).
- ²S. Washburn and R. A. Webb, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 1311 (1992).
- ³G. Timp, A. M. Chang, J. E. Cunningham, T. Y. Chang, P. Mankiewich, R. Behringer, and R. E. Howard, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2814 (1987).
- ⁴S. Pedersen, A. E. Hansen, A. Kristensen, C. B. Sorensen, and P. E. Lindelof, *Phys. Rev. B* **61**, 5457 (2000).
- ⁵D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2020 (1993).
- ⁶W. Rabaud, L. Saminadayar, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, and B. Etienne, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3124 (2001).
- ⁷M. L. Roukes, A. Scherer, S. J. Allen, Jr., H. G. Craighead, R. M. Ruthen, E. D. Beebe, and J. P. Harbison, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 3011 (1987).
- ⁸C. J. B. Ford, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, J. E. F. Frost, and G. A. C. Jones, *Phys. Rev. B* **38**, 8518 (1988).
- ⁹D. G. Ravenhall, H. W. Wyld, and R. L. Schult, *Phys. Rev. Lett.*

- 62**, 1780 (1989).
- ¹⁰G. Kirczenow, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2993 (1989).
- ¹¹H. U. Baranger and A. D. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 414 (1989).
- ¹²C. W. J. Beenakker and H. van Houten, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1857 (1989).
- ¹³C. J. B. Ford, S. Washburn, M. Büttiker, C. M. Knoedler, and J. M. Hong, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2724 (1989).
- ¹⁴C. Naud, G. Faini, and D. Mailly, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5104 (2001).
- ¹⁵J. Vidal, R. Mosseri, and B. Douçot, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5888 (1998).
- ¹⁶J. Vidal, G. Montambaux, and B. Douçot, *Phys. Rev. B* **62**, R16 294 (2000).
- ¹⁷M. Grayson, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and A. M. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1062 (1998).
- ¹⁸X. G. Wen, *Phys. Rev. B* **41**, 12 838 (1990).
- ¹⁹C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 724 (1994).
- ²⁰R. de-Picciotto, M. Reznikov, M. Heiblum, V. Umansky, G. Bunin, and D. Mahalu, *Nature (London)* **389**, 162 (1997).
- ²¹L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin, and B. Etienne, *Phys. Rev.*

- Lett. **79**, 2526 (1997).
- ²²M. Bockrath, D. H. Cobden, J. Lu, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, L. Balents, and P. L. McEuen, *Nature (London)* **397**, 598 (1999).
- ²³Z. Yao, H. W. C. Postma, L. Balents, and C. Dekker, *Nature (London)* **402**, 273 (1999).
- ²⁴R. Egger and A. O. Gogolin, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5082 (1997).
- ²⁵C. Kane, L. Balents, and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5086 (1997).
- ²⁶C. Papadopoulos, A. Rakitin, J. Li, A. S. Vedenev, and J. M. Xu, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3476 (2000).
- ²⁷J. Kim, K. Kang, J.-O. Lee, H.-H. Yoo, J.-R. Kim, J. W. Park, H. M. So, and J.-J. Kim, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, 1464 (2001).
- ²⁸M. Terrones, F. Banhart, N. Grobert, J.-C. Charlier, H. Terrones, and P. M. Ajayan, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 075505 (2002).
- ²⁹B. Gao, A. Komnik, R. Egger, D. C. Glattli, and A. Bachtold, *cond-mat/0311645* (unpublished).
- ³⁰A. Komnik and R. Egger, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2881 (1998).
- ³¹C. Nayak, M. P. A. Fisher, A. W. W. Ludwig, and H. H. Lin, *Phys. Rev. B* **59**, 15 694 (1999).
- ³²S. Lal, S. Rao, and D. Sen, *Phys. Rev. B* **66**, 165327 (2002).
- ³³S. Chen, B. Trauzettel, and R. Egger, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 226404 (2002).
- ³⁴C. Chamon, M. Oshikawa, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 206403 (2003).
- ³⁵S. Das, S. Rao, and D. Sen, *cond-mat/0311563* (unpublished).
- ³⁶R. L. Schult, H. W. Wyld, and D. G. Ravenhall, *Phys. Rev. B* **41**, 12 760 (1990).
- ³⁷P. S. Deo and A. M. Jayannavar, *Phys. Rev. B* **50**, 11 629 (1994).
- ³⁸S. Uryu and T. Ando, *Phys. Rev. B* **53**, 13 613 (1996).
- ³⁹C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1220 (1992).
- ⁴⁰C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **46**, 15 233 (1992).
- ⁴¹D. Yue, L. I. Glazman, and K. A. Matveev, *Phys. Rev. B* **49**, 1966 (1994).
- ⁴²V. Meden, W. Metzner, U. Schollwöck, and K. Schönhammer, *Phys. Rev. B* **65**, 045318 (2002).
- ⁴³V. Meden, W. Metzner, U. Schollwöck, and K. Schönhammer, *J. Low Temp. Phys.* **126**, 1147 (2002).
- ⁴⁴V. Meden, S. Andergassen, W. Metzner, U. Schollwöck, and K. Schönhammer, *Europhys. Lett.* **64**, 769 (2003).
- ⁴⁵P. W. Anderson, *J. Phys. C* **3**, 2346 (1970).
- ⁴⁶T. Kottos and U. Smilansky, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4794 (1997).
- ⁴⁷R. L. Schult, D. G. Ravenhall, and H. W. Wyld, *Phys. Rev. B* **39**, 5476 (1989).
- ⁴⁸K.-F. Berggren and Z.-L. Ji, *Phys. Rev. B* **43**, 4760 (1991).

Chapter 2

Réseaux possédant une symétrie \mathbb{Z}_2 locale

En étudiant n'importe quel système physique nous identifions assez rapidement les manifestations diverses de sa régularité. Ayant un esprit de réflexion logique, nous tentons naturellement de trouver un raisonnement simple qui explique ces régularités. Un formalisme adapté à répondre à ce genre de question est la théorie des groupes. Il est difficile de croire actuellement, que la première application de la théorie des groupes en physique n'a été faite que dans les années vingt (E. Wigner et H. Weyl). La seule connaissance des symétries du système fournit souvent ses caractéristiques les plus recherchées. Il est donc astucieux d'étudier les symétries du problème avant de l'attaquer par d'autres méthodes analytiques ou numériques.

Ce travail est motivé par le progrès récent dans la réalisation expérimentale de réseaux de fils quantiques, fabriqués dans le groupe de D. Mailly à Marcoussis.¹ Nous avons étudié l'impact de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale sur les propriétés électroniques des systèmes qui la possèdent. Nous avons commencé par l'analyse d'un modèle de la géométrie la plus simple qu'on puisse imaginer : un réseau \mathbb{Z}_2 unidimensionnel.

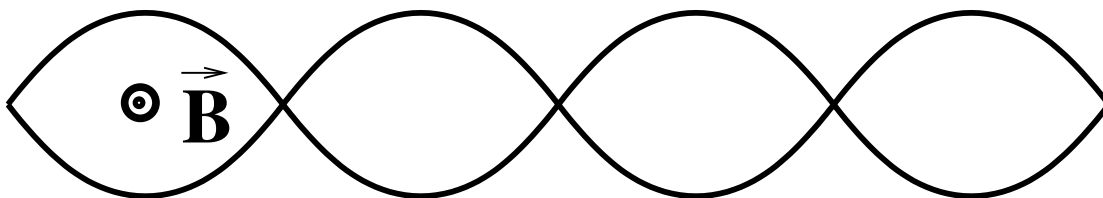


FIGURE 2.1: Réseau \mathbb{Z}_2 unidimensionnel en présence du champ magnétique perpendiculaire.

Inspiré au départ par le travail de J. Vidal et al. [VMD98]² fait dans l'approximation

¹je suis personnellement très reconnaissant à Joseph Dufouleur, qui a passé du temps à m'expliquer en détail le fonctionnement de leur schéma expérimental.

²une forme plus réaliste de la matrice de capacitance a été étudié dans [PF04]

des liaisons fortes, nous avons effectué la diagonalisation de l'Hamiltonien d'électrons sans interaction en utilisant la technique analytique décrite dans la section 1.4. Comme dans le travail de nos prédécesseurs, pour un champ magnétique extérieur d'un demi quantum de flux par plaquette le spectre se réduit à un ensemble de valeurs discrètes, ce qui confirme la présence d'états localisés dans le spectre (*cages d'Aharonov-Bohm*). Ensuite en exploitant la symétrie \mathbb{Z}_2 locale, nous avons pu non seulement reproduire les mêmes résultats physiques sans faire une lourde diagonalisation de l'Hamiltonien, mais aussi généraliser ces résultats pour toute la classe des réseaux \mathbb{Z}_2 .³ En fait, nous avons construit une base complète de solutions localisées dans des cages pour les électrons sans interaction et décomposé les interactions à deux particules dans la représentation irréductible de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale. La possibilité de la propagation de paires d'électrons pour le potentiel d'interaction électronique très général a été démontrée. Malgré cela, la transition supraconductrice n'est pas favorable du point de vue énergétique dans l'approximation du champ moyen. Cette étude a été complétée par S. Dusuel, qui a appliqué le groupe de renormalisation pour les fluctuations quasi unidimensionnelles [DVD02] dans un système possédant la symétrie \mathbb{Z}_2 locale. Les propriétés principales des réseaux \mathbb{Z}_2 se résument à :

- a) le régime d'oscillations d'Aharonov-Bohm en absence d'interaction électronique ;
- b) le seul transport possible de paires d'électrons en présence d'interaction ;
- c) l'absence de transition supraconductrice ;
- d) la transition vers un état d'onde de densité de charge à basses températures, stabilisé par l'effet des cages Aharonov-Bohm ;⁴
- e) l'état normal n'est pas un liquide de Fermi (la fonction de Green à un électron est à très courte portée spatiale).

Vu que nous avons fait un effort pour rendre notre article pédagogique et complet, je l'inclue directement dans ma thèse, en expliquant néanmoins les différentes réalisations expérimentales du modèle théorique étudié.

2.1 Cages d'Aharonov-Bohm

Avant de donner les détails des manipulations expérimentales, où les effets prédits par notre modèle théorique peuvent être observés, j'introduirai d'une façon intuitive la notion de *cage d'Aharonov-Bohm* (AB),⁵ qui régit le comportement des systèmes avec une symétrie \mathbb{Z}_2 locale.

La cage d'AB est un état localisé d'un porteur de charge dans le champ magnétique, dont la fonction d'onde est confinée par l'interférence destructive de tous les chemins possibles de propagation. La notion de cage est basée sur l'effet purement quantique d'AB, lié au fait que l'électron est sensible au potentiel-vecteur du champ

³nous définissons cette classe dans l'article [KDD05]

⁴pour un anneau $1D$ la phase d'onde de densité de charge dépend non seulement du flux Aharonov-Bohm, mais aussi de la parité électronique [Mon98]

⁵j'utilise dans la suite l'acronyme AB pour Aharonov-Bohm.

magnétique plutôt qu'au champ lui-même. Ceci peut être illustré simplement sur un exemple suivant. Supposons qu'un électron se propage librement sur un des plans perpendiculaires au solénoïde infini. Le champ magnétique à l'extérieur du dernier étant nul, du point de vue classique l'électron ne sentira pas du tout sa présence.⁶ A cause du fait que l'équation de Schrödinger contient le potentiel-vecteur du champ magnétique, la phase de la fonction d'onde électronique sera différente, dépendant du chemin choisi :

$$\psi_1(x) = \psi_{\text{in}}(x)e^{i\frac{2\pi}{\phi_0} \int_i \vec{A}_1 d\vec{l}}, \quad \psi_2(x) = \psi_{\text{in}}(x)e^{i\frac{2\pi}{\phi_0} \int_i \vec{A}_2 d\vec{l}} \quad (2.1)$$

où $\vec{A}_{1,2}(x)$ est le vecteur-potentiel du champ magnétique sur les chemins $\{1, 2\}$ respectivement (Fig. 2.2), $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux et ψ_{in} est l'amplitude de probabilité de trouver l'électron dans le point initial. Si les deux chemins sont équivalents, à demi-quantum de flux ces deux amplitudes de propagation vont s'annihiler :

$$\psi_{\text{out}}(x) = \psi_{\text{in}}(x)(e^{i\frac{2\pi}{\phi_0} \int_i \vec{A}_1 d\vec{l}} + e^{i\frac{2\pi}{\phi_0} \int_i \vec{A}_2 d\vec{l}}) = \psi_{\text{in}}(x)e^{i\frac{2\pi}{\phi_0} \int_i \vec{A}_1 d\vec{l}} (1 + e^{i\frac{2\pi}{\phi_0} \oint \vec{A} d\vec{l}}) = 0 \quad (2.2)$$

Nous avons pris en compte que $\oint \vec{A} d\vec{l} = \phi_0/2$.

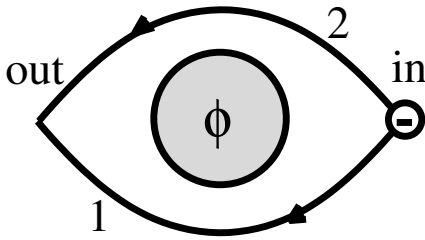


FIGURE 2.2:

Effet d'Aharonov-Bohm. L'amplitude de propagation d'un électron du point "in" vers le point "out" dépend du chemin choisi (1 ou 2). Au contraire, les deux chemins sont équivalents pour le mouvement classique, car le champ magnétique est nul à l'extérieur du solénoïde.

Donc si l'électron, avec une certaine amplitude non nulle au point "in", n'avait que ces deux chemins de propagation, il ne pourrait jamais atteindre le point "out". Nous pouvons imaginer un schéma d'expérience, qui rend ceci possible. Considérons un électron dans la géométrie des losanges, connectés par leurs sommets, où il ne peut se propager que le long des brins :

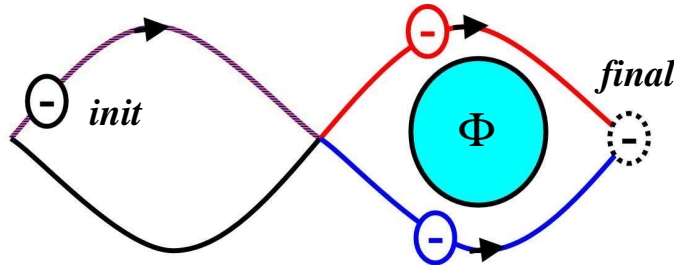


FIGURE 2.3: La cage d'Aharonov-Bohm. L'électron qui se trouve au point initial a deux chemins équivalents pour propager vers le point final. Si le flux à travers la plaquette est égal à $\phi_0/2$, l'électron reste localisé.

⁶Mathématiquement ceci est équivalent à un problème de la propagation 2D d'un électron soumis à champ magnétique perpendiculaire à son plan du mouvement. Ce champ est nul partout sauf un cylindre de taille finie.

Les électrons se trouvant dans une telle géométrie sont localisés à demi-quantum de flux par losange à cause de l'interférence destructive des deux chemins équivalents. Les fonctions d'ondes de tels états seront confinées dans l'espace. Nous pouvons conclure que *l'élément essentiel pour avoir des états localisés (cages Aharonov-Bohm) dans un réseau de fils est la présence de losanges*, qui nous assure l'existence de paires de chemins équivalents pour la propagation électronique. Il y a plusieurs réseaux bidimensionnels qui possèdent cette spécificité géométrique. Le plus connus sont les réseaux \mathbb{Z}_2 et \mathcal{T}_3 (en anglais *dice lattice*).⁷

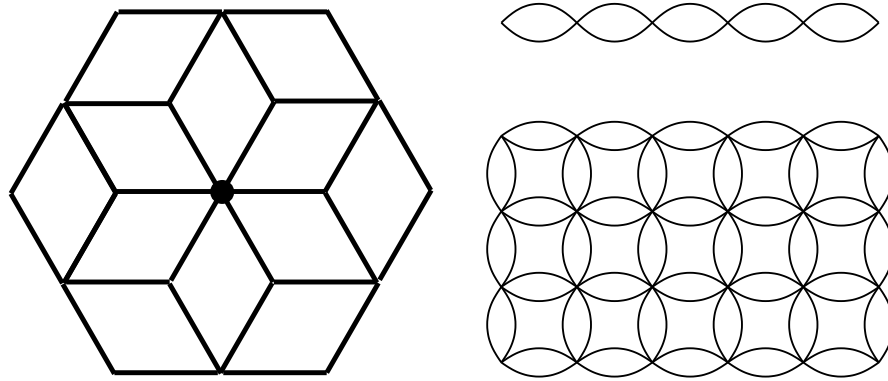


FIGURE 2.4: Représentation du réseau \mathcal{T}_3 (dice lattice) à gauche et des réseaux \mathbb{Z}_2 uni (en haut à droite) et bidimensionnel (en bas à droite).

Pour un système d'électrons sans interaction : la présence de cages AB implique clairement que le nombre d'électrons dans chaque cage est séparément conservé. On peut donc définir une symétrie $U(1)$ locale, pour le "dice" aussi bien que pour les réseaux \mathbb{Z}_2 . Lorsqu'on branche les interactions, cette symétrie $U(1)$ locale est détruite (car il y a des éléments de matrice de l'interaction qui changent les occupations des cages). C'est là qu'apparaît la différence entre le dice et les réseaux \mathbb{Z}_2 : pour ces derniers, il existe un sous groupe de $U(1)$ (\mathbb{Z}_2 locale), qui survit au branchement de l'interaction. En récapitulant, *La différence entre le réseau "dice" et les réseaux \mathbb{Z}_2 se voit essentiellement lorsqu'on branche les interactions entre électrons.* [CF01] En effet, les oscillations de la résistance en fonction du champ magnétique ont été observées dans le réseau "dice" [NFM01], par contre dans les réseaux \mathbb{Z}_2 , où l'effet des cages en présence de l'interaction doit être plus robuste, ces oscillations n'ont toujours pas été observées [DM04].⁸ Une des cibles visées par nos études théoriques était de pouvoir trouver la raison des difficultés expérimentales.

⁷ \mathcal{T}_3 vient de la classification des quasi-cristaux. Nous allons utiliser pour ces réseaux plutôt le mot *dice*, qui à l'origine géométrique.

⁸Théoriquement au moment où le flux magnétique est égal à un demi quantum de flux ($\phi = \phi_0/2 \pmod{\phi_0}$), la résistance de l'échantillon doit s'annuler. Expérimentalement ce sont des oscillations de la résistance en fonction du champ magnétique qui apparaissent.

2.2 Réalisation expérimentale

Comme je l'ai expliqué dans le premier chapitre, à part les systèmes métalliques, les réseaux de fils peuvent être réalisés dans les hétérostructures de semi-conducteurs, les premières expériences étant effectuées dans la géométrie d'un anneau simple [MCB93]. Le premier travail théorique [VMD98] étant réalisé dans l'approximation de liaisons fortes, je vais commencer par la description d'une réalisation expérimentale adaptée à cette approximation.

2.2.1 Réseau supraconducteur

Nous considérons ici une des possibilités pour réaliser un schéma expérimental de porteurs de charge, qui se propagent à deux dimensions dans une géométrie précise. Malgré l'interaction de Coulomb répulsive, dans un supraconducteur les électrons s'apparient à cause du fort couplage avec le bain de phonons. Nous pouvons alors imaginer un réseau d'îlots supraconducteurs séparés l'un de l'autre par une fine couche isolante. Les liens du réseau ne sont rien d'autre que les jonction Josephson. Enfin nous obtenons un réseau de sites supraconducteur où les paires d'électrons peuvent se propager par effet tunnel. Il est donc naturel de tester le modèle de liaisons fortes sur ce schéma expérimental.

E. Serret et al. [Ser02] ont étudié des réseaux "dice" de jonctions Josephson (JJ).⁹ Les échantillons contenant des centaines de milliers de jonctions ont été réalisés à la base de $Al/Al_2O_3/Al$ déposé sur le substrat de silicium. Les îlots sont obtenus à partir d'une couche supraconductrice $2D$ par l'oxydation des barrières tunnels. La portée de l'interaction des paires dans les réseaux étudiés s'étale sur quelques dizaines de sites voisins et le nombre de charges en interaction est très important. La surface d'une cellule étant petite ($\approx 6\mu m^2$) les mesures étaient faites dans le régime de faible champ magnétique (un quantum de flux correspondait à un champ magnétique de $\approx 4 Gauss$).¹⁰ Le réseau dice a été mesuré en parallèle avec le réseau carré, afin d'extraire les effets propres liés à la présence de cages. Le régime isolant à demi-quantum de flux par cellule a été étudié en détail : la résistance en fonction de la température, ainsi que les effets de la tension de grille électrostatique. Les courbes de la magnéto-résistance à différentes températures ont été obtenues. Premièrement, un affaiblissement de la supraconductivité dû aux effet de cage a été retrouvé. Ensuite, une phase spécifique du liquide quantique de vortex à été observée lorsque les losanges sont traversés par un demi quantum de flux. Cette phase, inhabituelle pour les bosons, est induite par les fluctuations quantiques dans le régime intermédiaire $E_J \sim E_c$. L'existence de cette phase liquide est attribuée à la présence des cages AB dans le réseau dice.

⁹les propriétés des jonctions Josephson seront expliquées dans le chapitre suivant.

¹⁰Le champ magnétique doit être petit pour ne pas détruire le supraconducteur.

2.2.2 Réseau de fils quantiques

Le réseau dice a été étudié par C. Naud pendant sa thèse [Nau02]. Actuellement J. Dufouleur mène un travail sur les réseaux \mathbb{Z}_2 . La réalisation expérimentale des réseaux de fils quantiques étant expliquée en détail dans la section 1.1, je donnerai dans cette partie seulement les caractéristiques physiques des échantillons de géométrie \mathbb{Z}_2 fabriqués au laboratoire de Photonique et de Nanostructures (LPN de Marcoussis), ainsi que la motivation du groupe expérimental pour étudier les réseaux \mathbb{Z}_2 .

L'avantage principal de ces réseaux de fils quantiques est qu'on peut travailler à des champs magnétiques beaucoup plus élevés que dans les échantillons de JJ. Les effets liés à l'effet Hall quantique apparaissent à un champ magnétique fort de l'ordre de 2 Tesla, ce qui détruit le caractère unidimensionnel des fils.¹¹ Ceci permet de mesurer les oscillations de la magnéto-résistance et ensuite analyser sa transformation de Fourier. Le pic à demi-quantum de flux indique la présence des cages. Les études sont menées en parallèle dans un réseau carré où les solutions localisées ne forment pas une base complète de l'espace de Hilbert. En mesurant les propriétés du gaz $2D$ les caractéristiques physiques de l'échantillon peuvent être obtenues. La densité du gaz $2D$, qui définit la longueur d'onde de Fermi est mesurée à partir des oscillations de Shoubnikov-de Haas. La valeur typique de λ_F est de l'ordre de 50 nm . La largeur de fil $W \approx 100\text{ nm}$ est estimée à partir de la position du pic de magnéto-résistance.¹¹ Le nombre de canaux est typiquement de l'ordre $2W/\lambda_F = 4$. La longueur du pas de réseau est égale $L \approx 2\text{ }\mu\text{m}$. La masse effective électronique dans l'arséniure de gallium est $m^* = 0.067m_e$, m_e étant la masse de l'électron. La permittivité de $GaAs$ est $\varepsilon = 12.9$.

Dans les mesures de C. Naud, un phénomène curieux a été observé : un changement de la période des oscillations (passage de $\Phi_0 = h/e$ à $\Phi_0/2$) à fort champ magnétique ($B \sim 1.5$ Tesla). De façon très naïve, cela fait penser à des charges doubles ($2e$), et donc à la supraconductivité. Le réseau \mathbb{Z}_2 est intéressant, car les effets d'interaction sont amplifiés par rapport au réseau dice. La question de la supraconductivité, à laquelle nous répondons dans l'article [KD05], n'était pas totalement académique, elle s'était posée au vu de ces résultats qui restent inexpliqués.

2.3 Article [KDD05]

¹¹ce qui correspond au cas où la largeur de fils quantiques W est égale au double du rayon cyclotron $r_c = h/(eB\lambda_F)$.

Quantum wire networks with local \mathbb{Z}_2 symmetry

K. Kazymyrenko,^{1,*} S. Dusuel,^{2,†} and B. Douçot^{1,‡}

¹*Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies,
CNRS UMR 7589, Université Paris VI et VII,
4, Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France*

²*Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, Zùlpicher Str. 77, 50937 Köln, Germany*

For a large class of networks made of connected loops, in the presence of an external magnetic field of half flux quantum per loop, we show the existence of a large local symmetry group, generated by simultaneous flips of the electronic current in all the loops adjacent to a given node. Using an ultra-localized single particle basis adapted to this local \mathbb{Z}_2 symmetry, we show that it is preserved by a large class of interaction potentials. As a main physical consequence, the only allowed tunneling processes in such networks are induced by electron-electron interactions and involve a simultaneous hop of two electrons. Using a mean-field picture and then a more systematic renormalization-group treatment, we show that these pair hopping processes do not generate a superconducting instability, but they destroy the Luttinger liquid behavior in the links, giving rise at low energy to a strongly correlated spin-density-wave state.

PACS numbers: 71.10.Li, 71.10.Pm, 73.21.Hb

I. INTRODUCTION

For the past two decades, transport properties of quantum wires have received a lot of attention^{1,2}. Besides metallic systems, two dimensional electron gases induced in GaAs/AlGaAs heterostructures have displayed a rich variety of quantum effects such as Aharonov-Bohm resistance oscillations in a ring geometry^{3,4}, and persistent currents^{5,6}. More recently, coherent Aharonov-Bohm oscillations have been measured in ballistic arrays with the dice lattice geometry⁷, in agreement with the predictions of simple models for non-interacting electrons⁸. The experimental visibility of conductance oscillations with the full flux quantum $\Phi_0 = h/e$ periodicity in large structures with a few thousand loops has been attributed to the presence of Aharonov-Bohm cages which localize the motion of electrons when the external flux per elementary loop is half-integer in units of Φ_0 .

After these first investigations, a natural issue is to understand interaction effects on this geometrical localization phenomenon. For two electrons, it was shown that interaction induces some correlated hopping processes, at the origin of some delocalized states in which the two electrons always remain close from each other^{9,10}. Remarkably, this trend appears for any sign of interaction. Of course, for a repulsive interaction, these extended states lie above the ground-state sector, obtained when the two electrons are individually localized in distinct remote cages. But this raises the question of what happens at finite density, where it is no longer possible to put all conduction electrons in separate cages. Two electrons initially in the same cage will be able to move together, so this may generate some kind of metallic state.

An interacting system with a finite particle density was first studied in its *bosonic* version in a one-dimensional geometry showing Aharonov-Bohm cages, namely a chain of rhombi¹¹. This model has been adapted into a realistic description of a Josephson junction array with the

same geometry recently¹². There, it was found that no single boson condensate can exist, but instead a 2-boson condensate is stabilized at low energy. This peculiar phenomenon is connected to the single particle localization in Aharonov-Bohm cages, but in the presence of interaction, it requires a stronger property, identified as a local symmetry based on the \mathbb{Z}_2 group. This symmetry implies that the parity of the total particle number within any Aharonov-Bohm cage is conserved. If this symmetry remains unbroken, it prevents the formation of any single boson condensate. A two-dimensional version exhibiting this local \mathbb{Z}_2 symmetry was also analyzed¹³, in the context of topologically protected quantum memories. The crucial role of a local symmetry is well illustrated by the example of the dice lattice, which sustains Aharonov-Bohm cages, but no local symmetry in the presence of interactions. There, it was found that the external magnetic field corresponding to $\Phi_0/2$ per loop imposes a vortex lattice which allows for some zero-energy line defects, but the single particle condensate exhibits a finite phase stiffness¹⁴⁻¹⁶.

The fermionic case at finite density is the subject of the present article. Motivated by ongoing experiments¹⁷ on networks designed on a 2D electron system at a GaAs/GaAlAs interface, we shall study quantum wire networks, which geometry is compatible with a local \mathbb{Z}_2 symmetry in the presence of a magnetic field of half flux quantum per elementary loop. Such networks will be called \mathbb{Z}_2 networks, and two examples are shown on Fig. 1 below. In section II, we define precisely this class of networks, construct the unitary operators associated to the local \mathbb{Z}_2 symmetry group, and consider their irreducible representations in the Hilbert space of a single particle. We show that all the common eigenstates of all the local generators of this large Abelian group are strongly localized within Aharonov-Bohm cages involving only a finite number of elementary loops. Section III first discusses the matrix elements of a two-body interaction in

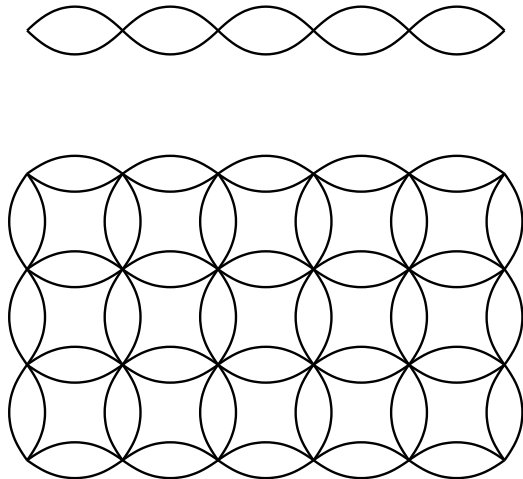


FIG. 1: This picture presents two examples of \mathbb{Z}_2 networks: a chain of loops (upper part), and a square lattice of loops (lower part). All these networks are obtained from any planar lattice after replacing each link by a loop. To get a local \mathbb{Z}_2 symmetry, each loop is required to be perfectly invariant under the reflection through the long axis defined by its two adjacent nodes.

this localized basis adapted to the \mathbb{Z}_2 symmetry. This shows that a large class of pair interaction potentials (including the point-like Hubbard interaction) is compatible with this symmetry. We then show that, at least in a mean-field approach, the particle pair hopping processes generated by a repulsive interaction do not lead to superconductivity. Starting from simple order of magnitude estimates adapted to semi-conductor quantum wire networks, we argue that a more refined renormalization group approach (RG) is required, given the strength of the Coulomb interaction for typical electronic densities. Finally, section IV proposes a simplified \mathbb{Z}_2 symmetric model of coupled Aharonov-Bohm cages which is analyzed with the RG method using the one-loop approximation. This confirms the irrelevance of the electron pair hopping processes in the low-energy limit, and establishes a tendency for the system to reach a strong coupling fixed point of a spin density wave character. So the combination of local \mathbb{Z}_2 symmetry and electron-electron repulsion destroys the Luttinger liquid in the quantum wires which constitute the network, leaving room only for a strongly correlated liquid with mostly gapped excitations. Finally, a brief appendix shows how this picture fits with a simple mean-field description.

II. LOCAL \mathbb{Z}_2 SYMMETRY FOR A CLASS OF QUANTUM NETWORKS

A. Basic construction

In this paper, we shall consider networks of quantum wires (called \mathbb{Z}_2 networks), for which the elementary links

connecting two nearest-neighbor nodes are doubled. In other words, such networks may be obtained from any planar graph, after replacing links by loops. Examples of this construction are shown on Fig. 1. The key assumption we shall make is that all these loops exhibit a perfect reflection symmetry around the axis joining the two nodes connected by the loop. This requirement imposes some rather severe constraints on the fabrication of such structures, in terms of the network geometry, and of the control of various types of disorder. However, as discussed in the Introduction, experimental observation of the Aharonov-Bohm cage effect in GaAs quantum wire networks⁷ suggests that present technology is able to meet these constraints. On a more theoretical side, numerical investigations on disordered tight-binding versions of such networks have shown that the effects we shall discuss survive after a small but sizeable disorder is introduced¹⁰. At a purely geometric level, these structures exhibit, besides their usual crystalline symmetry groups, a large symmetry generated by local flips of elementary loops around their central axis. We are mostly addressing here the quantum-mechanical effects of such a symmetry in the presence of a constant and uniform external magnetic field, corresponding to half-flux quantum per loop.

As usual, quantum mechanics is affected by the fact that the vector potential used to describe the magnetic field is not invariant under these local operations. In the case of the translational symmetry, this leads to the non-commutation of magnetic translations and to Landau level quantization. In the present case, the striking consequence is the appearance of a dramatic localization phenomenon, where all single particle energy eigenstates are confined inside a finite set of loops⁸.

To illustrate the idea, it is useful to consider first a single loop, with strictly one-dimensional motion along a coordinate x . If l denotes the perimeter of this loop, we have to impose the periodicity condition: $\psi(l) = \psi(0)$. The stationary Schrödinger equation reads:

$$E\psi(x) = \frac{1}{2m}(\hat{p} + eA)^2\psi(x) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\frac{d}{dx} + eA)^2\psi(x)$$

where $A(x)$ is the projection of the vector potential along the wire at point x . Using the gauge transformation: $\psi(x) = \exp(-i\frac{e}{\hbar}\int_0^x A(x')dx')\chi(x)$, $\chi(x)$ obeys the Schrödinger equation for a free particle, subjected to the boundary condition: $\chi(l) = \exp(i2\pi\Phi/\Phi_0)\chi(0)$, where $\Phi = \frac{e}{\hbar}\int_0^l A(x')dx'$ is the magnetic flux through the loop and $\Phi_0 = h/e$ is the flux quantum. The single particle energy spectrum is then: $E_n = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ml^2}(n + \Phi/\Phi_0)^2$, where n is any integer. For generic values of Φ/Φ_0 , all energy eigenvalues are non-degenerate, but all levels are doubly degenerate when $2\Phi/\Phi_0$ is an integer (with the exception of the ground-state for integer Φ/Φ_0). For integer Φ/Φ_0 , the flux through the loop may be eliminated by a gauge transformation, and the degeneracy is clearly attributed to the reflection symmetry, which changes the wave-number of an eigenstate into its opposite. In the case

of half-integer Φ/Φ_0 , this geometrical symmetry has to be combined with a gauge transformation so that $\psi(x)$ is changed into $(T\psi)(x) \equiv \psi'(x) = \exp(if(x))\psi(-x)$, with $f(x) = \frac{e}{\hbar} \left(\int_0^{-x} A(x')dx' - \int_0^x A(x')dx' \right)$. This transformation sends an eigenstate with a persistent current into an eigenstate with the reversed current. We also notice that $\psi'(0) = \psi(0)$ whereas $\psi'(l/2) = -\psi(l/2)$. This has some important consequences if we wish to generalize these reflection operations to the elementary loops connecting nodes in \mathbb{Z}_2 networks.

Let us first consider a one dimensional chain of loops, as shown on the upper part of Fig. 1. Any link of this chain can be represented by a simple line with plus and minus signs on its extremities, see Fig. 2, reminding us the sign of the transformed wavefunction. Suppose now we try to construct a symmetry associated to the reflection for just one loop. The simplest way is to combine as before reflection and gauge transformation, but we encounter a major problem: this transformation will be no longer local, because we are obliged to change globally the sign of the part of the wave-function lying on one side of the transformed loop. For an open chain, this non local aspect of the transformation attached to a single loop is not too disturbing, since it modifies physical observables such as electronic current only locally. But in the case of periodic boundary conditions, it has the consequence that such a transformation simply becomes impossible. In fact, one can easily avoid this difficulty by considering two transformations on adjacent loops, see Fig. 2. The generalization for any \mathbb{Z}_2 lattice is clear, we need to join together negative extremities of all the loops arriving at a given node. Because of these phase-factors arising from gauge transformations, the local symmetry generators are therefore associated to lattice *sites* and not to the *links* as one would infer from purely geometrical considerations. Note that in lattice gauge theories, local generators of gauge transformations are also attached to lattice sites, which establishes a close connection between \mathbb{Z}_2 networks and lattice gauge theories based on the \mathbb{Z}_2 group. This viewpoint has been emphasized in the context of Josephson junction arrays^{18,19}.

In case of an *integer* number of flux quanta per loop ($\Phi = n\Phi_0$), we have now $\psi'(0) = \psi(0)$ and $\psi'(l/2) = \psi(l/2)$, so that each link carries plus signs on both ends. In this case, it is possible to construct local \mathbb{Z}_2 symmetry generators associated to lattice *links* instead of nodes. But then, because the single particle Hamiltonian has mostly a dispersive spectrum, simultaneous eigenstates of the Hamiltonian and these local generators are extended, instead of being localized as in the half-flux case.

B. Constraints on scattering matrices at the nodes

Let us now describe more precisely the local transformation attached to a given site i on a \mathbb{Z}_2 network. This site belongs to n elementary loops, so it is the intersec-

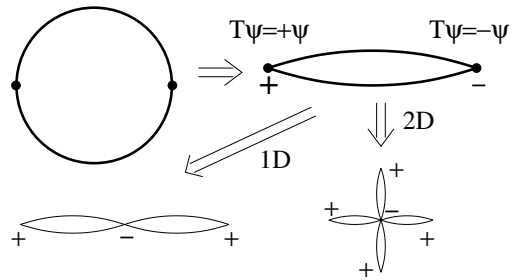


FIG. 2: This picture shows different realizations of a local \mathbb{Z}_2 symmetry, successively for a single loop (upper part), and then around sites present in a 1D geometry (chain of loops, lower left) or a 2D geometry (square lattice of nodes connected by loops, lower right). Signs plus or minus keep track of the relative sign between initial and transformed wavefunctions ψ and $T\psi \equiv \psi'$.

tion of $2n$ links. Since these links are naturally paired, we shall label them by a compound index $(ij\alpha)$, where j refers to any of the n nearest neighbors of site i , and $\alpha \in \{1, 2\}$. On each of these $2n$ links, we choose the origin of an x coordinate at site i , and the projection of the local vector potential along this link is denoted by $A_{ij\alpha}(x)$. As already discussed, it is convenient to write the single-particle wave-function as:

$$\psi_{ij\alpha}(x) = \exp\left(-i\frac{e}{\hbar} \int_0^x A_{ij\alpha}(x')dx'\right) \chi_{ij\alpha}(x)$$

along the link $(ij\alpha)$, where an eigenstate with energy $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ has the form:

$$\chi_{ij\alpha}(x) = C_{ij\alpha} e^{-ikx} + D_{ij\alpha} e^{ikx}$$

Here, $C_{ij\alpha}$ (resp. $D_{ij\alpha}$) is the amplitude of an incoming (resp. outgoing) wave with respect to site i . Since $\chi_{ij\alpha}(x)$ is locally the wave-function of a free particle with no magnetic field, we may define in a gauge-invariant way a scattering matrix at site i by:

$$D_{ij\alpha} = \sum_{j'\alpha'}^{(i)} S_{j\alpha, j'\alpha'}^{(i)} C_{ij'\alpha'} \quad (1)$$

which expresses outgoing amplitudes as a function of incoming ones. Using the notation $\bar{1} = 2$ and $\bar{2} = 1$, the local \mathbb{Z}_2 generators commutes at any site with the single particle Hamiltonian if and only if:

$$S_{j\bar{\alpha}, j'\alpha'}^{(i)} = S_{j\alpha, j'\alpha'}^{(i)} = S_{j\alpha, j'\bar{\alpha}'}^{(i)} \quad (j \neq j') \quad (2)$$

$$S_{j\bar{\alpha}, j\bar{\alpha}'}^{(i)} = S_{j\alpha, j\alpha'}^{(i)} \quad (3)$$

where i denotes any site, and j, j' are arbitrary nearest neighbors of i . In other words, there should be a perfect symmetry between paired links $ij\alpha$ and $ij\bar{\alpha}$. The proof of this rather intuitive statement will be given in the next paragraph. Note that in real systems, nodes always have a finite area, and this constraint may be difficult to

implement. For instance, as shown on Fig. 3, in a chain of loops, it seems very likely that the simplest design for a node does not satisfy this symmetry. A suggestion for improving this local geometry is sketched on the bottom of Fig. 3. Generalizations to multichannel quantum wires are possible, if the underlying inversion symmetry is also performed on the transverse channels. But we have to restrict ourselves to a regime of weak magnetic fields so that we may neglect the field effects on orbital motion within a wire.

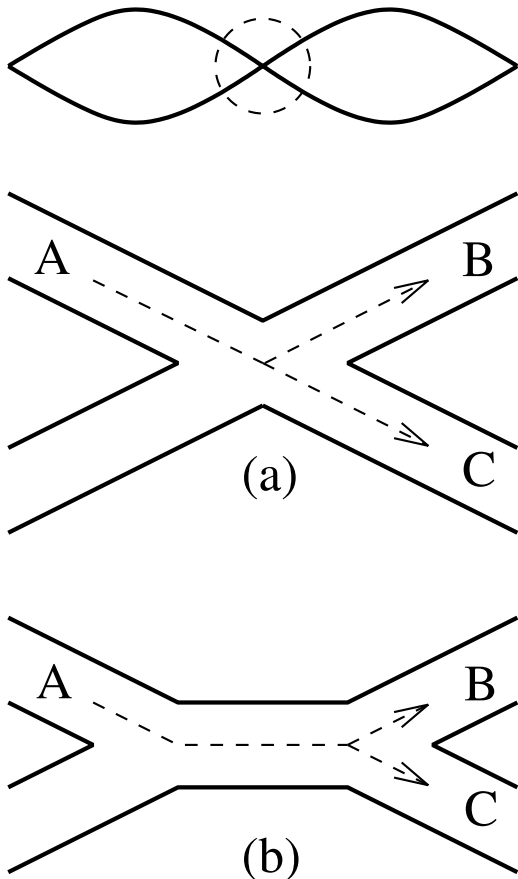


FIG. 3: This picture illustrates the requirements on the scattering matrix at a node present in a chain of loops (upper part), in order to impose a local \mathbb{Z}_2 symmetry. The most direct design (a), is likely to be incompatible with these constraints, since intuitively, the amplitude for an electron to go from A to B is different from the amplitude to go from A to C. In a slightly modified design (b), these amplitudes are more likely to be equal, and this is more appropriate for an experimental implementation of the local \mathbb{Z}_2 symmetry.

Let us now check that conditions (2),(3) are all we need. The transformation attached to site i now reads:

$$\psi'_{ij\alpha}(x) = -\exp\left(i\sigma_\alpha \frac{e}{\hbar} \int_0^x (A_{ij2}(x') - A_{ij1}(x')) dx'\right) \psi_{ij\bar{\alpha}}(x) \quad (4)$$

where $\sigma_1 = 1$ and $\sigma_2 = -1$. Using the locally gauge-invariant description in terms of $\chi_{ij\alpha}(x)$, this trans-

lates into: $\chi'_{ij\alpha}(x) = -\chi_{ij\bar{\alpha}}(x)$, which is equivalent to $C'_{ij\alpha} = -C_{ij\bar{\alpha}}$, and $D'_{ij\alpha} = -D_{ij\bar{\alpha}}$. This operation leaves the S matrix at site i invariant if and only if:

$$S_{j\bar{\alpha},j'\bar{\alpha}'}^{(i)} = S_{j\alpha,j'\alpha'}^{(i)} \quad (5)$$

Note that this is valid for any j and j' which are nearest neighbors of i . When $j = j'$, we recover condition (3), and when $j \neq j'$, it is implied by condition (2). But we should also check that the transformation attached to site i also preserves the S matrix at all nearest-neighbor sites j of i . Along the link $ij\alpha$, we have to perform a change of origin, permuting i and j , and replacing x by $y = l_{ij} - x$, where l_{ij} is the common length of the two links ($ij1$) and ($ij2$). Using the fact that the flux through the loop enclosed by these two links is half a flux quantum modulo Φ_0 , Eq. (4) becomes:

$$\psi'_{ji\alpha}(y) = \exp\left(i\sigma_\alpha \frac{e}{\hbar} \int_0^y (A_{ji2}(y') - A_{ji1}(y')) dy'\right) \psi_{ji\bar{\alpha}}(y) \quad (6)$$

which implies $\chi'_{ji\alpha}(x) = \chi_{ji\bar{\alpha}}(x)$, or: $C'_{ji\alpha} = C_{ji\bar{\alpha}}$, and $D'_{ji\alpha} = D_{ji\bar{\alpha}}$. This yields $S_{i\bar{\alpha},i\bar{\alpha}'}^{(j)} = S_{i\alpha,i\alpha'}^{(j)}$, that is Eq. (3) after a permutation of i and j . Now, for any site j' , nearest neighbor of j and distinct from i , the transformation based at site i does not affect the pair of links ($jj'\alpha$), so $C'_{jj'\alpha} = C_{jj'\alpha}$, and $D'_{jj'\alpha} = D_{jj'\alpha}$, which implies $S_{i\bar{\alpha},j'\bar{\alpha}'}^{(j)} = S_{i\alpha,j'\alpha'}^{(j)}$ and $S_{j'\alpha',i\bar{\alpha}}^{(j)} = S_{j'\alpha',i\alpha}^{(j)}$, that is Eq. (2) after a permutation of i and j .

C. Irreducible representations of local \mathbb{Z}_2 symmetry

Let us denote by U_i the unitary transformation attached at site i , defined by Eq. (4). Clearly, $U_i^2 = \mathbf{1}$, so the eigenvalues of U_i are ± 1 . Furthermore, it is simple to check that U_i and U_j commute. The only non-trivial case arises when i and j are nearest neighbors. In fact, comparing Eqs. (4) and (6) we see that the actions of U_i and U_j on the loop between i and j differ only by a sign. The mutual commutation of these operators ensures that they can be simultaneously diagonalized, so that $U_i|\Psi\rangle = \epsilon_i|\Psi\rangle$, with $\epsilon_i = \pm 1$. For single particle states, the possible collections of eigenvalues $\{\epsilon_i\}$ are very limited. To identify them, we need to introduce the notion of an Aharonov-Bohm cage. For any lattice site i , the cage attached to i is composed of all the elementary loops which contain i . We have now the following properties:

Property (a): If i and j are nearest-neighbor sites, and if $U_i|\Psi\rangle = U_j|\Psi\rangle$, then the wave-function associated to $|\Psi\rangle$ vanishes on the loop joining i and j .

This is an immediate consequence of the fact that along this loop, $U_i|\Psi\rangle$ and $U_j|\Psi\rangle$ are described by opposite wave-functions, as already noted (compare Eqs. (4) and (6)).

Property (b): If $U_i|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$, the wave-function ψ attached to $|\Psi\rangle$ vanishes everywhere outside the Aharonov-Bohm cage attached to i .

This follows directly from the fact that the transformation U_i does not modify the wave-function outside the Aharonov-Bohm cage attached to i .

Main Property: The only possible collections of simultaneous eigenvalues $\{\epsilon_i\}$ are such that exactly one of them is equal to -1 , all the others being equal to 1 . If i is the only site with $\epsilon_i = -1$, the corresponding wave-function vanishes everywhere outside the Aharonov-Bohm cage attached to i .

Because of property (a), if all ϵ_i 's are equal to 1 , $|\Psi\rangle$ vanishes. So at least one eigenvalue is negative. Suppose we have two of them: $\epsilon_i = \epsilon_j = -1$ with $i \neq j$. Because of property (b), the wave-function ψ vanishes everywhere outside the intersection of the cages centered at i and j . If this intersection is empty, then $|\Psi\rangle = 0$. If not, then i and j are nearest neighbors. But then, property (a) implies that ψ vanishes also on the loop joining i and j , so $|\Psi\rangle = 0$. The only possibility is therefore to have $\epsilon_i = -1$ and $\epsilon_j = 1$ for any $j \neq i$. From property (b), the wave-function is confined inside the Aharonov-Bohm cage centered around site i .

When the S matrix of each node satisfies conditions (2) and (3) for any wave-vector k , we may diagonalize the single-particle Hamiltonian in a localized basis of Aharonov-Bohm cage wave-functions. Since each of these cages has only a finite total wire length, the energy spectrum is always discrete. These cages behave as artificial atoms, at least as long as electrons are not interacting. The interesting feature of such a system is that two cages may overlap, which allows for non-trivial interaction effects.

All these results (for $\Phi = \Phi_0/2$) have a simple physical interpretation in the light of the Aharonov-Bohm effect. Suppose we have an electron situated at a node i . If j is a nearest-neighbor of i , there are two possible equivalent ways for this electron to reach a nearby loop (j, k) , using either side of loop (i, j) . But the associated probability amplitudes have opposite signs (as $\exp(i2\pi\Phi/\Phi_0) = -1$) and will compensate each other. This is why we obtain localized solutions which form a complete basis of the Hilbert space for non-interacting electrons.

In case of integer number of flux quanta per loop, the functions within a given irreducible representation are not necessarily local, so the previous conclusions do not apply. It happens that some localized solutions still exist, but they form only “half” of a complete basis of states. This analysis could be made using the Kottos and Smilansky formalism²⁰, but to save space and since we are mostly interested in half-flux quantum per loop, we will not give further detail on the integer flux case in this paper.

III. INTERACTION EFFECTS ON AHARONOV-BOHM CAGES

A. Hamiltonian for interacting electrons in an Aharonov-Bohm cage basis

In the case of interacting electrons, this simple physical picture has to be deeply modified, because the two sides of a given loop are no longer equivalent if an electron “sees” on one of them another electron and interacts with it. So the probability for one electron to hop from an Aharonov-Bohm cage to a nearby one no longer vanishes. However, this is an interaction-induced effective hopping, and it is by no means obvious that it could lead to a coherent metallic system in the usual sense. By contrast to lattices such as the dice lattice which also exhibit the Aharonov-Bohm cage phenomenon, we will now show that on \mathbb{Z}_2 lattices, and for a large class of electron-electron interactions, the local \mathbb{Z}_2 symmetry is still present. This puts some rather severe constraints on the amount of delocalization that interactions may induce for a finite density of electrons. Because of the local \mathbb{Z}_2 symmetry, only *pairs* of electrons are able to hop from one cage to an adjacent one. So on intuitive grounds, a true conducting state is expected only for attractive interactions, where it is also a superconductor. For repulsive interactions, we shall see that the system remains an incoherent metal.

For the sake of simplicity, we shall consider here a local Hubbard repulsive interaction between electrons. Generalization to a large class of interaction potentials is given in Section III B below. This interaction may be written as:

$$H_{\text{int}} = U \sum_{ij\alpha} \int_0^{l_{ij}} dx \psi_{ij\alpha\uparrow}^\dagger(x) \psi_{ij\alpha\downarrow}^\dagger(x) \psi_{ij\alpha\downarrow}(x) \psi_{ij\alpha\uparrow}(x) \quad (7)$$

Here $\psi_{ij\alpha\uparrow}^\dagger(x)$ is the second quantization electron creation operator at point x on the wire $\alpha = \{1, 2\}$ joining nodes i and j , with spin projection \uparrow along the quantization axis. Let us now introduce operators of creation and annihilation of an electron in a given Aharonov-Bohm cage state: $c_{i\tau}^\dagger(x)$ and $c_{i\tau}(x)$ respectively, τ referring to the spin projection. They satisfy the following relations:

$$U_i c_{i\tau}^\dagger(x) U_i = -c_{i\tau}^\dagger(x) \quad (8)$$

$$U_j c_{i\tau}^\dagger(x) U_j = c_{i\tau}^\dagger(x) \quad i \neq j \quad (9)$$

which show that these operators $c_{i\tau}^\dagger(x)$ and $c_{i\tau}(x)$ carry a non-trivial local \mathbb{Z}_2 charge. The precise correspondence between the initial operators $\psi_{ij\alpha\uparrow}^\dagger(x)$ and the cage operators $c_{i\tau}^\dagger(x)$ is as follows:

$$\psi_{ij\alpha\tau}^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\theta_{ij\alpha}(x)} c_{i\tau}^\dagger(x) + e^{-i\theta_{j\alpha}(x)} c_{j\tau}^\dagger(x) \right) \quad (10)$$

where $\theta_{ij\alpha}(x) = \frac{e}{\hbar} \int_i^x \mathbf{A}_{ij\alpha} \cdot d\mathbf{r}$ is a line integral oriented from node i to node j . The local Hubbard interaction in

cage basis takes the following form:

$$\begin{aligned} \psi_{ij\alpha\uparrow}^\dagger(x)\psi_{ij\alpha\downarrow}^\dagger(x)\psi_{ij\alpha\downarrow}(x)\psi_{ij\alpha\uparrow}(x) = & \quad (11) \\ c_{i\uparrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}(x)c_{i\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}(x)c_{j\uparrow}(x) + & \quad [a] \\ c_{i\uparrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}(x)c_{i\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}(x)c_{j\uparrow}(x) + & \quad [b] \\ c_{i\uparrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}(x)c_{j\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}(x)c_{i\uparrow}(x) + & \quad [c] \\ c_{i\uparrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}(x)c_{j\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^\dagger(x)c_{j\downarrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}(x)c_{i\uparrow}(x) & \quad [d] \end{aligned}$$

Lines on the right-hand side represent respectively: an intra-cage Hubbard interaction [a], an inter-cage Hubbard interaction [b], a neighbor cage exchange process [c], a pair propagation process [d].

In the case of a one-dimensional chain of loops, these various processes may be visualized directly on the graph shown on Fig. 4.

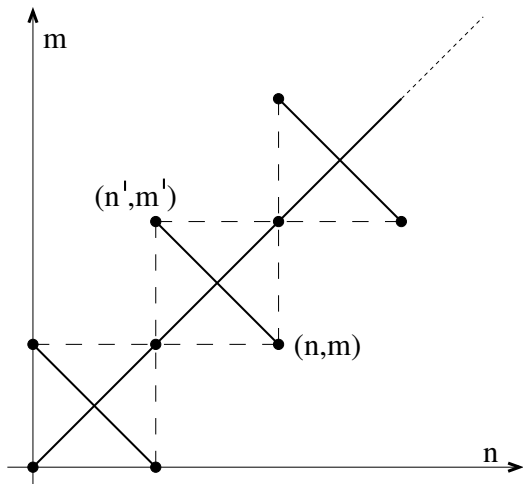


FIG. 4: In the case of Hubbard like interacting electrons, the only possible cage transitions preserving local \mathbb{Z}_2 symmetry can be plotted on the following graph (thin lines), where (n, m) and (n', m') indicate initial and final cage positions, corresponding to a term $c_n^\dagger c_{m'}^\dagger c_m c_n$. Dashed lines refer to possible non zero amplitude transitions, compatible with the local nature of two-electron interaction, but which are forbidden since they violate electron number parity conservation resulting from the local \mathbb{Z}_2 symmetry.

The main feature appearing in this new basis is that the parity of the total electron number in *each* Aharonov-Bohm cage is *separately* conserved. Because an electron in state $c_{i\tau}^\dagger(x)|0\rangle$ carries a non-trivial \mathbb{Z}_2 charge, but a pair $c_{i\uparrow}^\dagger(x)c_{i\downarrow}^\dagger(x)|0\rangle$ belongs to the identity representation of the local \mathbb{Z}_2 group, the previous statement simply shows that the local Hubbard interaction commutes with the local \mathbb{Z}_2 symmetry. In Section III B, we show that any pair potential interaction of the form $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ is compatible with the local \mathbb{Z}_2 symmetry provided $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ does not change when \mathbf{r} or \mathbf{r}' is replaced by its mirror image with respect to the axis joining its two nearest nodes. In a previous work, a similar statement was reached for a rather special case, namely a chain of rhombi in a tight-

binding description¹¹. The present formulation is much more general.

What are the consequences of this local symmetry on an interacting system? As in^{9,10}, let us first consider a pair of electrons, with the local Hubbard interaction. We have three possible situations. First, the two electrons may be located in two cages i and j which do not share common links, that is i and j are not nearest neighbors. Then they do not “see” each other and remain localized in their respective cages. A second possibility occurs when i and j are distinct but nearest neighbors. As term [c] in Eq. (11) above shows, the two electrons can exchange their cages, but such state remains localized under time evolution. Finally, when $i = j$, term [d] in Eq. (11) indicates that a delocalized two electron state is now possible in spite of the purely localized nature of the single particle spectrum and the repulsive character of the interaction.

Of course, the most interesting question is to consider a system with a finite electronic density. As we have seen, because of the local \mathbb{Z}_2 symmetry, only pairs of electrons can propagate in a \mathbb{Z}_2 network. In particular, the single electron propagator $-i\langle c_{i\tau}(x, t)c_{j\tau}^\dagger(x', t')\rangle$ vanishes when $i \neq j$, since it is not \mathbb{Z}_2 invariant, and it is very difficult to break spontaneously a local symmetry²¹. This shows that the low-energy behavior of an electron fluid on a \mathbb{Z}_2 network is *not* described by the Landau model of a Fermi liquid. As we shall see in section IV below, it corresponds most likely to a new form of incoherent metal. But at this stage, the most natural thing to check is whether a superconducting instability (induced by term [d] in Eq. (11)) occurs or not.

B. Mean-field analysis of superconducting instability

To begin this discussion, let us first consider a larger class of electron-electron interaction. The most general two-body potential interaction respecting the global spin rotation symmetry reads:

$$\begin{aligned} \hat{V} = \sum_{ij, i'j'} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\tau\tau'} \int_0^{l_{ij}} dx \int_0^{l'_{ij'}} dx' V_{ij, i'j'}^{\alpha\alpha'}(x, x') \\ \psi_{ij\alpha\uparrow}^\dagger(x)\psi_{i'j'\alpha'\downarrow}^\dagger(x')\psi_{i'j'\alpha'\downarrow}(x')\psi_{ij\alpha\uparrow}(x) \quad (12) \end{aligned}$$

In this sum, (ij) and $(i'j')$ are two pairs of nearest-neighbor nodes. As before, α (resp. α') labels one of the two links composing the loop (ij) (resp. $(i'j')$). Let us use the cage basis, defined in Eq. (10) to rewrite this interaction. For this purpose, the first step is to express the local electronic density as:

$$\begin{aligned} \psi_{ij\alpha\tau}^\dagger(x)\psi_{ij\alpha\tau}(x) = \frac{1}{2}(c_{i\tau}^\dagger(x)c_{i\tau}(x) + c_{j\tau}^\dagger(x)c_{j\tau}(x)) \\ + \frac{1}{2}(e^{-i\theta_{ij\alpha}}c_{i\tau}^\dagger(x)c_{j\tau}(x) + e^{-i\theta_{ji\alpha}}c_{j\tau}^\dagger(x)c_{i\tau}(x)) \end{aligned}$$

Because the flux through each elementary loop is half a flux quantum, $e^{-i\theta_{ij\alpha}} = -e^{-i\theta_{ij\bar{\alpha}}}$. The interaction (12) preserves the local \mathbb{Z}_2 symmetry if and only if the following conditions are satisfied:

$$V_{ij,i'j'}^{\alpha\alpha'}(x, x') = V_{ij,i'j'}^{\bar{\alpha}\bar{\alpha}'}(x, x') = V_{ij,i'j'}^{\alpha\bar{\alpha}'}(x, x') \quad (13)$$

provided the pairs (ij) and $(i'j')$ are distinct, and:

$$V_{ij,ij}^{\alpha\alpha'}(x, x') = V_{ij,ij}^{\bar{\alpha}\bar{\alpha}'}(x, x') \quad (14)$$

The first condition implies that

$$\sum_{\alpha} e^{-i\theta_{ij\alpha}} V_{ij,i'j'}^{\alpha\alpha'}(x, x') = 0$$

when (ij) and $(i'j')$ are distinct, and the second condition that

$$\sum_{\alpha, \alpha'} e^{-i\theta_{ij\alpha}} V_{ij,ij}^{\alpha\alpha'}(x, x') = 0$$

Therefore, all the terms which do not preserve the parity of the total electron number in each cage are eliminated. When both conditions (13), (14) on the interaction potential are satisfied, the interaction term (12) now becomes:

$$\begin{aligned} \hat{V} = & \sum_{ij,i'j'} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\tau\tau'} \int_0^{l_{ij}} dx \int_0^{l'_{ij}} dx' V_{ij,i'j'}^{\alpha\alpha'}(x, x') \\ & \times \left\{ : \left[c_{i\tau}^\dagger(x) c_{i\tau}(x) + c_{j\tau}^\dagger(x) c_{j\tau}(x) \right] \left[c_{i'\tau'}^\dagger(x') c_{i'\tau'}(x') + c_{j'\tau'}^\dagger(x') c_{j'\tau'}(x') \right] : \right. \\ & \left. + \delta_{ij,i'j'} : \left[e^{-i\theta_{ij\alpha}} c_{i\tau}^\dagger(x) c_{j\tau}(x) + e^{-i\theta_{j\bar{\alpha}}} c_{j\tau}^\dagger(x) c_{i\tau}(x) \right] \left[e^{-i\theta_{ij\alpha'}} c_{i'\tau'}^\dagger(x') c_{j'\tau'}(x') + e^{-i\theta_{j\bar{\alpha}'}} c_{j'\tau'}^\dagger(x') c_{i'\tau'}(x') \right] : \right\} \end{aligned} \quad (15)$$

We have used the standard notation $: \mathcal{O} :$ for the normal ordering of the operator \mathcal{O} .

Let us now consider the possibility of a superconducting instability. In a variational approach, we would use a Hartree-Fock-Bogoliubov trial state. In the presence of pairing, the average kinetic energy increases, so it would have to be compensated by a lowering in the average interaction energy. As usual, this quantity involves averages of the form $\langle c^\dagger c \rangle \langle c^\dagger c \rangle$ and of the form $\langle c^\dagger c^\dagger \rangle \langle c c \rangle$. In the spirit of a mean field theory, we shall keep only the latter terms. Once again we also argue that the local \mathbb{Z}_2 symmetry is not broken, even in the hypothetical superconducting state. Physically, this is reasonable since the size of the Aharonov-Bohm cages being finite, there is a finite gap between the \mathbb{Z}_2 sector with $\epsilon_i = 1$ and the sector with $\epsilon_i = -1$. As discussed below, this gap can be as large as a few Kelvin degrees for a GaAs \mathbb{Z}_2 network. With an unbroken \mathbb{Z}_2 symmetry, the superconducting order parameter $\langle c_{i\tau}^\dagger(x) c_{j\tau}^\dagger(x') \rangle$ vanishes if $i \neq j$.

Let us first consider a singlet pairing. This leads to:

$$\begin{aligned} \langle c_{i\uparrow}^\dagger(x) c_{i\uparrow}^\dagger(x') \rangle &= \langle c_{i\downarrow}^\dagger(x) c_{i\downarrow}^\dagger(x') \rangle = 0 \\ \langle c_{i\uparrow}^\dagger(x) c_{i\downarrow}^\dagger(x') \rangle &= -\langle c_{i\downarrow}^\dagger(x) c_{i\uparrow}^\dagger(x') \rangle = \Delta_i(x, x') \end{aligned}$$

In this case, the local contribution of Cooper pairing to the trial potential energy is:

$$V_{ij,i'j'}^{\alpha\alpha'}(x, x') |e^{-\frac{i}{2}\theta_{ij\alpha}} \Delta_i(x, x') + e^{-\frac{i}{2}\theta_{j\bar{\alpha}}} \Delta_j(x, x')|^2 \quad (16)$$

In the case of triplet pairing, we have a complex vector $\Delta_j(x, x')$ defined by:

$$\begin{aligned} \Delta_j^x(x, x') &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle -c_{j\uparrow}^\dagger(x) c_{j\uparrow}^\dagger(x') + c_{j\downarrow}^\dagger(x) c_{j\downarrow}^\dagger(x') \rangle \\ \Delta_j^y(x, x') &= \frac{i}{\sqrt{2}} \langle c_{j\uparrow}^\dagger(x) c_{j\uparrow}^\dagger(x') + c_{j\downarrow}^\dagger(x) c_{j\downarrow}^\dagger(x') \rangle \\ \Delta_j^z(x, x') &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle c_{j\uparrow}^\dagger(x) c_{j\downarrow}^\dagger(x') + c_{j\downarrow}^\dagger(x) c_{j\uparrow}^\dagger(x') \rangle \end{aligned}$$

For triplet pairing, the orbital angular momentum of a Cooper pair is odd, so $\Delta_j(x, x') = -\Delta_j(x', x)$. It is simple to check that the above expression (16) still applies up to replacing the complex scalar $\Delta_j(x, x')$ by the complex vector $\Delta_j(x, x')$.

To conclude, we show that the part of the trial energy which is directly sensitive to a \mathbb{Z}_2 invariant Cooper pairing amplitude is positive for a positive interaction potential compatible with the local \mathbb{Z}_2 symmetry. So, at least in a mean-field picture, a superconducting instability cannot occur. This statement was not a priori obvious, given the existence of delocalized states for the two-particle problem, where both particles are located in the same cage at any time, even with a repulsive interaction.

C. Discussion for networks in semiconductor heterostructures

For applications to real systems, it is important to present some order of magnitude estimates. For wires etched on a 2D electron gas at a GaAs/GaAlAs interface, with a typical carrier density of $3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ and a transverse width $w = 100 \text{ nm}$, the number of transverse conduction channels $N = k_F w / \pi$ is around 4. For a regular network of single channel wires, we have investigated interaction effects on the low-energy scattering matrix at the nodes²². The renormalization of the transmission coefficient $T(\Lambda)$ as a function of a typical energy scale Λ is given by:

$$T(\Lambda) = \frac{T_0(\Lambda/\Lambda_0)^{2\alpha}}{R_0 + T_0(\Lambda/\Lambda_0)^{2\alpha}}, \quad (R_0 + T_0 = 1) \quad (17)$$

where $\alpha = \tilde{U}(k \rightarrow 0)/(hv_F)$ is proportional to the Fourier transform of the interaction potential in the long wavelength limit. This result corresponds to nodes having a complete symmetry under any permutation of the incident wires. Note that it has the same form as for a single elastic scatterer in a Luttinger liquid^{23,24}, or a single crossing connecting several semi-infinite Luttinger liquids²⁵. For a single wire of width w and length L , $\tilde{U}(k \rightarrow 0) \simeq \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \ln(2L/w)$. Choosing typical values as $m^* = 0.067 m_e$ and $\epsilon_r = 12.9$ for GaAs, $L = 2 \mu\text{m}$ and $w = 100 \text{ nm}$, we obtain $\alpha = 0.4$ which is a rather large value. This shows that the Coulomb energy is nearly as large as the kinetic energy of conduction electrons.

As usual for 1D electron systems with repulsive interactions, the leading instability occurs because of the divergence of the static charge and spin susceptibilities at the wave-vector $q = 2k_F$ and favors the formation of a spin-density wave. A derivation of this mean-field transition on a \mathbb{Z}_2 network is sketched in Appendix A. But with $\alpha = 0.4$, the critical temperature for the onset of this mean-field instability is not much smaller than the Fermi energy (see for instance Eq. (A1)), which shows that the system is still in a one-dimensional regime. Indeed, the cross-over from one to two dimensions takes place when the 1D thermal length $L_T = hv_F/k_B T$ becomes comparable to the distance L between nearest-neighbor nodes. In other words, the corresponding energy scale $k_B T$ should be as low as the energy level splittings inside Aharonov-Bohm cages, that is of the order of hv_F/L . Since $\lambda_F = 50 \text{ nm}$ ($L/\lambda_F = 40$), the cross-over to 2D behavior appears at an energy scale one order of magnitude smaller than the mean-field Peierls instability scale. In practice however, because of the small effective mass in GaAs, the low energy scale hv_F/L can be of the order of a few Kelvin degrees. This scale sets also the order of magnitude of the \mathbb{Z}_2 gap already mentioned.

It is well-known that in a purely 1D system, fluctuations in the Peierls and in the Cooper channels have a tendency to neutralize each other, and the result is in general some kind of Luttinger liquid²⁶. As mean-field

analysis fails to predict such a behavior, we should therefore revisit the result of the previous section using an approach which is able to treat both Peierls and Cooper channels on an equal footing. This is exactly what the renormalization group (RG) is able to provide, at least in the weak interaction limit. To be completely honest, it is not at all clear that a perturbative RG can give reliable quantitative estimates when α is as large as 0.4. But for the sake of establishing the presence or the absence of an instability, we expect it to produce a valid qualitative picture, specially in the case, as we shall see below, where it predicts an instability to a gapped state already for small coupling. It might happen, as in some Hubbard models with extended internal symmetries²⁸, that some features of the gapped phase are modified when the coupling becomes large compared to the electronic bandwidth. But in this example, the gap never closes when the system evolves from weak to strong coupling.

IV. RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS

A. Low-energy model

A complete RG analysis for our original system would be very complicated, because of the absence of translation invariance inside Aharonov-Bohm cages. In particular, network nodes induce Friedel density oscillations in the electron fluid, which renormalize the associated single electron scattering matrices in the presence of interactions. This mechanism is precisely at the origin of the scaling shown in Eq. (17)^{22,24,25}. Physically, this interaction effect shows that wires have a tendency to become disconnected at low energies, which stops below the cross-over into the 2D regime. As shown previously²², an electronic wire network becomes an insulator for commensurate filling factors, or simply highly resistive, with a weakly dispersive band crossing the Fermi level for generic filling factors. However, for a system with local \mathbb{Z}_2 symmetry, this renormalization mostly modifies the internal dynamics inside a given Aharonov-Bohm cage, and not the general structure of the electron-electron interaction as it appears in Eq. 11. At this point, we shall now assume that details of this internal dynamics inside Aharonov-Bohm cages do not play much role in the analysis of interaction effects at low energy, provided the local \mathbb{Z}_2 symmetry manifested in Eq. (11) is still respected. The validity of this assumption will be examined in more detail at the end of this section, once the results of the RG treatment are available.

This leads us to consider the following model, where each Aharonov-Bohm cage is replaced by an infinite 1D Luttinger liquid, described by the electronic fields $c_{i\tau}^\dagger(x)$, $c_{i\tau}(x)$, i being a cage label and τ the spin projection. The internal energy levels of this collection of modified Aharonov-Bohm cages is naturally described by the following kinetic Hamiltonian:

$$H_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_j \sum_{\tau} : \left[c_{R,j,\tau}^{\dagger}(x) \frac{1}{i} \frac{d}{dx} c_{R,j,\tau}(x) - c_{L,j,\tau}^{\dagger}(x) \frac{1}{i} \frac{d}{dx} c_{L,j,\tau}(x) \right] : \quad (18)$$

where hv_F has been set equal to unity. As usual, right and left moving fields have been introduced, labelled by R and L respectively, so that $c_{i\tau}^{\dagger}(x) = c_{R,i,\tau}^{\dagger}(x) + c_{L,i,\tau}^{\dagger}(x)$. Note that replacing finite Aharonov-Bohm cages by infinite ones is only valid in the 1D regime, when we can neglect the discrete nature of the single particle spectrum. The physical motivation for doing this is that as discussed in the previous section, the typical interaction scale is larger than the \mathbb{Z}_2 gap in present experiments. On the other hand, the perturbative RG used here requires

small interactions in comparison to the single electron bandwidth. Because of the large value of L/λ_F , these two requirements are mutually compatible.

Two nearby cages i and j are coupled by a two-body interaction subjected to the following constraints: it has to preserve the local \mathbb{Z}_2 symmetry or equivalently, to conserve the parity of the total number of electrons in each cage, and to simplify the treatment, to preserve also the translational symmetry within cages. Both requirements are satisfied by the following Hubbard-like interaction:

$$H_{\text{int}} = U \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{i,j} : \left[c_{i\uparrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}(x) c_{i\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}(x) c_{j\uparrow}(x) + c_{i\uparrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}(x) c_{i\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}(x) c_{j\uparrow}(x) \right. \\ \left. + c_{i\uparrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}(x) c_{j\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}(x) c_{i\uparrow}(x) + c_{i\uparrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}(x) c_{j\uparrow}(x) + c_{j\uparrow}^{\dagger}(x) c_{j\downarrow}^{\dagger}(x) c_{i\downarrow}(x) c_{i\uparrow}(x) \right] :$$

Using the decomposition $c_{i\tau}^{\dagger}(x) = c_{R,i,\tau}^{\dagger}(x) + c_{L,i,\tau}^{\dagger}(x)$ generates many terms, among which we shall neglect two subsets. The first subset contains all the purely forward scattering processes on a given side of the Fermi-surface, i.e. of the form $c_R^{\dagger} c_R^{\dagger} c_R c_R$ or $c_L^{\dagger} c_L^{\dagger} c_L c_L$. In perturbation theory, they do not give singular terms in the low-energy limit, so we shall ignore them. The second subset contains all Umklapp terms, of the form $c_R^{\dagger} c_R^{\dagger} c_L c_R$ (resp. $c_R^{\dagger} c_R^{\dagger} c_L c_L$) which are relevant only for a filled (resp. half-filled) single electron band. The most interesting terms are of the type $c_R^{\dagger} c_L^{\dagger} c_L c_R$ which induce logarithmic divergences to the dressed two-particle interaction in the

low energy limit. These terms are adequately treated by the renormalization group. Introducing now generalized charge and spin densities defined as:

$$\rho_{R(L),n,n'}(x) = \sum_{\tau,\tau'} c_{R(L),n,\tau}^{\dagger}(x) \delta_{\tau,\tau'} c_{R(L),n',\tau'}(x), \quad (19)$$

$$\mathbf{S}_{R(L),n,n'}(x) = \sum_{\tau,\tau'} c_{R(L),n,\tau}^{\dagger}(x) \boldsymbol{\sigma}_{\tau,\tau'} c_{R(L),n',\tau'}(x), \quad (20)$$

where $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ are the usual Pauli matrices, we may finally write the interaction term in the form:

$$H_{\text{int}} = U \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_n : \left[2\rho_{R,n,n}(x) \rho_{L,n,n}(x) - 2\mathbf{S}_{R,n,n} \mathbf{S}_{L,n,n} \right. \\ \left. + \rho_{R,n,n}(x) \rho_{L,n+1,n+1}(x) - \mathbf{S}_{R,n,n} \mathbf{S}_{L,n+1,n+1} + \rho_{R,n+1,n+1}(x) \rho_{L,n,n}(x) - \mathbf{S}_{R,n+1,n+1} \mathbf{S}_{L,n,n} \right. \\ \left. + \rho_{R,n+1,n}(x) \rho_{L,n,n+1}(x) - \mathbf{S}_{R,n+1,n} \mathbf{S}_{L,n,n+1} + \rho_{R,n,n+1}(x) \rho_{L,n+1,n}(x) - \mathbf{S}_{R,n,n+1} \mathbf{S}_{L,n+1,n} \right. \\ \left. + \rho_{R,n+1,n}(x) \rho_{L,n+1,n}(x) - \mathbf{S}_{R,n+1,n} \mathbf{S}_{L,n+1,n} + \rho_{R,n,n+1}(x) \rho_{L,n,n+1}(x) - \mathbf{S}_{R,n,n+1} \mathbf{S}_{L,n,n+1} \right] : . \quad (21)$$

Here, we have chosen a particular 1D geometry, namely a chain of loops. Although the RG approach could be ap-

plied to any regular lattice of Luttinger liquid-like cages, we shall from now on focus on this example. The re-

sults we shall present shortly suggest that the large scale lattice geometry does not affect much the physical properties of such a system.

B. Renormalization group equations

We shall now briefly derive one-loop RG equations. We refer the reader to Ref. 27 and references therein for general details about the RG technique. Here we focus on what happens in the space of cage positions, since this is

what makes the originality of our work. The microscopic Hamiltonian (18-21) serves as the high energy initial condition of RG flows. The kinetic part of the Hamiltonian is unrenormalized at one-loop order, while the interaction part flows. During the renormalization process, the interactions will develop a non-trivial dependence in the cage positions. The local \mathbb{Z}_2 -symmetry as well as the translational symmetry of the initial Hamiltonian (18-21) will remain symmetries of the renormalized Hamiltonian. As a consequence, the flowing Hamiltonian is constrained to be of the following form

$$H_0(\Lambda) = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi} \sum_n \sum_{\tau} : \left[kc_{R,n,\tau}^{\dagger}(k)c_{R,n,\tau}(k) - kc_{L,n,\tau}^{\dagger}(k)c_{L,n,\tau}(k) \right] : \quad (22)$$

$$H_{\text{int}}(\Lambda) = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dq}{2\pi} \sum_n : \left\{ \sum_{\gamma \neq 0} \left[A_{\gamma}^c(\Lambda) \rho_{R,n,n}(q) \rho_{L,n+\gamma,n+\gamma}(-q) + A_{\gamma}^s(\Lambda) \mathbf{S}_{R,n,n}(q) \mathbf{S}_{L,n+\gamma,n+\gamma}(-q) \right. \right. \quad (23)$$

$$+ B_{\gamma}^c(\Lambda) \rho_{R,n+\gamma,n}(q) \rho_{L,n,n+\gamma}(-q) + B_{\gamma}^s(\Lambda) \mathbf{S}_{R,n+\gamma,n}(q) \mathbf{S}_{L,n,n+\gamma}(-q)$$

$$+ C_{\gamma}^c(\Lambda) \rho_{R,n+\gamma,n}(q) \rho_{L,n+\gamma,n}(-q) + C_{\gamma}^s(\Lambda) \mathbf{S}_{R,n+\gamma,n}(q) \mathbf{S}_{L,n+\gamma,n}(-q) \left. \right]$$

$$+ D^c(\Lambda) \rho_{R,n,n}(q) \rho_{L,n,n}(-q) + D^s(\Lambda) \mathbf{S}_{R,n,n}(q) \mathbf{S}_{L,n,n}(-q) \left. \right\} : .$$

Note that the hermiticity of the Hamiltonian implies that $C_{-\gamma}^{c(s)} = C_{\gamma}^{c(s)}$, and the Right/Left symmetry gives $A_{-\gamma}^{c(s)} = A_{\gamma}^{c(s)}$ and $B_{-\gamma}^{c(s)} = B_{\gamma}^{c(s)}$. The action of the four types of locally \mathbb{Z}_2 -symmetric couplings A_{γ} , B_{γ} , C_{γ} and D (forgetting about their charge/spin nature) are represented in Fig. 5.

In Eqs. (22-23) we used the Fourier transform of the field operators which is defined by

$$c_{R(L),n,\tau}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ikx) c_{R(L),n,\tau}(x). \quad (24)$$

The Fourier transform of the generalized charge density, for example, is given by

$$\rho_{R(L),n,n'}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(iqx) \rho_{R(L),n,n'}(x) \quad (25)$$

$$= \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi} \sum_{\tau} c_{R(L),n,\tau}^{\dagger}(k+q) c_{R(L),n',\tau}(k),$$

All momenta have been restricted to be smaller in absolute value than the cut-off Λ , in order to regularize

ultra-violet divergences. Note that the Fermi momentum has been set to zero, which is allowed since we do not consider Umklapp processes. We have not denoted any momentum dependence of the interactions, because in the RG treatment, all momenta are taken at the Fermi surface.

The high-energy Hamiltonian is defined at scale Λ_0 , and the initial conditions of the RG flow, at this scale, are found from (21) and read

$$\begin{aligned} A_{\gamma}^c(\Lambda_0) &= B_{\gamma}^c(\Lambda_0) = C_{\gamma}^c(\Lambda_0) = U(\delta_{\gamma,1} + \delta_{\gamma,-1}) \\ A_{\gamma}^s(\Lambda_0) &= B_{\gamma}^s(\Lambda_0) = C_{\gamma}^s(\Lambda_0) = -U(\delta_{\gamma,1} + \delta_{\gamma,-1}) \\ D^c(\Lambda_0) &= 2U \\ D^s(\Lambda_0) &= -2U \end{aligned} \quad (26)$$

The interactions are renormalized both by particle-hole and particle-particle contributions. Written with the dimensionless scale $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$, the RG equations are

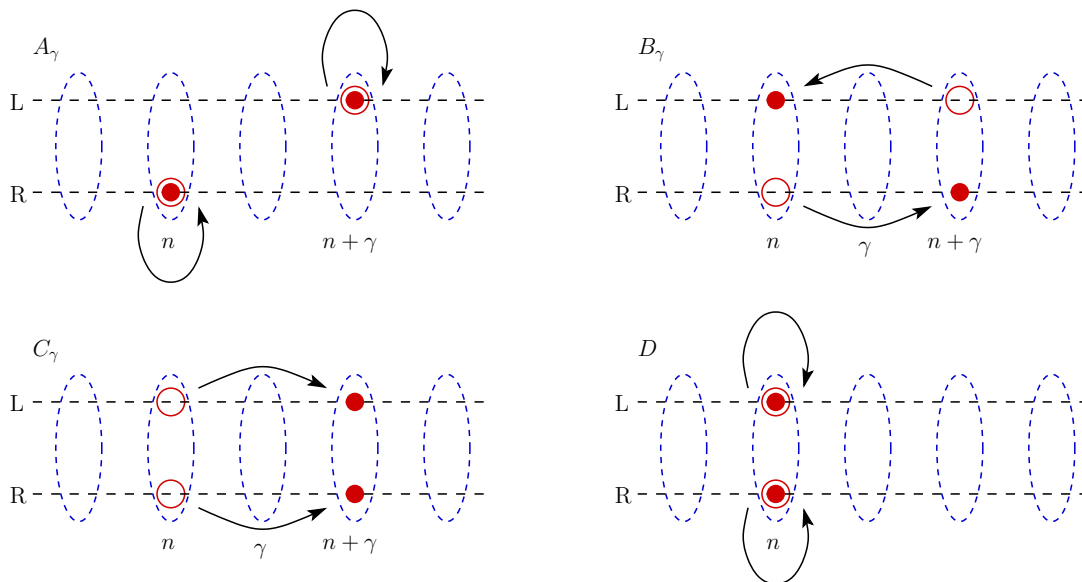


FIG. 5: Schematic representation of the four interactions compatible with the local \mathbb{Z}_2 -symmetry, given in Eq. (23). Each dashed ellipse represents a cage. An empty (full) circle represents a destruction (creation) operator. Coupling A is an inter-cage interaction, coupling B a cage exchange, coupling C a pair hopping, and coupling D an intra-cage interaction.

$$\partial_l A_\gamma^{c(s)} = \left[A_\gamma * A_\gamma + C_\gamma * C_{-\gamma} \right]_{\text{ph}}^{c(s)} + \left[A_\gamma * A_\gamma + B_\gamma * B_{-\gamma} \right]_{\text{pp}}^{c(s)}, \quad (27)$$

$$\partial_l B_\gamma^{c(s)} = \left[2D * B_\gamma + \sum_{\beta \neq 0, \gamma} B_\beta * B_{\gamma-\beta} \right]_{\text{ph}}^{c(s)} + \left[B_\gamma * (A_\gamma + A_{-\gamma}) \right]_{\text{pp}}^{c(s)}, \quad (28)$$

$$\partial_l C_\gamma^{c(s)} = \left[C_\gamma * (A_\gamma + A_{-\gamma}) \right]_{\text{ph}}^{c(s)} + \left[2D * C_\gamma + \sum_{\beta \neq 0, \gamma} C_\beta * C_{\gamma-\beta} \right]_{\text{pp}}^{c(s)}, \quad (29)$$

$$\partial_l D^{c(s)} = \left[D * D + \sum_{\beta \neq 0} B_\beta * B_{-\beta} \right]_{\text{ph}}^{c(s)} + \left[D * D + \sum_{\beta \neq 0} C_\beta * C_{-\beta} \right]_{\text{pp}}^{c(s)}. \quad (30)$$

In these flow equations, we have denoted

$$\left[G_1 * G_2 \right]_{\text{ph}}^c = \frac{1}{2\pi} \left(G_1^c G_2^c + 3G_1^s G_2^s \right), \quad (31)$$

$$\left[G_1 * G_2 \right]_{\text{ph}}^s = \frac{1}{2\pi} \left(G_1^s G_2^c + G_1^c G_2^s + 2G_1^s G_2^s \right), \quad (32)$$

for the particle-hole channel, and

$$\left[G_1 * G_2 \right]_{\text{pp}}^c = -\frac{1}{2\pi} \left(G_1^c G_2^c + 3G_1^s G_2^s \right), \quad (33)$$

$$\left[G_1 * G_2 \right]_{\text{pp}}^s = -\frac{1}{2\pi} \left(G_1^s G_2^c + G_1^c G_2^s - 2G_1^s G_2^s \right), \quad (34)$$

for the particle-particle channel. The RG flow equations can be simplified further, but we shall leave them in the form (27-30) because it clearly shows the origin of all one-loop contributions. As an illustration, we show in Fig. 6 the bubbles renormalizing the pair hopping term C_γ .

C. Numerical solution of the Renormalization Group equations

1. Strong coupling Hamiltonian

The flow equations (27-30) cannot be solved analytically, but one can integrate them numerically with standard numerical routines such as Runge-Kutta of order 4. One nice feature of the local \mathbb{Z}_2 -symmetry is that it constrains interactions in such a way that they can depend on at most one cage index. Thus the number of equations that have to be solved only grows linearly with the total number of cages N , allowing to consider large system sizes.

With the initial conditions (26), we found that the system goes to strong coupling. The flow diverges at a critical RG scale l_c , indicating a phase transition at a critical

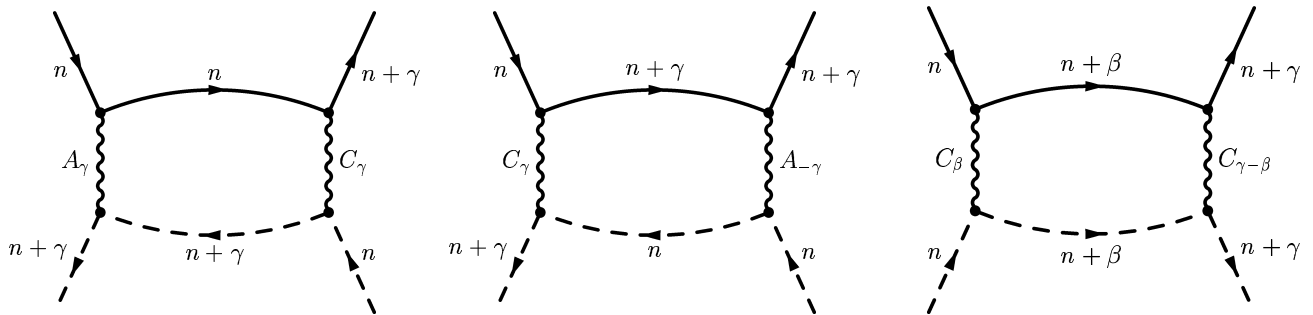


FIG. 6: Graphs renormalizing the pair hopping term C_γ . The left and middle graphs are particle-hole bubbles, and the right one is a particle-particle bubble. For the latter, β is summed over, and when $\beta = 0$ or γ , the quantity C_0 that appears should be understood as D , so as to yield Eq. (29).

temperature of order of magnitude $T_c = \Lambda_0 \exp(-l_c)$. Apart from finite-size corrections, the numerical solution of the flow reaches the following fixed direction

$$A_\gamma^c = A_\gamma^s = 0, \quad (35)$$

$$B_\gamma^c = D^c = -3B_\gamma^s = -3D^s > 0, \quad (36)$$

$$C_\gamma^c = C_\gamma^s = 0, \quad (37)$$

for any value of γ . The corresponding effective interaction Hamiltonian can be written (going back to real space and setting the strength of the interaction to a value g)

$$H_{\text{int}}^{\text{eff}} = g \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{n,\gamma} : \left[3\rho_{R,n+\gamma,n}(x)\rho_{L,n,n+\gamma}(x) - \mathbf{S}_{R,n+\gamma,n}(x)\mathbf{S}_{L,n,n+\gamma}(x) \right] : \quad (38)$$

This Hamiltonian has an $SU(N)$ symmetry in the cage indices, and it corresponds to a particle-hole pairing in the triplet channel. Consequently the system undergoes a phase transition to a spin-density wave state, as was predicted by our mean-field analysis (see appendix A). This is more transparent on the equivalent form of (38):

$$H_{\text{int}}^{\text{eff}} = -2g \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{m,n} \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} : \left(c_{R,m,\mu}^\dagger(x) \boldsymbol{\sigma}_{\mu,\mu'} c_{L,m,\mu'}(x) \right) \left(c_{L,n,\nu}^\dagger(x) \boldsymbol{\sigma}_{\nu,\nu'} c_{R,n,\nu'}(x) \right) : \quad (39)$$

since it is bilinear in the $2k_{\text{F}}$ Fourier component of the local spin density. A more detailed analysis of this phase, including a discussion of its collective modes can be found in Ref. 27.

The RG calculation however gives a much smaller value of the critical temperature than the mean-field calculation. We have computed the critical temperature given by the full flow equations (27-30), as well as for the RPA approximation of these, which consists in neglecting all particle-particle contributions. We found the following numerical result

$$l_c(\text{RG}) \simeq \frac{1.33}{U} \quad \text{and} \quad l_c(\text{RPA}) \simeq \frac{0.64}{U}. \quad (40)$$

For an initial interaction $U = 0.1$, this gives a ratio $T_c(\text{RG})/T_c(\text{RPA}) \simeq 10^{-3}$, which is very small. The RPA thus overestimates the critical temperature by three orders of magnitude for $U = 0.1$. For the typical value $\alpha = 0.4$ ($U = 2\pi\alpha$) estimated in GaAs networks, this reduction effect is not as dramatic, since here we obtain: $T_c(\text{RG})/T_c(\text{RPA}) \simeq 0.76$. This gives further support to replacing finite Aharonov-Bohm cages by infinite ones in our simplified model, since the energy scale which emerges from the RG treatment is still in the 1D regime, for a typical choice of parameters such as $L/\lambda_{\text{F}} = 40$.

2. Intermediate energy regime

Another feature of the RPA is that the pair hopping terms $C^{c(s)}$ remain nearest neighbor all along the flow, as can be inferred from Eq. (29), when neglecting the particle-particle contribution. This is obviously not the case any more for the full RG equations. As the pair hopping terms are the only processes that can lead to a conducting behavior, it is natural to study what happens to them during the flow, before they get completely suppressed by the spin-density wave.

We found numerically that, except at the very beginning of the flow, the pair hopping terms are very well fitted by the following law

$$C_\gamma^{c(s)}(l) = (-1)^\gamma \Gamma^{c(s)}(l) \exp[-\gamma/\xi^{c(s)}(l)]. \quad (41)$$

This shows the incoherent nature of these pair hopping processes. As an illustration, Fig. 7 shows $\ln |C_\gamma^c(l=1)|$ as a function of γ , for $N = 128$ cages and interaction strength $U = 0.1$. We have performed such fits for many values of l so as to extract the scale dependence of the quantities $\Gamma^{c(s)}(l)$ and $\xi^{c(s)}(l)$ defined in Eq. (7). The results for the charge and spin couplings are nearly identical, so that we only show the behavior of the charge quantities, see Figs. 8 and 9. From Fig. 8, it is clear that the pair hopping is suppressed during the flow, but there is an intermediate energy regime ($2 \lesssim l \lesssim 12$) where the decrease rate of the pair hopping is not too large. Furthermore, we see in Fig. 9 that the typical range of

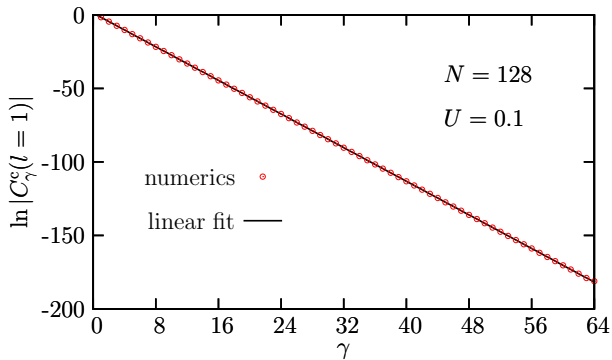


FIG. 7: The numerical results of $\ln |C_\gamma^c(l=1)|$ as a function of γ , for $N = 128$ cages and initial interaction $U = 0.1$, are perfectly fitted by a straight line.

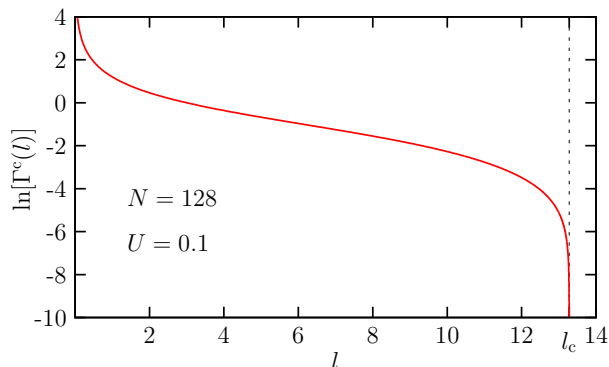


FIG. 8: Evolution of the strength of the interaction $C_\gamma^c(l)$ as a function of the RG scale l , for $N = 128$ cages and initial interaction $U = 0.1$. The flow stops at the critical scale l_c denoted by a dashed line.

the pair hopping increases during the flow, but it does not exceed one lattice spacing. The pair hopping thus remains local, contrarily to the cage exchange terms B_γ which become of infinite range during the flow, as was explained in the previous subsection.

D. Validity of the simplified model

An important question arises: when can the Friedel density oscillations be ignored? In a real system, two physical processes are in competition: the wire disconnection at network junctions due to the S -matrix renormalization, and the SDW instability discussed earlier. In order to estimate the typical energy scale of wire disconnection, we use Eq. (17) and take the point where both terms in the denominator are of the same order of magnitude.

$$k_B T_c(S) \simeq E_F \left(\frac{R_0}{T_0} \right)^{1/2\alpha} \quad (42)$$

The simplified model discussed in this section gives a faithful description of the initial \mathbb{Z}_2 network only if the

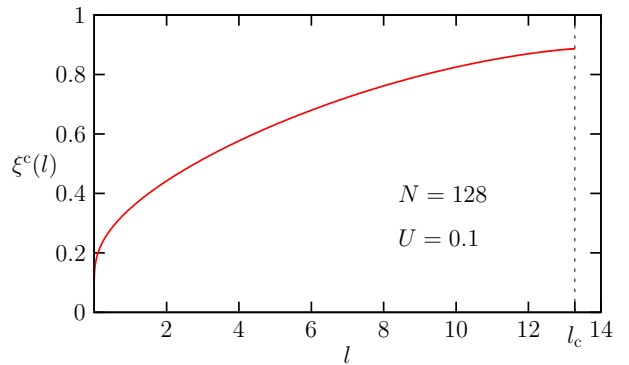


FIG. 9: Evolution of the range of the interaction $C_\gamma^c(l)$ as a function of the RG scale l , for $N = 128$ cages and interaction strength $U = 0.1$. The flow stops at the critical scale l_c denoted by a dashed line.

typical energy scale for the SDW instability is larger than $T_c(S)$. From (40), we have:

$$k_B T_c(\text{RG}) \simeq E_F \exp\left(-\frac{1.33}{U}\right) \quad (43)$$

This gives a rather precise criterion, namely:

$$\frac{R_0}{T_0} < \exp\left(-\frac{1.33}{\pi}\right) \simeq 0.655 \quad (44)$$

Note that because of the one loop RG approximation used for both mechanisms (i.e scattering on Friedel oscillations, and SDW instability), this criterion is independent of the interaction strength, provided it is small compared to the electronic Fermi energy. We may say that it is of a purely geometric nature, since it mostly depends on the amount of electronic backscattering induced by the network nodes. For an illustration, let us consider the two types of node geometries depicted on Fig. 3. For single mode wires, we have found that the lowest values of the ratio R_0/T_0 for perfectly symmetric X or Y junctions are equal respectively to 1 and 1/4. So changing the junction type from X (Fig. 3 a)) to Y (Fig. 3 b)) could affect deeply the nature of the low-energy state.

In the case of a single 1D quantum wire, the RG approach gives a vanishing transition temperature and the spin density wave is replaced by a Luttinger liquid fixed point at low energy. For \mathbb{Z}_2 networks in the regime where $T_c(\text{RG}) > T_c(S)$, inter-cage interaction processes destroy this Luttinger liquid, and because of the flow to strong coupling, most elementary excitations acquire a gap of the order $T_c(\text{RG})$. In the other regime, ($T_c(\text{RG}) < T_c(S)$), our simplified model discarding Friedel oscillations cannot capture the low energy physics below $T_c(S)$. Below this scale, the network “breaks” into independent disconnected links, which are expected to behave as independent finite segments of Luttinger liquids.

How could we distinguish between these two situations in real experiments? It may not be very easy at a qualitative level, just looking at transport measurements. Re-

sistivity is expected to rise sharply below the largest temperature scale between $T_c(\text{RG})$ and $T_c(\text{S})$, but for very different reasons in each case. If $T_c(\text{RG}) > T_c(\text{S})$, the single electron spectrum is gapped, and charge transport is provided only via a single charge collective mode, which is likely to be quite sensitive to pinning by random impurities. If $T_c(\text{RG}) < T_c(\text{S})$, the disconnection of the network into independent segments clearly induces a very high resistivity. The difference between the two situations could be evidenced by *non-linear* dc-transport. Indeed, in the former situation, a pinned spin-density wave can be depinned by a large enough electric field, and should lead to a large non-linear dc conductivity above a finite threshold value for the driving field. In the later case, possible non-linear effects on the disconnection mechanism have not been investigated to our knowledge. But it seems unlikely that they would yield a sharp threshold as in the case of collective depinning.

The above discussion shows that it would be crucial to estimate the ratio R_0/T_0 for a given sample. In present experiments, although the number of channels N_{ch} is low (about five), it is not exactly one. So we have a $Z \times N_{\text{ch}}$ conduction matrix at each node connected to Z nearest neighbors. This clearly calls for an extension of the theory to the case of multichannel wires, which goes beyond the scope of the present work. But even for a strictly single channel network, a direct experimental determination of R_0/T_0 may not be straightforward. In a dc transport measurement of an *ideal* system, the Landauer approach shows that the resistivity is dominated by the contacts between the network and the outer current leads. As shown in²², R_0/T_0 controls the dispersion of the mini energy bands associated to the lattice superstructure. If R_0/T_0 is small, these bands are weakly dispersive, and the effect of static random impurities, always present in a real system, is stronger than for a large value of R_0/T_0 . But in general, we do not have an independent measurement of the disorder strength. So at this stage, the main prediction is that some \mathbb{Z}_2 networks should develop a SDW instability and some others break into independent disconnected segments at low energy. Although the mathematical criterion (44) is quite precise and simple, it may be difficult *in practise* to decide if a given sample will fall in one or the other class without actually doing the experiment.

V. CONCLUSION

In this paper, we have studied a class of networks (\mathbb{Z}_2 networks) for which all single electron energy eigenstates are localized in Aharonov-Bohm cages when an external magnetic field corresponding to half a flux quantum per loop is applied. The particularity of these networks (in comparison to other geometries showing Aharonov-Bohm cages such as the dice lattice), is the presence of a large group of local \mathbb{Z}_2 symmetries, which correspond to reversing the electronic current in all the loops adja-

cent to a given node. Interestingly, these symmetries are preserved in the presence of a large class of interaction potentials, including the Hubbard local interaction. The conserved quantum numbers associated to this symmetry are simply the parity of the total electron number in each Aharonov-Bohm cage. Because of this strong constraint, only pairs of electron can tunnel from one cage to another.

A first consequence, assuming that the local \mathbb{Z}_2 symmetry cannot be spontaneously broken, is that such a system is *never* a Landau Fermi liquid, since the single electron propagator is short ranged in space. This establishes a qualitative difference between \mathbb{Z}_2 networks and geometries such as the dice lattice. In the latter case, Aharonov-Bohm cages are no longer protected by a symmetry in the interacting system, and therefore a Fermi liquid induced by interactions seems perfectly plausible. This extends the distinction established for bosonic systems for which a single boson condensate is always destroyed on a \mathbb{Z}_2 network, whereas it survives on the dice lattice in spite of a large discrete ground-state degeneracy.

Using a simple mean-field analysis, completed by an unbiased renormalization group (RG) approach, we first conclude that no superconducting instability is expected, in spite of the particle pair hopping term generated by electron-electron interactions preserving the local \mathbb{Z}_2 symmetry. The RG analysis shows that long-ranged pair hoppings are generated at intermediate energies, but the typical hopping range remains of the order of the lattice spacing. This time, these results are in sharp contrast with the bosonic counterpart, where the absence of a single boson condensate leaves room for a perfectly stable boson *pair* condensate¹¹, with very interesting properties such as topological ground-state degeneracies¹³. The main result given by the RG is the presence of a strong coupling low-energy fixed point, dominated by the long-distance fluctuations of a local spin density wave order parameter. The appearance of this fixed point can be attributed to the presence of Aharonov-Bohm cages, since in the model considered here, independent links would behave as Luttinger liquids.

We should note that the RG calculation has been done on a simplified model, where all the lattice points inside a given Aharonov-Bohm cage are equivalent. So we have not incorporated the physics of Friedel density oscillation induced by the nodes, which are known to renormalize the single-electron scattering matrices at these nodes, as long as the system is in the one dimensional regime above the energy scale $h\nu_{\text{F}}/L$, which can be as large as a few Kelvin degrees in a GaAs/GaAlAs structure. The validity range of this simplified model has been formulated in terms of a very simple criterion on the value of the reflexion coefficient at the network nodes. It has to be low enough, otherwise, the disconnection induced by electronic scattering on Friedel density oscillations dominates over the tendency to build a SDW instability, and then, the low energy state appears to be a collection of

independent Luttinger liquid segments.

This study raises some open questions regarding the transport properties of such incoherent \mathbb{Z}_2 metal. It would be very interesting to compute the temperature dependence of the conductivity. At temperatures above the spin density wave instability, it is likely to exhibit a power-law behavior, with a presently unknown exponent. In the strong coupling regime, a gap for single electronic excitations is expected, so most likely, the temperature dependence of the conductivity will show an activated behavior. Another fascinating question is the transport through hybrid structures such as a series of a normal metal, a \mathbb{Z}_2 network, and a normal metal. Indeed, for driving voltages below the \mathbb{Z}_2 gap (of the order of $h\nu_F/L$), incoming (resp. outgoing) electrons will have a strong tendency to be injected (resp. emitted) in pairs, although the \mathbb{Z}_2 network is far from a superconducting state. Maybe the most direct way to demonstrate this strange phenomenon in such a poorly conducting system would be through shot noise measurements.

Acknowledgments

We wish to thank J. Dufouleur, G. Faini, and D. Mailly for giving us the motivation for this work, and for several useful discussions. We also thank J. Vidal for his comments on the manuscript. Financial support of the DFG in SP1073 is gratefully acknowledged.

APPENDIX A: SPIN DENSITY WAVE INSTABILITY ON A \mathbb{Z}_2 NETWORK

For the sake of simplicity, let us consider the Hubbard local interaction. For an infinite 1D system, we decouple

the interaction as:

$$U \left(\langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) \psi_{\uparrow}(x) \rangle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) \psi_{\downarrow}(x) + \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) \psi_{\downarrow}(x) \rangle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) \psi_{\uparrow}(x) \right)$$

Let us assume that $\langle \psi_{\tau}^{\dagger}(x) \psi_{\tau}(x) \rangle = \tau \Delta \cos(2k_F x)$. In linear response theory, self-consistency determines the mean-field critical temperature T^* from the requirement $U \chi^{(0)}(2k_F, T^*) = 1$, where $\chi^{(0)}(q, T)$ is the static charge susceptibility of the non-interacting electron gas at wave-vector q and temperature T . Because $\chi^{(0)}(2k_F, T) = (h\nu_F)^{-1} \ln(aE_F/k_B T)$, where a is a numerical factor of order unity, the mean-field temperature T^* obeys a BCS relation:

$$k_B T^* = a E_F \exp\left(-\frac{h\nu_F}{U}\right) \quad (\text{A1})$$

For a \mathbb{Z}_2 network, our starting point is Eq. (11). Again, we are looking for a \mathbb{Z}_2 invariant order parameter of the form: $\langle \psi_{i\tau}^{\dagger}(x) \psi_{i\tau}(x) \rangle = \tau \Delta_i(x)$. With such an order parameter, the quantum expectation value of Eq. (11) taken for a Hartree-Fock state is equal to $-U(\Delta_i(x) + \Delta_j(x))^2$. We see that choosing a uniform spin density wave order parameter $\Delta_i(x) = \Delta$ definitely lowers the system interaction energy, and we expect a mean-field transition temperature of the same order of magnitude as for the single infinite wire with a repulsive local interaction. Note that this transition is uniquely driven by the first two terms in Eq. (11), that is the intra and inter cage interaction. The last two terms, i.e. the cage exchange and the pair hopping processes do not play a role in stabilizing the spin density wave state. As seen in section IV in a more elaborate treatment, these last two terms have the effect to lower the critical temperature by comparison to the mean-field estimate.

* Electronic address: kkyrylo@lpthe.jussieu.fr

† Electronic address: sdusuel@thp.uni-koeln.de

‡ Electronic address: doucot@lpthe.jussieu.fr

¹ G. Timp, R. E. Behringer, E. H. Westerwick, and J. E. Cunningham, in *Quantum Coherence in Mesoscopic systems*, edited by B. Kramer (Plenum, New-York, 1991).

² S. Washburn, and R. A. Webb, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 1311, (1992)

³ G. Timp, A. M. Chang, J. E. Cunningham, T. Y. Chang, P. Mankiewich, R. Behringer, and R. E. Howard, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2814, (1987)

⁴ S. Pedersen, A. E. Hansen, A. Kristensen, C. B. Sorensen, and P. E. Lindelof, *Phys. Rev. B* **61**, 5457, (2000)

⁵ D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2020, (1993).

⁶ W. Rabaud, L. Saminadayar, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoît, and B. Etienne, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3124, (2001).

⁷ C. Naud, G. Faini, and D. Mailly, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5104, (2001)

⁸ J. Vidal, R. Mosseri, and B. Douçot, *Phys. Rev. Lett.* **81**,

5888, (1998)

⁹ J. Vidal, B. Douçot, R. Mosseri, and P. Butaud, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3906, (2000)

¹⁰ J. Vidal, P. Butaud, B. Douçot, and R. Mosseri, *Phys. Rev. B* **64**, 155306, (2001)

¹¹ B. Douçot and J. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 227005, (2002)

¹² I. V. Protopopov, and M. V. Feigel'man, *Phys. Rev. B* **70**, 184519, (2004)

¹³ L. B. Ioffe and M. V. Feigel'man, *Phys. Rev. B*, **66**, 224503 (2002).

¹⁴ S. E. Korshunov, *Phys. Rev B* **63**, 134503, (2001)

¹⁵ S. E. Korshunov, and B. Douçot, *Phys. Rev B* **70**, 134507, (2004)

¹⁶ S. E. Korshunov, *Phys. Rev B* **71**, 174501, (2005)

¹⁷ J. Dufouleur, G. Faini, and D. Mailly, private communications

¹⁸ B. Douçot, M. V. Feigel'man and L. B. Ioffe, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 107003 (2003).

¹⁹ B. Douçot, L. B. Ioffe and J. Vidal, *Phys. Rev. B* **69**,

- 214501, (2003)
- ²⁰ T. Kottos, and U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. **79**, 4794, (1997)
- ²¹ S. Elitzur, Phys. Rev. **D 12**, 3978, (1975)
- ²² K. Kazymyrenko, and B. Douçot, Phys. Rev. **B 71**, 075110, (2005)
- ²³ C. L. Kane, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220, (1992)
- ²⁴ D. Yue, L. I. Glazman, and K. A. Matveev, Phys. Rev. **B 49**, 1966, (1994)
- ²⁵ S. Lal, S. Rao, and D. Sen, Phys. Rev. **B 66**, 165327, (2002)
- ²⁶ J. Solyom, Adv. Phys. **28**, 201, (1979)
- ²⁷ S. Dusuel, F. Vistulo de Abreu and B. Douçot, Phys. Rev. **B 65**, 94505, (2002)
- ²⁸ Hyun C. Lee, P. Azaria and E. Boulat, Phys. Rev. **B 69**, 155109, (2004)

Chapter 3

Réseau \mathbb{Z}_2 de jonctions Josephson et dissipation

Le développement de l'informatique s'explique par les progrès technologiques réalisés à un rythme croissant depuis plus de cinq décennies. Ces progrès permettent d'offrir des puissances de calcul de plus en plus grandes. Une nouvelle voie s'est ouverte depuis la construction explicite de l'algorithme grâce auquel un ordinateur quantique pourrait résoudre les problèmes qui semblent insolubles pour les ordinateurs classiques [Sho95]. Les algorithmes quantiques reposent sur l'existence d'une cellule de mémoire quantique, appelée *q-bit* (*quantum bit*). Le q-bit étant un système quantique à deux niveaux d'énergie, l'information peut être stockée dans la phase relative d'une superposition linéaire entre ces deux états. Par contraste avec le bit classique, l'information est alors codée par un paramètre continu. Même si c'est encore un projet à long terme, nul ne doute actuellement du futur des ordinateurs quantiques, néanmoins des nombreux obstacles techniques doivent être encore surmontés [DWM04].

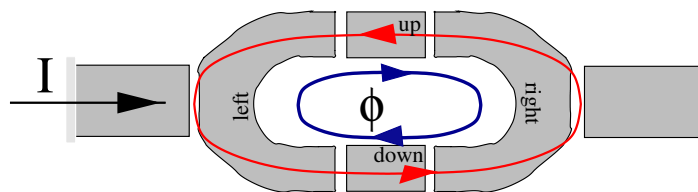


FIGURE 3.1: Représentation d'un q-bit à base d'une jonction Josephson \mathbb{Z}_2 . Pour les valeurs du champ magnétique égales à un demi-quantum de flux $\Phi = \Phi_0/2 = h/(4e)$, le niveau fondamental est doublement dégénéré.

Jonctions Josephson (JJ)¹ sont des bons candidats pour la fabrication de q-bit dans l'information quantique [NC00]. Grâce à leur faible dissipation et la possibilité de production en circuit intégré les "Josephson" q-bits attirent attention de nombreuses équipes expérimentales.² Il existe trois principaux types de q-bit à base de jonctions

¹Nous utilisons par la suite l'abréviation JJ pour *Jonction Josephson*.

²Il existe aussi les q-bits à base de "quantum dot" [HCJH03].

Josephson : les q-bits de phase [MNAU02], de flux [CNHM03, SLH⁺04] et de charge [PYA⁺03]. La différence major entre ses q-bits est la forme de leur potentiel nonlinéaire : respectivement cubique, quadratique et en cosinus. Récemment plusieurs modèles des q-bits possédants les groupes de symétrie particulière ont été proposés [FIG⁺04]. Pour leur avantage la présence symétrie de ses q-bits conduit à la dégénérescence de niveaux, et en conséquence, le doublet dans l'état fondamental peut être aisément obtenu par une légère variation des paramètres.

Une jonction Josephson de symétrie \mathbb{Z}_2 locale, qui est l'objet d'étude de ce chapitre, peut être utilisée dans les schémas des q-bits protégés topologiquement contre le bruit local [IFI⁺02, DFI03].³ L'état fondamental classique de ce type de jonctions est doublement dégénéré, si le champ magnétique qui la traverse crée un flux égal à un demi-quantum de flux élémentaire $\Phi = \Phi_0/2 = h/(4e)$. Cette dégénérescence obtenue aux niveau classique (c'est à dire lorsqu'on néglige les fluctuations quantiques de phases du paramètre d'ordre supraconducteur local) peut se comprendre physiquement comme la possibilité de renverser le sens de parcours d'un courant permanent à travers la boucle, sans changer l'énergie (voir Fig. 3.1). Si l'on admet des fluctuations quantiques des variables de phase, cette dégénérescence est levée par les processus tunnels entre ces deux états macroscopiquement différents. Une échelle d'énergie Δ peut donc être introduite pour chaque JJ \mathbb{Z}_2 , que nous appelons dans la suite l'énergie caractéristique du gap \mathbb{Z}_2 . Comme la valeur du gap dépend fortement non seulement des caractéristiques géométriques de la jonction, mais aussi des détails de sa fabrication, l'estimation théorique de Δ fournit des résultats difficiles à confronter aux expériences. Une question d'une importance pratique considérable est alors la mesure de ce gap énergétique. Les mesures actuelles sont basées sur la spectroscopie photonique dans le domaine des radiofréquences [CBHB04]. L'idée de base que nous exploitons le long de ce chapitre étant la possibilité d'excitation du gap \mathbb{Z}_2 par le courant injecté de l'extérieur, nous essayons de trouver un schéma expérimental réaliste⁴ qui rende possible l'estimation du gap \mathbb{Z}_2 par des mesures directes de la caractéristique courant-tension (*ang. IV characteristic*). Je souligne que nous étudions le modèle où le courant moyen est injecté depuis les conducteurs extérieurs. Le futur d'un tel spectromètre *IV* est très prometteur, car il est adapté en tous points à une réalisation expérimentale : à cause de la résistance quasi-nulle des fils supraconducteurs extérieurs, il est plus facile d'imposer un courant qu'une tension aux bornes de la jonction étudiée.

Ce chapitre commence par la description du modèle quantique d'une jonction JJ réaliste, dont la résistance et la capacitance sont non nulles. En l'absence du courant persistant ce modèle est soluble par la quantification canonique, que j'explique en détails. Le fait que nous étudions le modèle adapté à l'expérience avec le courant injecté de l'extérieur nous oblige d'introduire un nouveau concept d'une source de courant quantique. Connectée à une telle source de courant I , la jonction peut se trouver dans les deux états limites possibles (fort courant $I > I_c$ et faible courant $I < I_c$, I_c étant le courant critique de la jonction). Nous analysons dans la suite ces deux limites, et dans

³Je conseille de lire un court revu sur les q-bits à base de JJ [DWM04].

⁴Nous prenons en compte la présence des processus de dissipation énergétique.

le cas de faible courant nous arrivons à un modèle semi-classique, qui est actuellement en cours d'études numériques.

3.1 Modèle quantique pour une jonction Josephson

En 1962 Brian Josephson explique théoriquement le comportement des électrons lors de leur passage sous une barrière de potentiel qui sépare les deux supraconducteurs [Jos62]. Il en déduit deux effets remarquables : d'une part, un supercourant devrait apparaître même en l'absence de tension électrique et d'autre part un courant alternatif de haute fréquence traverserait la barrière soumise à une tension constante. Depuis les jonctions de deux îlots supraconducteurs séparés l'un de l'autre par une fine couche isolante ont pris le nom de leur "créateur" et sont appelées dans la littérature les *jonctions Josephson*. Dans cette section nous allons obtenir l'Hamiltonien d'une JJ \mathbb{Z}_2 , qui inclut la dissipation d'énergie. Nous mentionnons aussi la différence principale entre le SQUID et la JJ du type \mathbb{Z}_2 .

L'Hamiltonien d'une JJ idéale (sans résistance) peut être obtenu sans difficulté à partir de deux relations de Josephson,⁵ dont la dérivation [Mar04] nécessite la connaissance de la théorie BCS [BCS57]. Supposons que les phases supraconductrices de deux îlots soient données par ϕ_- et ϕ_+ . Selon Josephson, les phases d'îlots évoluent au cours de temps en présence du potentiel electro-statique V_σ comme :

$$\frac{d\phi_\sigma}{dt} = \frac{2e}{\hbar} V_\sigma \quad \text{où} \quad \sigma = \pm 1$$

D'autre part, la loi de la conservation de charge sur chaque îlot nous donne :

$$\frac{dQ_\sigma}{dt} + \sigma I = 0 \quad \text{où } I \text{ est le courant de l'îlot } + \text{ vers } -$$

Le supercourant entre les îlots est lié à la différence de leurs phases : $I = I_c \sin(\phi_+ - \phi_-)$, où I_c est le courant critique défini par la géométrie de la jonction. En introduisant le nombre de paires de Cooper par $n_\sigma \stackrel{\text{def}}{=} Q_\sigma / (2e)$, nous obtenons les équations suivantes :

$$\frac{d\phi_\sigma}{dt} = \frac{4e^2}{\hbar} \sum_\tau [C^{-1}]_{\sigma\tau} n_\tau; \quad \frac{dn_\sigma}{dt} = -\frac{I_c}{2e} \sigma \sin(\phi_+ - \phi_-) \quad (3.1)$$

Nous avons introduit la matrice de capacitance \hat{C} par : $\vec{Q} = \hat{C}\vec{V}$. Ces équations peuvent se voir comme des équations de Hamilton :⁶

⁵la procédure de dérivation de l'Hamiltonian pour un circuit arbitraire est décrite dans [Dev97]

⁶le coefficient \hbar^{-1} provient de ce que $[\phi_\sigma, n_\tau] = i\delta_{\sigma\tau}$ au lieu du commutateur canonique usuel $[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

$$\frac{d\phi_\sigma}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial n_\sigma}; \quad \frac{dn_\sigma}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \phi_\sigma} \quad (3.2)$$

$$H = 2e^2 \sum_{\sigma\tau} [C^{-1}]_{\sigma\tau} n_\sigma n_\tau - \frac{\hbar I_c}{2e} \cos(\phi_+ - \phi_-) \quad (3.3)$$

Dans la pratique, comme les électrodes supraconductrices sont séparées par une fine couche diélectrique, les termes hors diagonaux de la matrice de capacitance sont dominants. L'Hamiltonien d'une jonction s'écrit dans la forme plus simple :

$$\hat{H} = \frac{2e^2}{C} \hat{n}^2 - \frac{\hbar I_c}{2e} \cos \hat{\theta} \quad \text{où} \quad \theta \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} \phi_+ - \phi_- \quad \text{et} \quad \hat{n} \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} n_+ - n_- \quad (3.4)$$

$E_J = \hbar I_c / (2e)$ a la dimension de l'énergie, et elle est appelée *l'énergie de Josephson*. Il est important de noter que l'Hamiltonien est périodique en θ , ce qui est une simple conséquence du caractère discret de la charge. Une JJ possédant deux échelles d'énergie E_J et $E_c = 2e^2 / (C)$, on distingue trois différents types de jonctions :

- $E_J \gg E_c$: le régime de faibles fluctuations quantiques (fq) de la phase θ .
- $E_c \gg E_J$: la phase supraconductrice est détruite par les fq.
- $E_c \approx E_J$: la transition de phase supra-isolant est observée.

C'est le premier régime qui nous intéressera le plus. Le fondamental classique de la JJ est non dégénéré, il est obtenu en minimisant le terme $-E_J \cos \theta$.

Nous allons maintenant obtenir la même expression pour une JJ de type \mathbb{Z}_2 en présence du champ magnétique (Fig. 3.1). Si les fluctuations quantiques sont faibles l'énergie de la jonction s'écrit comme une somme de quatre termes :

$$\begin{aligned} E_{\mathbb{Z}_2}(\phi_l, \phi_r, \phi_u, \phi_d) / E_J &= -\cos(\phi_l - \phi_u - \gamma/4) - \cos(\phi_u - \phi_r - \gamma/4) - \\ &\quad - \cos(\phi_l - \phi_d + \gamma/4) - \cos(\phi_d - \phi_r + \gamma/4) \end{aligned}$$

où ϕ_i sont les variables de phase pour quatre îlots supraconducteurs (*up*, *down*, *left*, *right*). La dépendance en $\gamma = 2\pi\Phi/\Phi_0 = 4\pi eBS/h$ apparaît à cause de la présence du champ magnétique B . Nous pouvons éliminer les variables "internes" de la jonction ($\phi_{u,d}$) lorsque nous cherchons des minima classiques. Le problème devient équivalent à la minimisation d'une fonction de la différence de phase (comme pour une jonction simple) $\theta \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} \phi_l - \phi_r$:

$$E_{\mathbb{Z}_2}(\theta) / E_J = -|\cos(\theta/2 - \gamma/4)| - |\cos(\theta/2 + \gamma/4)|$$

Pour tous $\gamma \neq 0 \pmod{2\pi}$, cette fonction possède deux minima locaux, pour θ égal 0 et π . Pour $\gamma = \pi$, ce qui correspond au demi-quantum de flux l'état fondamental devient dégénéré. Pour cette valeur du champ magnétique la périodicité de l'énergie $E_{\mathbb{Z}_2}(\theta)$ en fonction de θ double, et sa période est alors égale à π , Fig. 3.2.

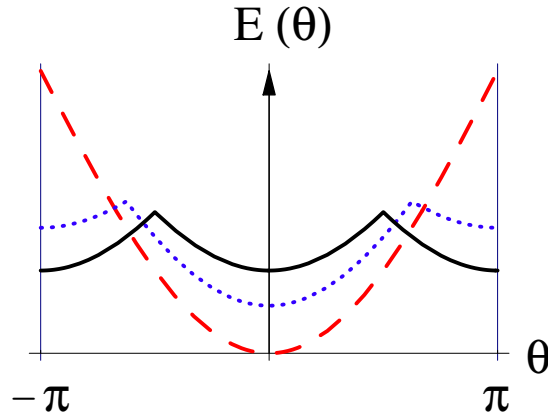


FIGURE 3.2: Comportement de l'énergie de la JJ \mathbb{Z}_2 en fonction de γ , les variables de phases "internes" étant éliminées : $\gamma = 0$ (en tirets rouges), $\gamma = 3\pi/4$ (en pointillé bleu) et $\gamma = \pi$ (ligne pleine noire).

Nous pouvons donc dans une bonne approximation supposer que l'Hamiltonien d'une jonction \mathbb{Z}_2 soit donné par :⁷

$$\hat{H} = E_c \hat{n}^2 - E_J \cos \hat{\theta} \quad \text{où} \quad \theta \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} \phi_l - \phi_r \quad \text{et} \quad \hat{n} \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} n_l - n_r \quad (3.5)$$

La différence avec un SQUID est apparente à cette étape, car au niveau classique, pour un demi quantum de flux les deux variables de phase d'un SQUID se découplent complètement. Toutefois, le système à deux niveaux peut être obtenu en autorisant la variation de flux à travers le SQUID [FPC⁺00]. Les réseaux de SQUID peuvent être utilisés comme teslamètres grâce à leur haute sensibilité à la valeur du champs magnétique [WH01]. La caractéristique importante de la jonction \mathbb{Z}_2 est que son état fondamental classique est doublement dégénéré en énergie. En prenant en compte les processus tunnels entre deux minima classiques, cette dégénérescence est levée. Nous appelons le gap \mathbb{Z}_2 l'énergie correspondante et la notons par Δ . Dans le cas où l'énergie de Josephson est élevée, les excitations de plasma⁸ peuvent se voir de quelques ordres de grandeur supérieures à Δ . Donc à basse énergie nous pouvons considérer la jonction \mathbb{Z}_2 , comme un système à deux niveaux (le q-bit).

Nous allons aller plus loin dans la description quantique des JJ et inclure les forces dissipatives d'interaction avec l'environnement ainsi que le courant permanent traversant la jonction. L'équation du mouvement pour une JJ idéale donne (3.4) :

$$\frac{\hbar C}{2e} \ddot{\theta} + I_c \sin \theta = 0$$

La généralisation de cette équation en présence du courant I et de la résistance R , est

⁷Dans la suite nous ne parlons que des JJ \mathbb{Z}_2 traversées par un demi de quantum de flux.

⁸les excitations de plasma sont les états de plus basse énergie au voisinage de chaque minimum classique. Si la courbure de l'énergie potentielle autour du minimum est grande, les ω de plasma peuvent être très élevés.

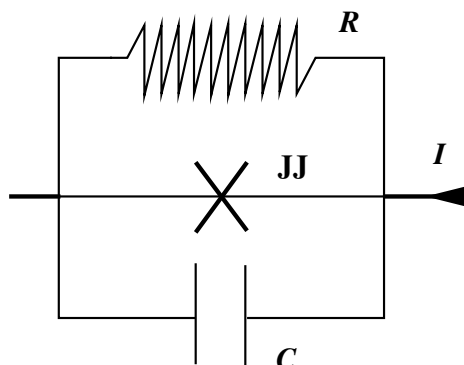


FIGURE 3.3: Une jonction Josephson réaliste [Shunted Josephson junction].

immédiate (Fig. 3.3) :

$$\frac{\hbar C}{2e} \ddot{\theta} + \frac{\hbar}{2eR} \dot{\theta} + I_c \sin \theta = I \quad (3.6)$$

Le but principal de la description quantique est de pouvoir reproduire cette équation du mouvement classique pour les opérateurs. Le courant I traversant la jonction peut être pris en compte par la modification de l'Hamiltonien du système :

$$\hat{H} = \frac{2e^2}{C} \hat{n}^2 - \frac{\hbar I_c}{2e} \cos \hat{\theta} - \frac{\hbar I}{2e} \hat{\theta} \quad (3.7)$$

Nous pouvons déjà identifier le premier problème de la description quantique. *La source quantique de courant semble briser la périodicité de la variable de phase $\theta \mapsto \theta + 2\pi$.* Nous brisons en effet le caractère quantique de la charge et tous les processus faisant intervenir la propagation des charges uniques (comme la réflexion d'Andreev, par exemple) seront cachés. Nous montrons dans la section suivante (3.2) comment éviter cet obstacle.

Les deux régimes pour la jonction sont apparents.⁹ Si $I \gg I_c$ le terme de Josephson devient négligeable et la variable de phase augmente infiniment. Dans un modèle réaliste il faudra inclure les forces de frottement, nous analysons ce cas dans la section 3.4. Si par contre $I \ll I_c$, dans un premier temps nous pouvons supposer que la variable de phase soit coincée dans un de puits et étudier le problème en développant le potentiel en série de Taylor. L'activation de l'état coincé vers l'état tombant est observée expérimentalement [KNC⁺05]. Les travaux théoriques intéressants ont été effectués en gardant le terme de l'ordre x^3 [DMS00]. A la fin de ce chapitre nous proposons deux modèles théorique $1D$ et $2D$ pour les réseaux de jonctions \mathbb{Z}_2 traversées par un faible courant.

Pour modéliser l'interaction de la jonction \mathbb{Z}_2 avec l'environnement nous pouvons suivre les idées de Caldeira-Leggett [CL81] et la coupler à un bain d'oscillateurs harmoniques. Le terme diffusif de la jonction est reproduit si l'on rajoute à l'Hamiltonien

⁹le potentiel de la JJ en présence du courant I est appelé "washboard" (ang.).

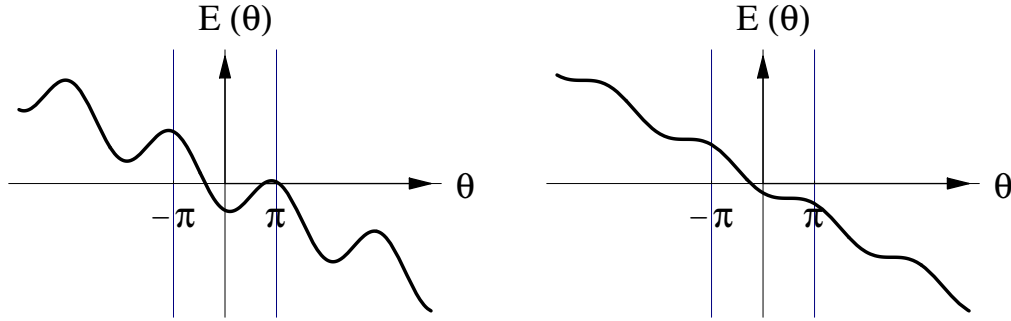


FIGURE 3.4: Le potentiel "washboard" pour la JJ traversée par le courant continu. $I = I_c/10$ à gauche et $I = I_c$ à droite [Wash-board potential].

de la JJ idéale (3.4) l'Hamiltonien diffusif H_D avec une contrainte particulière sur les fréquences des oscillateurs ω_α (section 3.4) :

$$\hat{H}_D = \sum_{\alpha} \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2g_{\alpha}} \hat{P}_{\alpha}^2 + \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2} g_{\alpha} (\theta - U_{\alpha})^2; \quad \text{avec} \quad [U_{\alpha}, P_{\beta}] = i\delta_{\alpha,\beta} \quad (3.8)$$

En l'absence du courant permanent traversant la jonction ce modèle peut être ramené à un problème gaussien de la théorie des champs définie sur réseau. Elle est exactement soluble en utilisant la quantification canonique (section 3.3).

Récapitulatif de la section :

Nous avons d'abord construit l'Hamiltonien quantique de la jonction Josephson idéale ordinaire (3.4), ainsi que de la jonction \mathbb{Z}_2 (3.5). Ensuite nous avons parcouru les différentes approches théoriques pour le traitement d'une JJ réaliste (Fig. 3.3), en identifiant les problèmes qui peuvent apparaître.

3.2 Une source de courant quantique

Bien que la théorie de transport quantique entre deux électrodes classiques ait été développée à partir des années soixante-dix [Lan70, Büt86], une source de courant continu reste toujours difficile à modéliser. D'un point de vue formel, on peut voir une source de courant comme une source de tension avec une très grande résistance interne, et se ramener au formalisme de Landauer-Büttiker pour traiter cette dernière. Ceci est possible si les conducteurs apportant le courant sont décrits par des liquides de Fermi. Mais ici, nous nous intéressons au cas où l'injections du courant se fait depuis des supraconducteurs. Nous sommes donc obligés d'introduire un modèle théorique pour une pile quantique de courant.

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, la description quantique d'une JJ réaliste possède de nombreux obstacles techniques, mais ce qui est plus grave, aussi des problèmes conceptuels. Le simple fait de brancher la jonction à une source de courant continu donne un terme linéaire en phase $I\theta$, qui semble briser la périodicité en

θ . La périodicité de θ est directement liée au caractère discret de sa variable conjuguée (la charge) : comme $[\hat{\theta}, \hat{n}] = i$, alors $\exp(i\alpha\hat{n})|\theta\rangle \equiv |\theta - \alpha\rangle$ et donc si $|\theta\rangle \equiv |\theta + 2\pi\rangle$, alors $\exp(2\pi i\hat{n}) = 1$ (la charge est discrète). Au cours de ma thèse nous avons passé beaucoup de temps à essayer de comprendre et de surmonter cette difficulté conceptuelle.

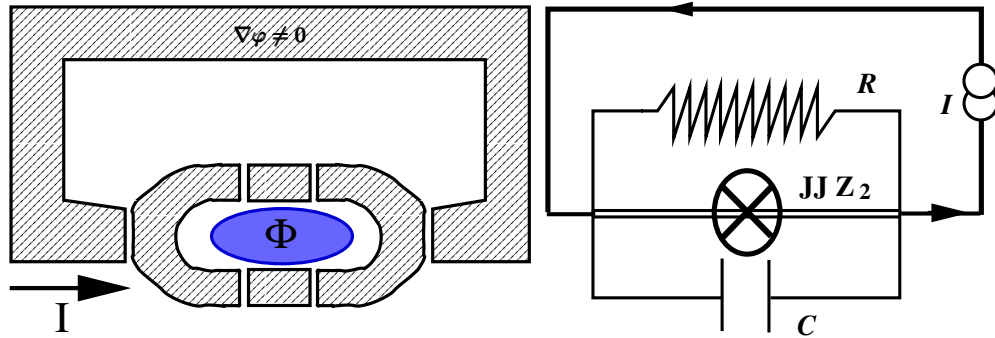


FIGURE 3.5: Le schéma électrique (à droite) de la JJ \mathbb{Z}_2 connectée à une source de courant, et l'une des possibles réalisations expérimentales d'un tel schéma (à gauche). C'est le supraconducteur contenant les vortex de la phase, qui joue le rôle de la pile quantique.

Supposons que nous ayons une jonction \mathbb{Z}_2 connectée à une source du courant continu (Fig. 3.5). Nous avons vu précédemment que c'est l'identité des deux états quantiques $|\theta\rangle$ et $|\theta + 2\pi\rangle$ ¹⁰ qui engendre les problèmes de la quantification de la charge en présence d'une source de courant. Formellement nous pouvons éviter ce problème en introduisant un nombre quantique supplémentaire N , avec la supposition que les états translatés diffèrent sur ce paramètre : $|\theta, N\rangle = |\theta + 2\pi, N - 1\rangle$. Physiquement cette supposition est aussi valable, car il est difficile d'imaginer une source de courant éternelle. Nous donnons un exemple concret de ces considérations. En pratique, une source de courant continu peut être fabriquée à partir d'un supraconducteur ayant un grand nombre de vortex. Nous pouvons fabriquer un échantillon, montré sur la figure (3.5) à gauche, sous un fort champ magnétique et, dès que le circuit sera fermé, le couper. En conséquence la partie supraconducteur en forme de l'anneau contiendra un grand nombre de vortex qui pourront se "débobiner" à travers le contact en forme de JJ. Il est clair que dans ce modèle, c'est le nombre de vortex qui joue le rôle du paramètre supplémentaire N . Remarquons d'abord que comme notre schéma expérimental ne correspond plus à celui donné sur la figure 3.5, une légère modification est nécessaire : l'énergie stockée dans le supraconducteur sous forme des vortex dépend de la différence de phases aux extrémités ψ , elle est donnée par : $E(\psi) = LE_{\text{sup}} \int_0^L (\nabla\phi)^2 dx = E_{\text{sup}}\psi^2$.¹¹ L'état quantique du système est défini par les trois variables de phases : $|\theta_{\mathbb{Z}_2}, \theta_L, \theta_R\rangle$,¹²

¹⁰Les symétries de l'Hamiltonien ne sont pas nécessairement imposées à l'état fondamental, comme par exemple, dans le cas de la brisure spontanée de la symétrie. Cependant dans notre cas la périodicité de la phase est directement liée au caractère discret de la charge, propriété physique qui semble difficile à violer par la brisure spontanée.

¹¹si on note par ϕ_L, ϕ_R les valeurs de la phase aux extrémités de bulk supra, $\psi \equiv \phi_L - \phi_R$.

¹²ces états sont invariants par les translations de 2π dans le sens suivant : $|\theta_{\mathbb{Z}_2}, \theta_L, \theta_R\rangle = |\theta_{\mathbb{Z}_2} + 2\pi, \theta_L - 2\pi, \theta_R\rangle = |\theta_{\mathbb{Z}_2} + 2\pi, \theta_L, \theta_R - 2\pi\rangle$ etc. C'est directement lié au fait que, ce sont les variables de la différence de phases.

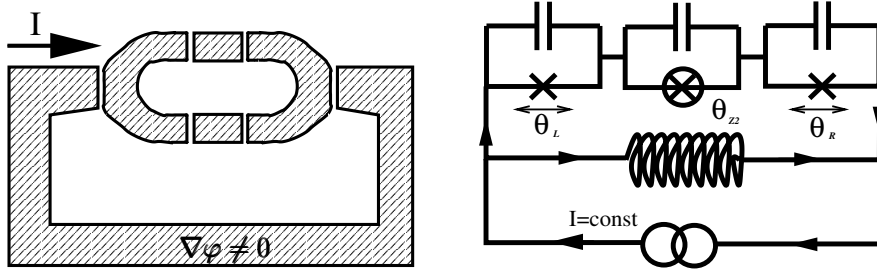


FIGURE 3.6: Le schéma électrique (à droite) de la JJ \mathbb{Z}_2 connectée à une source de courant (anneau de supra) via deux jonctions ordinaires.

la phase ψ étant la somme de ses trois phases, $\psi = \theta_{Z2} + \theta_L + \theta_R$. Comme la valeur de ψ est grande (nombre de vortex est élevé), il est évident qu'on ne pourra pas choisir toutes les trois variables dans l'intervalle $[-\pi, \pi]$. Néanmoins il est possible d'introduire une variable supplémentaire du nombre de vortex N et définir ainsi les phases dans cet intervalle : $|\theta_{Z2}, \theta_L, \theta_R\rangle \Rightarrow |N, \theta_{Z2}, \theta_L, \theta_R\rangle$, où $\theta_{Z2}, \theta_L, \theta_R \in [-\pi, \pi]$. L'utilité pratique de cette approche est claire : la seule chose qu'on veut savoir à propos de la source de courant est son intensité et non pas le nombre de vortex qu'elle contient. Nous arrivons naturellement à l'astuce mathématique que j'ai proposée au tout début, l'état "périodique" est donc : $|\theta_{Z2} + 2\pi, \theta_L, \theta_R\rangle \equiv |N - 1, \theta_{Z2}, \theta_L, \theta_R\rangle$. La phase θ_{Z2} peut bien tendre vers "l'infini" : cela enlèvera juste les vortex dans le bulk supra. Cette procédure ne marchera pas à l'infini au sens mathématique, car à un moment donné la pile sera déchargée, mais nous pouvons étudier l'état stationnaire non stable, pendant un temps arbitrairement long. Pour finir nous allons calculer l'énergie potentielle de la jonction présentée sur la figure 3.6. Pour simplifier supposons que les jonctions ordinaires soient équivalentes, dans ce cas l'énergie du système s'écrit :

$$E(\theta_{Z2}, \theta_L, \theta_R) = -\tilde{E}_J(\cos \theta_L + \cos \theta_R) - E_J \cos(2\theta_{Z2}) + E_{\text{sup}}(\theta_{Z2} + \theta_L + \theta_R - 2\pi N)^2$$

Qu'obtient-on en développant le carré ? Si $E_{\text{sup}} \ll \min(E_J, \tilde{E}_J)$ nous pouvons négliger le terme en ψ^2 .¹³ Le terme en N^2 peut être abandonné, car il ne dépend pas des variables de phases. Il nous reste juste le terme linéaire, qui décrit le courant continu $I = 8\pi NeE_{\text{sup}}/\hbar$. Nous montrons enfin l'évolution de la phase de l'état stationnaire sur la figure 3.7

Récapitulatif de la section :

Le concept d'une source de courant quantique a été introduit. Nous l'avons appliqué à l'exemple concret de la JJ de type \mathbb{Z}_2 connectée au bulk supra par deux jonctions ordinaires.

¹³plus exactement $(\theta_{Z2} + \theta_L + \theta_R)^2$

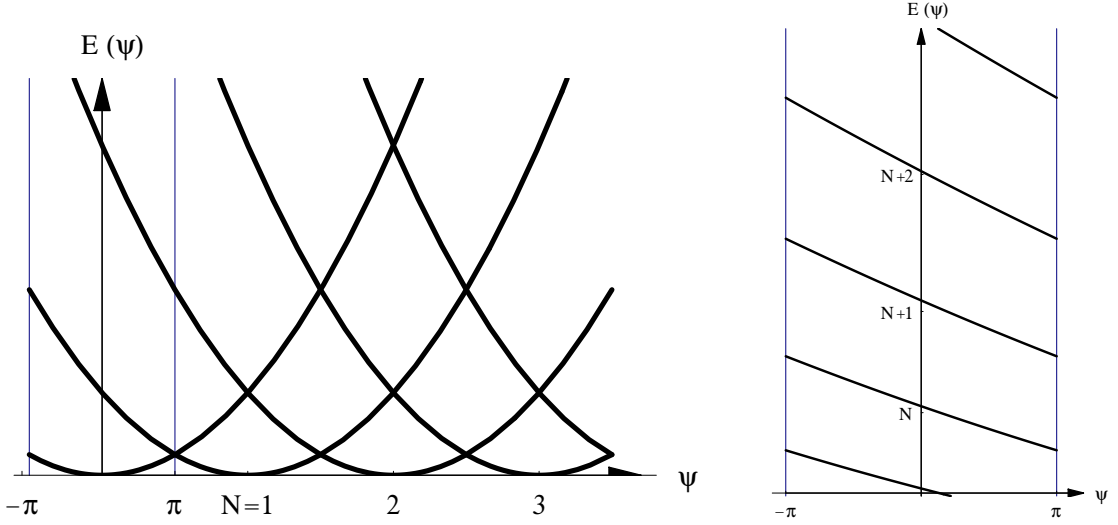


FIGURE 3.7: L'énergie du bulk supra en fonction de la différence de phases ψ aux extrémités. Nous pouvons considérer ψ dans l'intervalle de $[-\pi, \pi]$ en introduisant le paramètre de vortex N . A grand nombre de vortex l'énergie est en forme de dents de scie inverse.

3.3 Quantification canonique

Dans cette section nous allons démontrer rigoureusement comment résoudre le problème gaussien de la mécanique quantique avec plusieurs degrés de liberté. Ceci constitue une base mathématique pour la méthode de *quantification canonique* largement utilisée en théorie de champ. L'Hamiltonien le plus général du problème gaussien s'écrit sous la forme suivante à une constante près :¹⁴

$$\hat{H}(\hat{\Phi}, \hat{\Pi}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \left(A_{i,j} \hat{\Pi}_i \hat{\Pi}_j + B_{i,j} \hat{\Phi}_i \hat{\Phi}_j + C_{i,j} [\hat{\Pi}_i \hat{\Phi}_j + \hat{\Phi}_i \hat{\Pi}_j] \right) \quad (3.9)$$

où $A_{i,j}, B_{i,j}, C_{i,j}$ sont des coefficients réels et $\{\hat{\Pi}_i, \hat{\Phi}_j\}_{i,j}$ est un jeu d'opérateurs conjugués : $[\hat{\Phi}_i, \hat{\Pi}_j] = i\delta_{i,j}$. On obtient souvent ce type d'Hamiltonien lorsqu'on considère un ensemble de particules par l'approche de la première quantification, où $\hat{\Phi}_i, \hat{\Pi}_i$ sont respectivement les opérateurs de position et d'impulsion de la particule i . Dans le cadre de ce chapitre, les variables $\hat{\Pi}_i$ et $\hat{\Phi}_i$ apparaissent naturellement pour un modèle de type Hubbard avec des bosons en interaction sur un réseau. En effet, partant de $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{i,j}$, on peut former des opérateurs canoniquement conjugués par la transformation non-linéaire suivante :

$$\hat{b}_j^\dagger = \sqrt{\hat{\Pi}_j} \exp(i\hat{\Phi}_j) \text{ et } \hat{b}_j = \exp(-i\hat{\Phi}_j) \sqrt{\hat{\Pi}_j}$$

Pour que le spectre en énergie soit borné inférieurement, il est nécessaire d'imposer une condition sur les constantes intervenant dans (3.9) : l'Hamiltonien, comme une

¹⁴après avoir absorbé les termes linéaires dans la redéfinitions d'opérateurs $\hat{\Phi}$ et $\hat{\Pi}$

fonction de deux paramètre-vecteurs \vec{x}, \vec{y} doit être défini positif, $H(\vec{x}, \vec{y}) > 0$ pour tous $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n$.

Quelle est la stratégie générale utilisée pour résoudre ce type de problème? D'abord nous cherchons les solutions du problème correspondant de mécanique analytique, comme si les opérateurs $\hat{\Phi}$ et $\hat{\Pi}$ étaient juste les coordonnées généralisées : $\hat{\Phi} \Rightarrow \Phi$ et $\hat{\Pi} \Rightarrow \Pi$. Ensuite, dans le développement temporel des opérateurs $\hat{\Phi}, \hat{\Pi}$ (dans l'image de Heisenberg) toutes les constantes d'intégration sont simplement remplacées par des opérateurs avec les règles de commutation standards. Nous allons dans la suite justifier cette technique pas par pas.

Dans le premier temps nous allons démontrer l'équivalence entre l'équation du mouvement classique (équations d'Hamilton) et quantique (équations d'Heisenberg).

$$\frac{\partial H}{\partial \Pi_j} = \partial_t \Phi_j; \quad \frac{\partial H}{\partial \Phi_j} = -\partial_t \Pi_j \quad \text{équations d'Hamilton}$$

L'évolution d'opérateurs dans la représentation d'Heisenberg donne les mêmes équations :¹⁵

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\Phi}_j &= \partial_t [e^{i\hat{H}t} \hat{\Phi}_j e^{-i\hat{H}t}] = i[\hat{H}, \hat{\Phi}_j] = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \Pi_j} \\ \partial_t \hat{\Pi}_j &= \partial_t [e^{i\hat{H}t} \hat{\Pi}_j e^{-i\hat{H}t}] = i[\hat{H}, \hat{\Pi}_j] = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \Phi_j} \end{aligned} \quad \text{équations d'Heisenberg}$$

Pour l'Hamiltonien (3.9) les équations classiques et quantiques sont strictement équivalentes :¹⁶

$$\partial_t \hat{\Pi}_i = -B_{ij} \hat{\Phi}_j - C_{i,j} \hat{\Pi}_j \quad \partial_t \hat{\Phi}_i = A_{ij} \hat{\Pi}_j + C_{i,j} \hat{\Phi}_j$$

Nous allons maintenant résoudre ces équations en se souvenant que ce sont des équations opératorielles. Il est avantageux d'utiliser leur forme vectorielle :

$$\partial_t \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_i \\ \hat{\Pi}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{C} & \mathcal{A} \\ -\mathcal{B} & -\mathcal{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_i \\ \hat{\Pi}_i \end{pmatrix} \iff \partial_t \vec{X} = \mathcal{M} \vec{X} \quad (3.10)$$

où nous avons introduit la matrice symplectique \mathcal{M} et le vecteur-opérateur \vec{X} par :

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{C} & \mathcal{A} \\ -\mathcal{B} & -\mathcal{C} \end{pmatrix} \in \text{Mat}(2n, 2n); \quad \text{et} \quad \vec{X} = \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_i \\ \hat{\Pi}_i \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$ sont les matrices de coefficients correspondants. Nous discutons en détail les propriétés des matrices symplectiques dans l'annexe D. Nous utilisons ici le fait que dans notre cas elle est diagonalisable et toutes ses valeurs propres sont imaginaires : il

¹⁵Où nous avons utilisé $[f(\hat{a}), \hat{b}] = \frac{\partial f}{\partial \hat{a}}[\hat{a}, \hat{b}]$.

¹⁶par contre pour les Hamiltoniens non-quadratiques nous pouvons avoir des problèmes liés à l'ordre des opérateurs au moment où nous passons du cas classique vers la description quantique.

existe $\mathcal{P} \in \text{Mat}(2n, 2n)$ telle que $\mathcal{P}^{-1}\mathcal{M}\mathcal{P} = i \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n, -\omega_1, \dots, -\omega_n) \equiv i\Omega$.¹⁷ Nous pouvons alors faire une combinaison linéaire d'opérateurs $\vec{Y} \stackrel{\text{def}}{\iff} \mathcal{P}^{-1}\vec{X}$, qui obéiront à une équation différentielle triviale $\partial_t \vec{Y} = i\Omega \vec{Y}$, dont les solutions sont données par :

$$\hat{Y}_\alpha(t) = \hat{c}_\alpha e^{i\Omega_\alpha t} \quad \text{où} \quad \Omega_\alpha = \begin{cases} +\omega_\alpha & \text{si } 1 < \alpha < n \\ -\omega_\alpha & \text{si } n+1 < \alpha < 2n \end{cases} \quad (3.12)$$

Nous utilisons encore une propriété de la matrice \mathcal{P} pour établir les règles de commutation des opérateurs inconnus $\{\hat{c}_\alpha\}_{\alpha=1}^{2n}$. Comme il est démontré dans l'annexe D, Eq.(D.3), $\mathcal{P}^t J \mathcal{P} = -iJ$,¹⁸ où J est la matrice des commutateurs qui définit la forme symplectique :

$$J = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix}; \quad \text{ou autrement} \quad J_{\alpha,\beta} = -i[\hat{X}_\alpha, \hat{X}_\beta] \quad (3.13)$$

Calculons ces commutateurs à temps égaux ($t = t'$) :

$$\begin{aligned} e^{i(\Omega_\alpha + \Omega_\beta)t} [\hat{c}_\alpha, \hat{c}_\beta] &\equiv [\hat{Y}_\alpha, \hat{Y}_\beta] = [(\mathcal{P}^{-1}\vec{X})_\alpha, (\mathcal{P}^{-1}\vec{X})_\beta] = \mathcal{P}_{\alpha,\alpha'}^{-1} \mathcal{P}_{\beta,\beta'}^{-1} [\hat{X}_{\alpha'}, \hat{X}_{\beta'}] = \\ &= i\mathcal{P}_{\alpha,\alpha'}^{-1} \mathcal{P}_{\beta,\beta'}^{-1} J_{\alpha',\beta'} = -i(\mathcal{P}^t J \mathcal{P})_{\alpha,\beta}^{-1} = -J_{\alpha,\beta} \end{aligned}$$

Nous voyons déjà la structure des opérateurs de création-annihilation bosoniques :

$$\begin{aligned} \hat{a}_\alpha^\dagger = \hat{c}_\alpha &\quad \text{pour } 1 < \alpha < n \\ \hat{a}_{\beta-n} = \hat{c}_\beta &\quad \text{pour } n+1 < \beta < 2n \end{aligned} \implies [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j} \quad 1 < i, j < n$$

Cette dernière relation n'est valable que si $\hat{c}_i^\dagger = \hat{c}_{i+n}$ pour tous $1 < i < n$. En effet, c'est la conséquence directe d'une des propriétés de la matrice \mathcal{P} (D.4) et le fait que les composantes du \vec{X} sont des opérateurs hermitiens :¹⁹

$$\vec{X}^\dagger = \vec{X}; \quad \mathcal{P}^* = \mathcal{P} \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \implies \mathcal{P}^* \vec{Y}^\dagger = \mathcal{P} \vec{Y} \implies \vec{Y} = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \vec{Y}^\dagger$$

Réécrivons l'Hamiltonien (3.9) à l'aide des nouveaux opérateurs :²⁰

$$\begin{aligned} \hat{H} &= (\vec{X}; \mathcal{H}\vec{X}) = \frac{1}{2}(\mathcal{P}\vec{Y}; J\mathcal{M}\mathcal{P}\vec{Y}) = -\frac{i}{2}(\vec{Y}; \mathcal{P}^t J \mathcal{P} \Omega \vec{Y}) = -\frac{1}{2}(\vec{Y}; J\Omega\vec{Y}) = \\ &= \sum_{i=1}^n \omega_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Nous avons utilisé la notion de la matrice \mathcal{H} qui définit la forme quadratique de l'Hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathcal{B} & \mathcal{C} \\ \mathcal{C} & \mathcal{A} \end{pmatrix} \equiv -\frac{1}{2} J \mathcal{M}$$

¹⁷ $\omega_i > 0$ pour tout i . La matrice \mathcal{P} possède certaines propriétés que nous utiliserons dans la suite, voir l'annexe D.

¹⁸ \mathcal{P}^t est la matrice transposée (non pas conjuguée hermitienne)

¹⁹nous ne mettons pas de chapeaux sur les opérateurs dans cette expression pour simplifier l'écriture

²⁰nous notons par les parenthèses le produit scalaire dans l'espace réel : $(\vec{\xi}, \vec{\zeta}) = \sum \xi_i \zeta_i$.

La solution des équations (3.10) consiste donc en une simple transformation linéaire des opérateurs de sorte que l'Hamiltonien s'écrive, comme la somme d'oscillateurs harmoniques, dont les opérateurs correspondants ont les règles de commutation bosoniques. Nous pouvons en conséquence trouver l'espace de Fock correspondant, avec l'état fondamental défini par $\hat{a}_i|\mathcal{O}\rangle=0$ pour tout i . Du point de vue pratique, nous devons d'abord résoudre les équations classiques et ensuite remplacer les constantes d'intégration devant $e^{i\omega_j t}$ par les opérateurs de création et devant $e^{-i\omega_j t}$ par les opérateurs d'annihilation bosoniques. Notons que les problèmes arrivent au moment où la forme quadratique du Hamiltonien n'est pas strictement positive, i.e. il existe $\vec{X} \in \mathbb{R}^{2n}$ tels que $(\vec{X}; \mathcal{H}\vec{X}) = 0$. Dans ce cas la matrice \mathcal{M} n'est pas diagonalisable. Mais nous pouvons toujours la ramener à sa forme de Jordan. Chaque bloc de Jordan va correspondre à une coordonnée normale dont le mouvement n'oscille pas, mais se fait à une vitesse constante. Ce degré de liberté non oscillant se quantifie tout simplement comme une particule libre (voir l'annexe D). Toutefois la procédure de "jordanisation" étant plus complexe, nous proposons dans la section suivante une méthode alternative.²¹

Récapitulatif de la section :

Dans cette section nous avons trouvé une justification mathématique pour la quantification canonique, qui est largement utilisée dans la théorie des champs (nous l'utilisons dans l'approche variationnelle quantique 1.5.3). La généralisation pour le cas continu étant directe, nous avons considéré seulement l'Hamiltonien discret. La quantification canonique n'est pas triviale pour les problèmes dont l'Hamiltonien n'est pas défini positif. Dans ce cas la forme de Jordan doit être employée.

3.4 Modèle de Caldeira-Leggett : un cas simple

Une jonction Josephson traversée par un très fort courant permanent I peut être associée au modèle d'un objet massif tombant dans le champ gravitationnel. En effet si $I \gg I_c$ l'Hamiltonien d'une jonction s'écrit comme :

$$\hat{H} = \frac{\hat{Q}^2}{2C} - \frac{\hbar}{2e}(I\hat{\theta} + I_c \cos \hat{\theta}) \approx \frac{\hat{Q}^2}{2C} - \frac{\hbar I}{2e}\hat{\theta} + O(I_c/I) \quad (3.15)$$

où nous utilisons les notations habituelles : C est la capacitance de la jonction, I_c son courant critique et enfin \hat{Q} est l'opérateur de charge et son conjugué est l'opérateur de la différence de phases aux bornes de la jonction, $[\hat{\theta}, \hat{Q}] = i2e$. Il est clair que dans cette analogie avec l'objet dans le champ gravitationnel, la capacitance C joue le rôle d'une masse et le courant I correspond à l'intensité du champ. Nous savons que dans le cas idéal, un objet dans le champ gravitationnel avance avec l'accélération constante le long du gradient du champ. En pratique, par contre, il atteint une vitesse constante grâce à la présence de forces dissipatives. C'est ce cas qui est plus intéressant physiquement, car il correspond à la JJ réelle avec une résistance interne. Si le courant injecté dans la JJ dépasse le courant critique, les charges ne pouvant pas passer à travers s'accumulent sur

²¹il existe aussi les méthodes à base de l'intégrale du chemin [BEAH01]

les plaques du condensateur. Une différence de potentiel est alors créée et une partie du courant traverse la résistance ce qui entraîne les oscillations de la différence de phase entre les deux supraconducteurs de la jonction et en conséquence les oscillations de l'amplitude du courant qui traverse la jonction elle-même. Ce processus étant bien décrit du point de vue classique dans le livre de Tinkham [Tin96], nous proposons ici un modèle quantique inspiré par le modèle de Caldeira-Leggett [CL81]. Nous considérons dans la suite un objet quantique de masse m dans le champ gravitationnel γ en présence des frottements, dont l'Hamiltonien non dissipatif est donné par :

$$\hat{H}_{ND} = \frac{p^2}{2m} - m\gamma x \quad (3.16)$$

où p et x sont des opérateurs conjugués : $[x, p] = i$.²² Dans le formalisme hamiltonien en général et dans la mécanique quantique en particulier, il n'est pas facile d'inclure les forces dissipatives, car elles entraînent la non-conservation de l'énergie pendant le mouvement. Il est donc judicieux de choisir un système plus large, où l'énergie totale est conservée, et où l'objet étudié est plongé dans le bain de son environnement. Nous adaptons ensuite les paramètres de ce système de sorte à ce que le modèle initial ait les équations de mouvement classiques. Il est clair que pour pouvoir décrire la dissipation à temps long le système enveloppant doit avoir un nombre de degrés de liberté infini. Le modèle le plus simple que nous pouvons imaginer est le bain d'oscillateurs harmoniques.

$$\hat{H}_D = \sum_{\alpha} \frac{\Pi_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 (x - U_{\alpha})^2; \quad \text{avec} \quad [U_{\alpha}, \Pi_{\beta}] = i\delta_{\alpha, \beta} \quad (3.17)$$

Nous pouvons penser à plusieurs ressorts de raideurs différentes qui sont attachés à la particule. Relâchée dans ce bain, la particule tente d'accélérer. Elle est freinée d'abord par des ressorts les plus faibles, mais au cours du temps ce sont des ressorts de plus en plus rigides qui entrent en jeu. Ainsi la particule atteint son état stationnaire. Cette idée a été exploitée par nombreux auteurs [CL81, HA85, APSJ85, APSJ86] avec les méthodes d'étude très variées. Nous développons dans cette section la méthode basée sur la transformation de Fourier régularisée, qui nous permettra de suivre l'évolution du système en exprimant les opérateurs dans l'image de Heisenberg au temps t en fonction de leurs valeurs initiales. Les équations du mouvement sont données par :

$$\begin{aligned} du_{\alpha}/dt &= \Pi_{\alpha}/m_{\alpha} & dx/dt &= p/m \\ d\Pi_{\alpha}/dt &= m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2(x - u_{\alpha}) & dp/dt &= m\gamma - \sum_{\alpha} m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2[x - u_{\alpha}] \end{aligned}$$

Notons que ces équations définissent une forme quadratique qui s'annule pour $x = u_{\alpha}$, $p = \Pi_{\alpha} = 0$. Donc dans l'approche de la quantification canonique, elle peut être ramenée à sa forme de Jordan. Et il existe donc au moins un mode quantique qui se propage avec une vitesse constante. Lorsqu'on écrit les équations du mouvement sous la forme vectorielle, la matrice d'évolution a le déterminant nul et elle n'est plus diagonalisable. Dans la partie suivante nous allons résoudre ces équations différentielles pour les opérateurs en introduisant la transformée de Fourier sur un demi-axe du temps.

²²nous choisissons les unités où $\hbar = 1$.

3.4.1 Transformée de Fourier sur un demi-axe du temps

Pour résoudre les équations du mouvement quantiques nous allons utiliser la transformation de Fourier régularisée définie sur un demi-axe réel. Cette transformation nous permettra, connaissant les opérateurs au moment initial, de les exprimer à tout instant $t > 0$. Ceci est d'utilité pratique, car en se donnant les conditions initiales nous pouvons ainsi évaluer toutes sortes de commutateurs.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[x(t)] &\stackrel{\text{def}}{\iff} \int_0^\infty x(t)e^{(ik-\varepsilon)t} dt \equiv x_\varepsilon(k) \\ \mathcal{F}^{-1}[x_\varepsilon(k)] &\stackrel{\text{def}}{\iff} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty x_\varepsilon(k)e^{-ikt} dk = x(t) \quad t > 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

La dernière équation n'est valable que dans la limite de $\varepsilon \rightarrow 0$; $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{F}^{-1}[x_\varepsilon(k)] = \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[x(t)]] = x(t)$. Les équations du mouvement dans la forme d'Euler-Lagrange sont données par :

$$\begin{aligned} \ddot{u}_\alpha + \omega_\alpha^2(u_\alpha - x(t)) &= 0 \\ m\ddot{x} &= m\gamma - \sum_\alpha m_\alpha \omega_\alpha^2 [x(t) - u_\alpha(t)] \end{aligned} \quad (3.19)$$

La transformation de Fourier sur le demi-axe²³ a une forme plus complexe que la transformation de Fourier ordinaire, mais elle peut être toujours utilisée pour résoudre les équations différentielles : $\mathcal{F}[\ddot{x}(t)] = -\dot{x}(0) + (ik - \varepsilon)x(0) + (ik - \varepsilon)^2 x_\varepsilon(k)$, où $x(0) \equiv x(t=0)$ que nous notons dans la suite tout simplement par x . La TF des équations du mouvement donne :

$$\begin{aligned} -\dot{x} + (ik - \varepsilon)x + (ik - \varepsilon)^2 x(k) &= -\frac{\gamma}{ik - \varepsilon} - \frac{1}{m} \sum_\alpha m_\alpha \omega_\alpha^2 (x(k) - u_\alpha(k)) \\ -\dot{u}_\alpha + (ik - \varepsilon)u_\alpha + (ik - \varepsilon)^2 u_\alpha(k) &= \omega_\alpha^2 (x(k) - u_\alpha(k)) \end{aligned} \quad (3.20)$$

où $x \equiv x(t=0)$ et $u_\alpha = u_\alpha(t=0)$. On extrait de ces équations la transformée de Fourier pour la position de l'objet étudié :

$$x_\varepsilon(k) = \frac{-\frac{i\gamma}{k+i\varepsilon} - \dot{x} + i(k+i\varepsilon)x - \frac{1}{m} \sum_\alpha m_\alpha \omega_\alpha^2 \frac{\dot{u}_\alpha - i(k+i\varepsilon)u_\alpha}{\omega_\alpha^2 - (k+i\varepsilon)^2}}{(k+i\varepsilon)^2 \left[1 + \frac{1}{m} \sum_\alpha \frac{m_\alpha \omega_\alpha^2}{\omega_\alpha^2 - (k+i\varepsilon)^2} \right]} \quad (3.21)$$

Cette expression n'étant pas très transparente, nous allons choisir une forme particulière de l'Hamiltonien de dissipation. Dans le cas général, en imposant la condition suivante sur les modes d'oscillateurs du bain nous obtenons l'équation du mouvement classique, voir l'annexe E, avec le terme dissipatif :

$$\sum_\alpha m_\alpha \omega_\alpha^2 \cos \omega_\alpha t = (2m/\tau)\delta(t) \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + \tau^{-1}\dot{x} = \gamma \quad (3.22)$$

²³ dans la suite je la note par TF

Le coefficient τ est le temps caractéristique que met l'objet classique pour atteindre la vitesse constante en présence des frottements. Il est possible de satisfaire la contrainte (3.22) imposée sur le bain en choisissant le bain continu d'oscillateurs.²⁴

$$\hat{H}_D = \frac{\pi\tau}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \Pi^2(\omega) d\omega + \frac{m}{2\tau\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (x - u(\omega))^2 d\omega; \quad [u(\omega'), \Pi(\omega)] = i\delta(\omega - \omega') \quad (3.23)$$

Les sommes dans l'expression pour $x_\varepsilon(k)$ se simplifient, comme :

$$\frac{\pi\tau}{m} \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}{\omega_{\alpha}^2 - (k + i\varepsilon)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^2 - (k + i\varepsilon)^2} = \frac{i\pi}{k + i\varepsilon}$$

L'équation (3.21) prend la forme moins lourde :

$$x_\varepsilon(k) = (k + i\varepsilon + i\tau^{-1})^{-1} \left\{ \frac{-i\gamma}{(k + i\varepsilon)^2} - \frac{\dot{x}}{(k + i\varepsilon)} + ix + \frac{1}{\pi\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\dot{u}(\omega) - i(k + i\varepsilon)u(\omega)}{[(k + i\varepsilon)^2 - \omega^2](k + i\varepsilon)} \right\} \quad (3.24)$$

Nous pouvons maintenant calculer la TF inverse et obtenir ainsi l'expression de l'opérateur x au moment t en fonction d'opérateurs au temps $t = 0$.²⁵

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \gamma\tau[t + \tau(e^{-t/\tau} - 1)] + \dot{x}\tau(1 - e^{-t/\tau}) + \hat{x}e^{-t/\tau} + \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{u}(\omega) \left[\frac{1}{\omega^2} - \frac{e^{-t/\tau}}{\omega^2 + \tau^{-2}} - \text{Re} \frac{e^{i\omega t} \omega^{-2}}{1 + i\omega\tau} \right] + \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{u}(\omega) \left[\frac{e^{-t/\tau}}{\tau(\omega^2 + \tau^{-2})} + \text{Im} \frac{e^{i\omega t} \omega^{-1}}{1 + i\omega\tau} \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

L'opérateur de l'impulsion de l'objet peut être trouvé facilement en prenant la dérivée par rapport au temps : $p(t) = mdx/dt$. La formule (3.25) nous permet, étant données les conditions initiales, de calculer l'évolution temporelle de n'importe quelle moyenne d'opérateurs. En pratique, il est intéressant de regarder cette évolution à grand temps, là où les effets de branchement sont évanescents. L'équation à $t \rightarrow \infty$ s'écrit comme :²⁶

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \hat{x}(t) &\approx \gamma\tau t + \dot{x}\tau + \hat{x}e^{-t/\tau} + \frac{\tau}{m} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{n}(\omega) \left[1 - \text{Re} \frac{e^{i\omega t}}{1 + i\omega\tau} \right] + \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \hat{u}(\omega) \text{Im} \frac{e^{i\omega t}}{1 + i\omega\tau} \end{aligned} \quad (3.26)$$

nous avons passé dans cette expression vers la description hamiltonienne, i.e. l'opérateur $\hat{u}(\omega)$ est remplacé par $\hat{n}(\omega) = \frac{m}{\pi\tau} \frac{\dot{u}(\omega)}{\omega^2}$. Pour monter la puissance du formalisme introduit, dans la section suivante nous allons à titre d'exemple étudier l'évolution à partir d'un état initial gaussien.

²⁴l'astuce étant de remarquer que l'équation (3.22) est satisfaite si l'on remplace $\pi\tau \sum_{\alpha} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2$ par $m \int_{-\infty}^{\infty} d\omega$. La démonstration étant standard, nous la faisons dans l'annexe E.

²⁵j'ai remis les chapeaux pour souligner que cette expression est opératorielle. Deux tests de cette équation peuvent être effectués : a) la translation globale des opérateurs de la position à temps $t = 0$ engendre la translation à temps t , i.e. $u + a, x + a \Rightarrow x(t) + a$; b) le commutateur $[x, p] = i$ n'évolue pas avec le temps.

²⁶nous gardons les termes de l'ordre le plus élevé devant chaque opérateur. Pour cette raison et par précaution le terme $\hat{x}e^{-t/\tau}$ n'est pas négligé.

3.4.2 Etat stationnaire en présence du courant continu

Du point de vue classique l'objet placé dans un champ gravitationnel constant s'accélère jusqu'au moment où les forces de frottement compensent la force gravitationnelle. Donc à grand temps son mouvement est stationnaire et la trajectoire est donnée par $x(t) = x_0 + \gamma\tau t$. Il est intéressant de voir si cette image physique est conservée si l'on considère l'évolution de l'objet quantique. Dans cette partie nous allons considérer l'évolution d'un état gaussien. En calculant le corrélateur de l'opérateur position, nous arrivons à la conclusion qu'à grand temps les états initiaux se stabilisent vers un état invariant par translation du temps. Ce résultat n'était pas du tout évident, compte tenu du fait que les fluctuations quantiques, dues aux conditions initiales, pouvaient persister même à grand temps.

Supposons que nous plaçons un paquet d'onde gaussien dans le bain d'oscillateurs qui se trouve dans son état fondamental. L'Etat initial est donc le produit direct de deux états gaussiens : $|\Omega\rangle \stackrel{def}{\longleftrightarrow} |0\rangle \otimes |\mathbb{O}\rangle$, où les états gaussiens dans les représentations position et impulsion sont respectivement donnés par :²⁷

$$\begin{aligned} \langle x|0\rangle &\sim \exp(-mx^2\Delta/2); & \langle u|\mathbb{O}\rangle &\sim \exp\left(-\frac{m}{2\pi\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega u^2(\omega)/\omega\right) \\ \langle p|0\rangle &\sim \exp\left(-p^2/(2m\Delta)\right); & \langle \Pi|\mathbb{O}\rangle &\sim \exp\left(-\frac{\pi\tau}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\omega \Pi^2(\omega)\right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Ici Δ est la largeur caractéristique du paquet d'onde, qu'on introduit dans le bain d'oscillateurs au moment $t = 0$. La valeur moyenne dans l'état gaussien de n'importe quelle expression d'opérateurs peut être réduite à une combinaison de valeurs moyennes d'opérateurs simples, ainsi que leurs corrélateurs (théorème de Wick). Les valeurs moyennes des opérateurs x, p, u, Π étant nulles, nous calculons leurs corrélateurs :

$$\begin{aligned} \langle \Omega|u(\omega)u(\omega')|\Omega\rangle &= C \iint \langle \mathbb{O}|u\rangle \langle u|u(\omega)u(\omega')|u'\rangle \langle u'|\mathbb{O}\rangle \mathcal{D}u\mathcal{D}u' = & (3.28) \\ &= C \int \mathcal{D}u u(\omega)u(\omega') \exp\left(-\frac{m}{\pi\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega u^2(\omega)/\omega\right) = \frac{\pi\tau}{2m} \omega \delta(\omega - \omega') \end{aligned}$$

où C est la constante de normalisation et $\mathcal{D}u$ est l'intégrale de chemin sur la fonction $u(\omega)$. Le tableau récapitulatif des valeurs moyennes dans l'état gaussien Ω nécessaires pour les calculs se lit comme :²⁸

$$\begin{aligned} \langle u(\omega)u(\omega')\rangle &= \frac{\pi\tau\omega}{2m} \delta(\omega - \omega') & \langle x^2\rangle &= (2m\Delta)^{-1} \\ \langle \Pi(\omega)\Pi(\omega')\rangle &= \frac{m}{2\pi\tau\omega} \delta(\omega - \omega') & \langle p^2\rangle &= m\Delta/2 \\ \langle u(\omega)\Pi(\omega')\rangle &= i/2 \delta(\omega - \omega') & \langle xp\rangle &= i/2 \\ \langle x\rangle &= \langle p\rangle = \langle u(\omega)\rangle = \langle \Pi(\omega)\rangle = 0 & & \\ \langle xu(\omega)\rangle &= \langle pu(\omega)\rangle = \langle x\Pi(\omega)\rangle = \langle p\Pi(\omega)\rangle = 0 & & \end{aligned} \quad (3.29)$$

²⁷à des constantes de normalisation près ; $\hbar = 1$

²⁸toutes les moyennes sont prises au moment initial $t = 0$

Nous allons estimer dans la suite le corrélateur de l'écart de la position moyenne de l'objet étudié à grand temps :²⁹ $\langle \Omega | \delta x(t) \delta x(t') | \Omega \rangle$, où $\delta x(t) \stackrel{\text{def}}{=} x(t) - \langle \Omega | x(t) | \Omega \rangle = x(t) - \gamma \tau t$. Nous attendons qu'il existe une échelle du temps, à partir de la quelle l'état tombant devient stationnaire, c'est-à-dire que le corrélateur de l'écart de la position ne dépend que de la différence du temps $t - t'$.

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \delta x(t) \delta x(t') | \Omega \rangle &= \frac{\tau^2 \Delta}{2m} + \\ &+ \frac{\tau}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} [\text{Re } g(t) \text{Re } g(t') - i \text{Im } g(t) \text{Re } g(t') + i \text{Re } g(t) \text{Im } g(t') + \text{Im } g(t) \text{Im } g(t')] = \\ &= \frac{\tau^2 \Delta}{2m} + \frac{\tau}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} g^*(t) g(t') \end{aligned} \quad (3.30)$$

où la fonction g est définie par $g(t) = 1 - e^{i\omega t} / (1 + i\omega\tau)$. La valeur principale de l'intégrale sur ω dans (3.30) n'étant pas divergente, nous pouvons modifier le contour de l'intégration pour obtenir :

$$\langle \Omega | \delta x(t) \delta x(t') | \Omega \rangle = \frac{\tau^2 \Delta}{2m} - \frac{i\tau}{2m} \left(\text{sign}(t' - t) [e^{-|t' - t|/\tau} - 1] + 2e^{-t/\tau} - 2e^{-t'/\tau} \right)$$

Donc dans la limite de $t \gg \tau$, $t' \gg \tau$, le corrélateur est invariant par la translation dans le temps même pour les valeurs de temps arbitrairement proche l'une de l'autre $|t - t'| \ll \tau$:

$$\langle \Omega | \delta x(t) \delta x(t') | \Omega \rangle = \frac{\tau^2 \Delta}{2m} + \frac{i\tau}{2m} \text{sign}(t - t') [e^{-|t' - t|/\tau} - 1] \quad (3.31)$$

Nous arrivons à la conclusion suivante : *le paquet d'onde gaussien relâché dans l'environnement à $t = 0$ évolue vers l'état stationnaire, qui est invariant par translation dans le temps $t \gg \tau$. Donc l'intuition classique peut être utilisée même pour le cas quantique, τ étant le temps caractéristique que met l'objet pour atteindre la vitesse constante. Ces résultats traduits dans le langage des JJ montrent l'existence des états stationnaires pour une jonction Josephson traversée par le courant continu.*

Nous pouvons continuer cette étude en considérant la JJ de type \mathbb{Z}_2 traversée par un fort courant continu :

$$\hat{H} = \frac{\hat{Q}^2}{2C} - \frac{\hbar}{2e} \left(I\hat{\theta} + I_c/2 \cos(2\hat{\theta}) \right) \approx \frac{\hat{Q}^2}{2C} - \frac{\hbar I}{2e} \hat{\theta} + O(I_c/I) \quad (3.32)$$

L'équation étant la même, mais les opérateurs au moment initial $t = 0$ peuvent être beaucoup plus complexes que dans le cas d'une JJ simple. Nous pouvons par exemple préparer un mélange d'états au départ et voir son évolution au court du temps. Ainsi les effets de déphasage peuvent être testés.

$$(|0\rangle + |\pi\rangle) \otimes |0\rangle \xrightarrow{t} |\Psi_t^1\rangle \otimes |\mathbb{I}_t\rangle + |\Psi_t^2\rangle \otimes |\mathbb{III}_t\rangle \quad \langle \mathbb{I}_t | \mathbb{III}_t \rangle \stackrel{?}{\sim} e^{-t/T^*} \quad (3.33)$$

²⁹je suppose partout dans la suite que t et t' tendent vers l'infini ; $t, t' \rightarrow \infty$

Il semble, bien que cette physique intéresse nombreuses équipes expérimentales dans le monde entier [BCB⁺04], qu'il soit difficile de voir l'excitation du gap \mathbb{Z}_2 par des mesures simples de la courbe IV , qui est notre but principal. Ceci nous incite à étudier la limite opposée de faible courant traversant la jonction $I < I_c$.

Récapitulatif de la section :

Dans cette section nous avons introduit le modèle quantique de la résistance (Caldeira-Leggett). En utilisant la transformée de Fourier définie sur le demi-axe de temps, nous avons montré l'existence des états quantiques stationnaires d'une "shunted" jonction Josephson traversée par un fort courant continu. Cette méthode est particulièrement adaptée à l'analyse des questions de la décohérence d'un état mélangé. Ceci donne une motivation pour l'étude du même modèle des JJ de symétrie \mathbb{Z}_2 , qui possèdent deux états fondamentaux, et peuvent dans le futur devenir une base des *q-bits* pour l'information quantique.

3.5 Deux modèles quasi-classiques

Nous continuons dans cette section d'explorer les différents modèles des q-bit traversés par le courant constant. Il est intéressant d'étudier le cas de faible courant d'injection $I \ll I_c$. Commençons d'abord par l'introduction intuitive. Nous poursuivons toujours la même idée : la jonction \mathbb{Z}_2 peut être considérée comme un système à deux niveaux. Le courant injecté de l'extérieur pourra exciter ce niveau énergétique. A priori la courbe tension-courant doit changer son allure lorsque l'énergie des charges injectées dans le système, qui dépend de I ,³⁰ est égale au gap $\mathbb{Z}_2 \Delta$. En effet, pour cette valeur particulière du courant, les charges traverseront la jonction plus facilement et la chute de tension doit être moins importante. Cet effet ponctuel ne serait pas visible s'il n'y avait pas de "mode locking" (annexe C). Les équations différentielles du mouvement classique qui décrivent l'ensemble des JJ, sont fortement non linéaires (3.6) et elles sont définies sur un hypertore, car les variables de phase sont 2π périodiques. C'est exactement dans ce cas que l'effet de mode locking apparaît [Arn88]. Ainsi nous espérons pouvoir trouver les plateaux dans la courbe tension-courant, comme ceux de l'escalier du diable montré précédemment Fig. 1.31 page 54. D'un point de vue plus quantitatif, il est important de confirmer cette idée par des simulations numériques. L'allure de la courbe courant-tension recherchée est présentée sur la figure 3.8.

Dans la suite nous proposons deux modèles théoriques, dont un est en cours d'être étudié numériquement. L'Effet de mode locking pourrait être observé. Le premier, qui a déjà été mentionné auparavant, est le cas d'une jonction \mathbb{Z}_2 branchée en série avec deux jonctions ordinaires, Fig. 3.6. Ceci est le schéma réaliste le plus simple qu'on puisse imaginer. Néanmoins elle possède un défaut majeur, que nous pouvons identifier en ayant bien compris les propriétés de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale (voir chapitre 2). En effet les cas uni et bidimensionnels sont très distincts du point de vue de la

³⁰ceci est vrai seulement en présence de la résistance parallèle à circuit.

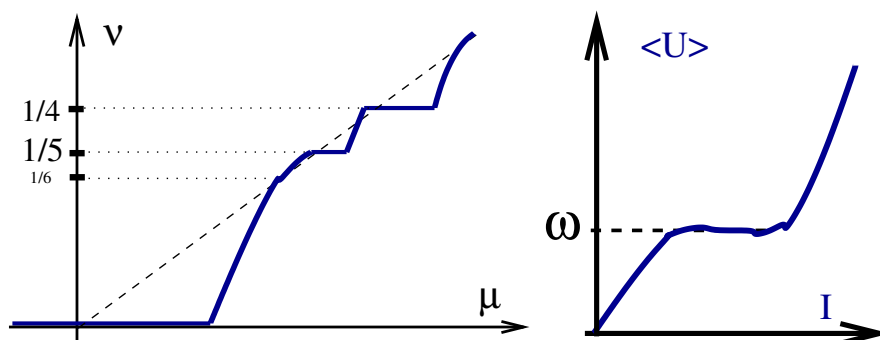


FIGURE 3.8: La courbe IV recherchée (à droite) et l'escalier du diable de la dépendance du remplissage électronique ν en fonction du potentiel chimique μ . Du point de vue expérimental il est important d'avoir un plateau suffisamment large.

symétrie. Chacun des générateurs de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale d'un réseau de losanges consiste en une transformation locale à la fois de tous les losanges liés à un site donné [KDD05]. Pour une chaîne de losanges unidimensionnelle, le choix alternatif sous la forme de transformations semi-locales³¹ d'un losange [DV02] est possible. En prenant les conditions aux limites périodiques, à une dimension nous détruirons cette deuxième possibilité. La conclusion est que *la symétrie \mathbb{Z}_2 locale est toujours associée à des sites du réseau à 2D, mais c'est le cas à 1D seulement si l'on impose les conditions aux limites périodiques.* Cette discussion est d'autant plus importante ici, car pour la description des réseaux de losanges nous avons le choix entre les deux variables. Soit on décrit la dynamique des jonctions à l'aide des phases d'îlots supraconducteurs, que j'ai toujours notées par ϕ , soit on choisit les variables de différences de phases, notées par θ . Les variables ϕ sont associées aux nœuds du réseau tandis que les variables θ aux liens (jonctions). Donc à une dimension on s'attend à ce que le système se découple en un ensemble de problèmes isolés en série. La dynamique d'un réseau $1D$ de jonctions ressemblera à celle d'une seule jonction. Il n'y aura pas d'effet notable de la symétrie \mathbb{Z}_2 sur la dynamique du système (voir dans la suite pour plus de détail). Ce problème peut être évité en imposant une rétroaction globale, pour que la sortie de la chaîne soit liée à l'entrée (il n'existe pas de transformation locale liée au losange isolé dans ce cas). Nous pouvons brancher une résistance commune pour réaliser cette rétroaction. Pour toutes ces raisons nous considérons aussi le cas bidimensionnel où les variables de phase sur chaque îlot supraconducteur sont des variables naturelles. La physique des cas uni et bidimensionnel est donc très différente.

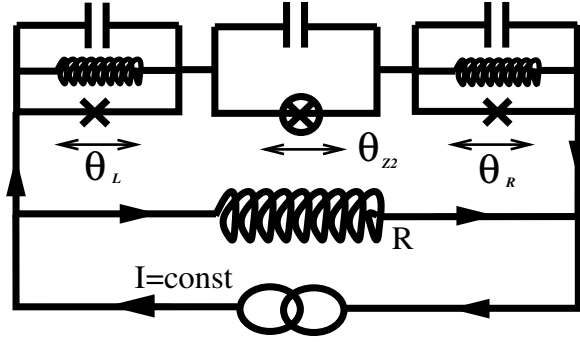


FIGURE 3.9: Le schéma d'expérience à une dimension. Dans le régime $I_L^c = I_R^c < I < I_{Z2}^c$ la résistance commune R est nécessaire pour pouvoir exciter la jonction Z_2 .

3.5.1 Modèle unidimensionnel

Nous considérons le schéma expérimental suivant : la jonction Z_2 connectée à une pile quantique via des contacts tunnels, Fig. 3.9. Nous analysons le cas où la jonction Z_2 n'est pas très perturbée par le courant I , i.e. $I < I_{Z2}^c$. L'idée étant d'exciter le gap Z_2 , les jonctions de branchement (L, R) doivent au contraire se trouver dans le régime oscillatoire $I_L^c = I_R^c < I < I_{Z2}^c$.³² La résistance commune sert à coupler les oscillations de la tension dans les jonctions de contact à la JJ Z_2 (ou du point de vue mathématique, sert à imposer les conditions aux limites "périodiques"). Enfin, les résistances R_L, R_R jouent le rôle stabilisant, qui peuvent aider à atteindre un état stationnaire de tension moyenne finie aux bornes des jonctions de contact. Les équations du mouvement classiques sont données par :³³

$$\begin{aligned}
 \frac{\hbar C_R}{2e} \ddot{\theta}_R + \frac{\hbar}{2e R_R} \dot{\theta}_R + \frac{\hbar}{2e R} (\dot{\theta}_R + \dot{\theta}_L + \dot{\theta}_{Z2}) + I_R^c \sin \theta_R &= I \\
 \frac{\hbar C_{Z2}}{2e} \ddot{\theta}_{Z2} + \frac{\hbar}{2e R} (\dot{\theta}_R + \dot{\theta}_L + \dot{\theta}_{Z2}) + I_{Z2}^c / 2 \sin(2\theta_{Z2}) &= I \\
 \frac{\hbar C_L}{2e} \ddot{\theta}_L + \frac{\hbar}{2e R_L} \dot{\theta}_L + \frac{\hbar}{2e R} (\dot{\theta}_R + \dot{\theta}_L + \dot{\theta}_{Z2}) + I_L^c \sin \theta_L &= I
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Nous pouvons tout de suite vérifier l'hypothèse annoncée auparavant : la résistance commune R étant nulle, les équations du mouvement se découplent. Pour simplifier le

³¹j'utilise le mot *semi-local*, car l'opérateur de symétrie correspondant transforme un seul losange en faisant multiplier les autres à sa droite ou à sa gauche par le facteur -1 . Pour les observables physiques c'est donc une opération locale, par contre du point de vue mathématique c'est une transformation, qui affecte une partie semi-infinie du système.

³²si $I < \min[I_L^c, I_R^c, I_{Z2}^c]$ le courant traverserait la chaîne sans aucune dissipation, le régime serait stationnaire sans effet dynamique intéressant.

³³pour obtenir ces équations il faut supposer que la charge totale du système est nulle et remarquer que les opérateurs de charges conjugués à des variables de la différence de phase $\theta_{L,R,Z2}$ sont suivants : $q_L \equiv Q_0$, $q_{Z2} \equiv Q_0 + Q_L$ et $q_R = Q_1 + Q_2 + Q_3$, où $\sum_{i=1}^4 Q_i = 0$ et $\{Q_i\}_{i=1}^4$ sont des charges de chaque îlot supraconducteur.

problème nous ne mettons pas de résistance sur la JJ \mathbb{Z}_2 . Ceci est justifié, car nous supposons qu'elle reste dans un état non dissipatif.

Essayons de comprendre le comportement classique du système. Le courant I ne pouvant pas traverser les jonctions de contact $I > I_{L,R}^c$, est obligé de passer par la résistance commune R . En même temps la tension au bord des jonctions ordinaires se met à osciller, mais grâce à la présence des résistances $R_{L,R}$ les oscillations sont atténuées. Donc la jonction \mathbb{Z}_2 est perturbée par les jonctions de contact. Nous pouvons voir ceci autrement dans la limite de très faible courant critique des jonctions de contact $I_{L,R}^c \ll I$. A l'ordre zéro $I_{L,R}^c = 0$, le courant traversant la jonction \mathbb{Z}_2 déplace légèrement la position de ses niveaux classiques fondamentaux et nous obtenons un état stationnaire tel que :

$$R_R \dot{\theta}_L = R_L \dot{\theta}_R = \frac{2e}{\hbar} \frac{R R_L R_R}{R + R_L + R_R} I \quad \text{et} \quad \dot{\theta}_{Z_2} = 0 \quad (3.35)$$

Pour simplifier supposons que $R_L = R_R = \tilde{R}/2$, dans ce cas il existe une seule fréquence caractéristique $\omega = eI\hbar^{-1}(R^{-1} + \tilde{R}^{-1})^{-1}$. A l'ordre 1 les termes $I_L^c \cos \theta_L$ et $I_R^c \cos \theta_R$ vont osciller périodiquement, entraînant les oscillations de $\theta_L + \theta_R$. Donc au voisinage de sa position d'équilibre, la coordonnée θ_{Z_2} va subir un forçage périodique linéaire, illustré sur la figure (3.10). Nous pouvons retrouver ce même résultat du point de vue énergétique. Ce système est similaire à l'ensemble de trois particules dans un potentiel périodique superposé avec le champ gravitationnel constant en présence de forces de frottements complexes. L'énergie potentielle d'un tel système est donnée par :

$$E(\theta_{Z_2}, \theta_L, \theta_R) = -\tilde{E}_J(\cos \theta_L + \cos \theta_R) - E_J \cos(2\theta_{Z_2}) - \frac{\hbar I}{2e}(\theta_{Z_2} + \theta_L + \theta_R)$$

où $\tilde{E}_J \ll E_J$. Il est clair que quoi qu'il se passe la somme des trois variables de phases "tombera" dans ce potentiel. Grâce à la présence de la résistance commune la vitesse de la "chute" sera limitée. L'une des trois ne pouvant pas bouger (θ_{Z_2}) ce sont les deux autres qui vont tomber : $\bar{\theta}_{Z_2}(t) + 2\bar{\theta}_{L,R}(t) = 2\omega t$, les particules gauche et droite étant équivalentes. L'énergie de la particule \mathbb{Z}_2 dans l'état stationnaire sera approximativement donnée par :

$$E(\theta_{Z_2}, t) \approx -\tilde{E}_J \cos(\omega t - \bar{\theta}_{Z_2}/2) - E_J \cos(2\theta_{Z_2})$$

Comme on obtient un système à deux niveaux avec le forçage périodique, nous pouvons le ramener à celui de l'oscillation de Rabi. En effet, dans l'approximation adiabatique l'Hamiltonien de ce système s'écrit comme :

$$\hat{H}_{Z_2} = V \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z \quad \text{où} \quad \hat{\sigma}_z \quad \text{est la matrice de Pauli diagonale}$$

Si l'on rajoute le couplage tunnel entre les niveaux, on obtient l'Hamiltonien de Rabi à un changement de $x \leftrightarrow z$ près.

$$\hat{H}_{Z_2} = \frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_x + V \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z \quad \text{où} \quad \Delta \quad \text{est le gap } \mathbb{Z}_2 \text{ du problème initial}$$

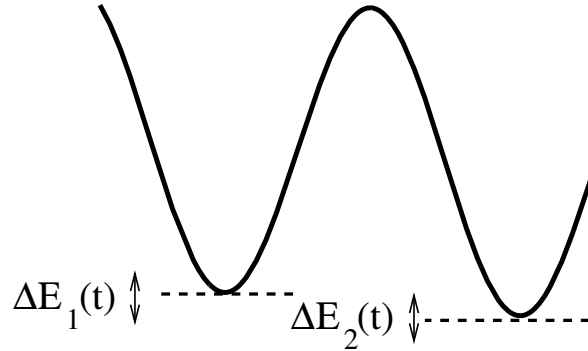


FIGURE 3.10: Les deux états de plus basse énergie d'une JJ \mathbb{Z}_2 soumis à un forçage périodique par les jonctions de contact. Ce modèle peut être ramené à celui de l'oscillation de Rabi.

Dès que la fréquence extérieure ω sera égale à la valeur du gap Δ les oscillations de la tension autour de sa valeur moyenne seront amplifiées. C'est-à-dire qu'une partie de l'énergie pompée par la source s'accumulera dans le terme cinétique et la valeur moyenne de la tension n'augmentera pas pendant un instant (le mode locking). La courbe recherchée (Fig. 3.8) doit donc être visible. Le fait que le plateau de mode locking n'est pas juste un point de la résonance $\hbar\omega = \Delta$, mais tout un intervalle, est directement lié à la présence du terme non-linéaire, qu'on n'a pas écrit explicitement dans les deux dernières équations. L'analogie est alors complète avec l'effet de mode locking utilisé dans la génération des impulsions ultra-courtes en optique. L'introduction d'un élément non-linéaire dans la cavité laser permet d'aligner les phases des ondes sortantes. Ce modèle néanmoins nécessite encore une analyse plus détaillée.

3.5.2 Modèle bidimensionnel

La chaîne $1D$, avec la matrice de capacitance sans termes diagonaux, est un cas très particulier, car les liens se découplent, en utilisant les différences de phase aux bornes de ces liens. En deux dimensions, ces différences de phase $\theta_{ij} \equiv \phi_i - \phi_j$ ne sont plus indépendantes, car $\theta_{12} + \theta_{23} + \theta_{34} + \theta_{41} = 0$ autour de chaque plaquette. Dans ce cas une approche en terme de symétries \mathbb{Z}_2 attachées aux sites (et non pas aux liens) doit garder sa pertinence. Elle sera plus proche de l'intuition initiale (physique de type Andreev, induite par le fait que chaque boson injecte doit l'être "au-dessus" du gap \mathbb{Z}_2).

Nous travaillons encore dans la limite où la JJ \mathbb{Z}_2 se trouve quasiment dans son état de plus basse énergie. Nous commençons donc par la caractérisation de l'état fondamental classique d'un réseau \mathbb{Z}_2 . Le bulk \mathbb{Z}_2 possède une certaine rigidité. La représentation graphique (Fig. 3.11) est très parlante. Nous pouvons à chaque îlot supraconducteur associer un vecteur de phase. Dans l'état fondamental, la différence de phases entre deux sites voisins est égale à 0 ou π . Donc le bulk dans l'état non perturbé aura une direction privilégiée que nous notons par $\chi \in [0, \pi]$. Elle est tout à

fait arbitraire et liée à l'invariance par rotation globale. Nous pouvons donc caractériser un état fondamental du bulk \mathbb{Z}_2 par l'ensemble de variables de spin $\{\sigma_i^z\}_i$ et une phase globale χ . En présence du couplage de bulk \mathbb{Z}_2 à un supraconducteur extérieur l'état fondamental sera modifié, mais il est toujours fructueux de tout décrire à l'aide des nouvelles variables : $\chi_j \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} \phi_j + \pi(\sigma_j^z - 1)/2 \in [0, \pi]$. Dans un état faiblement perturbé l'ensemble de $\{\chi_i\}_i$ doit être une fonction lisse de la variable de la position i . Nous allons dans la suite proposer un schéma d'expérience qui fournira une dynamique aux variables de spin. Le principe est le même qu'à une dimension, mais nous remarquons que si les équations se découpent la physique du système découpé est aussi non-triviale.

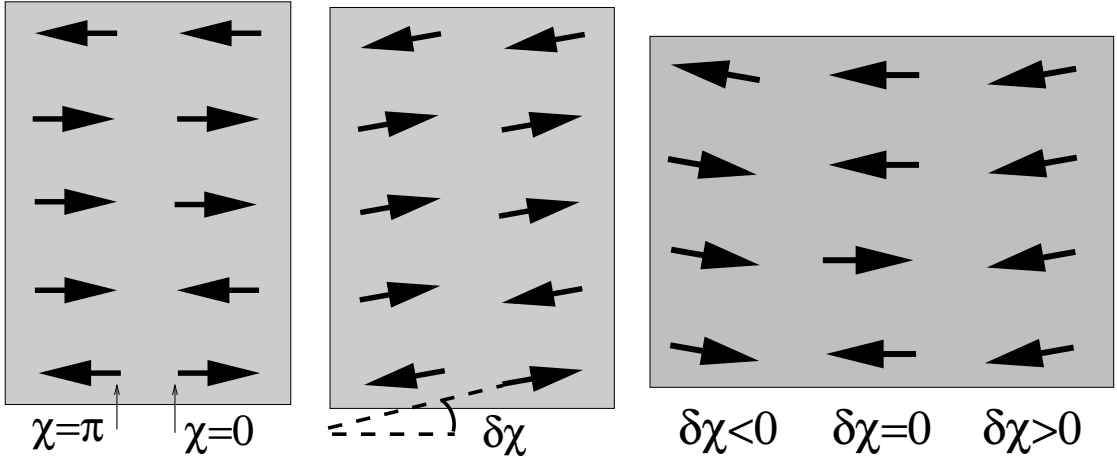


FIGURE 3.11: L'état fondamental pour un réseau de jonctions \mathbb{Z}_2 non-perturbé (à gauche) peut être représenté comme un ensemble de spins avec une phase globale homogène χ . Les conditions aux limites changent la variable χ , soit d'une manière homogène (au milieu), soit d'une façon lisse (à droite). Dans l'image classique, les variables de spin ne sont pas influencées par de faibles perturbations, et l'on néglige le couplage entre le champs continu χ et les spins.

Supposons que nous ayons un système $2D$ le plus simple possible, Fig. 3.12. Comme nous l'avons déjà mentionné, il n'est plus nécessaire de brancher une rétroaction en forme de la résistance commune. Ainsi les équations décrivant les jonctions de contacts vont se découpler de l'équation décrivant la jonction \mathbb{Z}_2 $2D$. Nous allons nous intéresser à la partie de ces équations qui mettent en jeu les variables de spin explicitement. La partie de l'énergie potentielle de ce système, qui dépend des variables de spin, s'écrira comme :

$$-\tilde{E}_J \sum_{j=1}^N \{ \sigma_{j,L}^z \cos(\phi_L - \chi_{j,L}) + \sigma_{j,R}^z \cos(\phi_R - \chi_{j,R}) \}. \quad (3.36)$$

Exprimé en variables de spin, le terme des transitions tunnels (entre les états fondamentaux équivalents) prend la forme simple : $\frac{\Delta}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_{L,j}^x + \sigma_{R,j}^x)$. En supposant

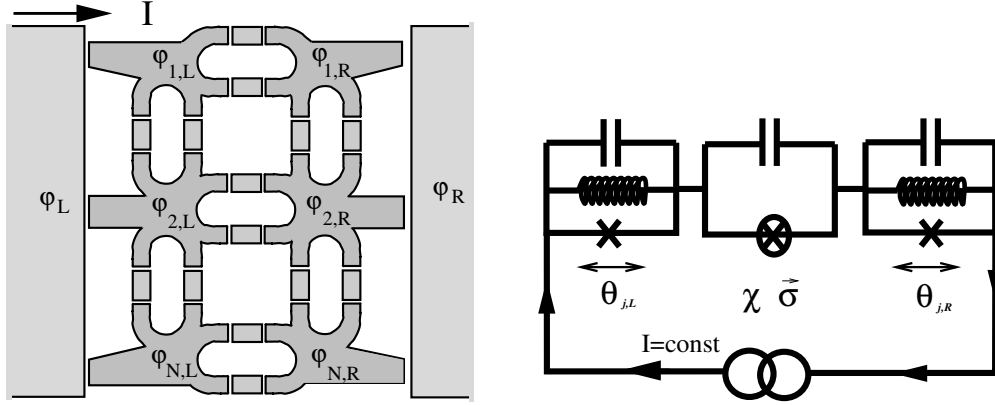


FIGURE 3.12: Le schéma de l'expérience à 2D. Il n'y a plus de résistance commune.

que les jonctions \mathbb{Z}_2 soient connectées au bulk supraconducteur à gauche et à droite d'une façon parfaitement symétrique, les équations pour les jonctions de contact seront identiques et données par :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar\tilde{C}}{2e}\ddot{\theta}_{j,R} + \frac{\hbar}{2e\tilde{R}}\dot{\theta}_{j,R} \pm \tilde{I}_c \sin \theta_{j,R} &= I/N \quad \text{où} \quad \theta_{j,R} = \phi_R - \chi_{j,R} \\ \frac{\hbar\tilde{C}}{2e}\ddot{\theta}_{j,L} + \frac{\hbar}{2e\tilde{R}}\dot{\theta}_{j,L} \pm \tilde{I}_c \sin \theta_{j,L} &= I/N \quad \text{où} \quad \theta_{j,L} = \chi_{j,L} - \phi_L \end{aligned} \quad (3.37)$$

Le signe \pm dépend du spin de la jonction \mathbb{Z}_2 connectée au bulk gauche ou droite. A condition que le courant injecté soit suffisamment fort, la dynamique de ces phases sera celle de l'objet dans le champ gravitationnel en présence de frottement. Nous pouvons faire l'hypothèse que toutes ces phases soient identiques : $\theta = \theta_{j,R} = \theta_{j,L}$ pour tout j . Alors l'Hamiltonien quantique de ce problème s'écrira tout simplement, comme :

$$\hat{H} = \frac{2e^2}{\tilde{C}}\hat{n}^2 - \frac{\hbar I}{2eN}\hat{\theta} + \Delta/2 \sum_{j=1}^N (\sigma_{L,j}^x + \sigma_{R,j}^x) - \tilde{E}_J \cos \hat{\theta} \sum_{j=1}^N (\sigma_{L,j}^z + \sigma_{R,j}^z) + \hat{H}_D$$

où \hat{H}_D est l'Hamiltonien de dissipation du type Caldeira-Leggett (3.17), qui est introduit pour prendre en compte les frottements de la phase $\hat{\theta}$; \hat{n} est l'opérateur conjugué à $\hat{\theta}$, i.e. $[\hat{\theta}, \hat{n}] = i$. Nous voyons que les indices L, R jouent un rôle identique, nous pouvons les supprimer en supposant que la somme sur j contienne explicitement la sommation sur L, R . Pour ramener l'Hamiltonien dans sa forme la plus naturelle, nous allons faire une rotation dans l'espace de spin ($\sigma^x \rightarrow \sigma^z$; $\sigma^z \rightarrow -\sigma^x$) et en plus nous introduisons l'opérateur du spin total : $\vec{S} = \sum_j \vec{\sigma}_j/2$:

$$\hat{H} = \frac{2e^2}{\tilde{C}}\hat{n}^2 - \frac{\hbar I}{2eN}\hat{\theta} + \hat{S}^z \Delta + 2\tilde{E}_J \hat{S}^x \cos \hat{\theta} + \hat{H}_D$$

La dernière approximation que nous pouvons faire est *l'approximation résonante*, qui consiste à choisir les termes d'interaction dominante pendant la résonance. Ceci est

raisonnable car l'effet de mode locking n'est rien d'autre que la résonance dans les systèmes non linéaires.

$$2\tilde{E}_J \hat{S}^x \cos \hat{\theta} \Rightarrow \tilde{E}_J / 2 (\hat{S}^+ e^{-i\hat{\theta}} + \hat{S}^- e^{i\hat{\theta}})$$

où \hat{S}^\pm sont des opérateurs conjugué-hermitiens définis par $\hat{S}^+ = \hat{S}^x + i\hat{S}^y$. Avant d'écrire les équations du mouvement nous allons simplifier au maximum le nombre de constantes qui définissent la dynamique du système :

$$\hat{H} = \hat{n}^2 / 2 - g\hat{\theta} + \omega\hat{S}^z + \lambda(\hat{S}^- e^{i\hat{\theta}} + \hat{S}^+ e^{-i\hat{\theta}}) / 2 + \hat{H}_D$$

La seule trace qu'on garde du système initial est que $g \sim I$; $\hat{\theta} \sim V$ et ω est proportionnel à la valeur du gap \mathbb{Z}_2 . Les équations de Heisenberg sont :

$$\begin{aligned} \ddot{\theta} + \dot{\theta} / \tau &= g + i\lambda(\hat{S}^+ e^{-i\hat{\theta}} - \hat{S}^- e^{i\hat{\theta}}) / 2 \\ \dot{S}^z &= -i\lambda(\hat{S}^+ e^{-i\hat{\theta}} - \hat{S}^- e^{i\hat{\theta}}) \\ \dot{S}^+ &= i\omega S^+ - i\lambda S^z e^{i\hat{\theta}} \\ \dot{S}^- &= -i\omega S^- + i\lambda S^z e^{-i\hat{\theta}} \end{aligned} \quad (3.38)$$

Le coefficient τ qui caractérise les forces de frottement, était caché dans l'Hamiltonien de la dissipation. Pour un nombre N de jonctions qui tend vers l'infini, la variable de spin \hat{S} devient classique. Dans cette limite on peut supposer que les trois composantes de spin soient mesurables simultanément, en conséquence le vecteur \vec{S} peut être traité comme un objet classique. Comme nous l'avons montré précédemment pour la phase θ il existe un état quantique stationnaire, si \vec{S} devient une variable classique, nous pouvons capturer la physique importante en considérant la dynamique du problème entièrement classique. L'effet de mode locking est fortement attendu et les études numériques sont actuellement en cours.

Pour finir, je donne ici un argument heuristique, qui justifie la présence de mode locking. Comme le carré du spin total est un invariant du mouvement [$(S^z)^2 + S^+ S^- = \text{const}$] nous pouvons écrire :

$$\frac{d}{dt} \left(\dot{\theta}^2 / 2 - g\theta + \omega S^z + \lambda(S^- e^{i\theta} + S^+ e^{-i\theta}) / 2 \right) = -\dot{\theta}^2 / \tau \quad (3.39)$$

Nous allons prendre la moyenne temporelle. Cette équation intégrée dans un intervalle de temps $\int_{t_a}^{t_b} dt$ donne :

$$\left[\dot{\theta}^2 / 2 - g\theta + \omega S^z + \lambda(\hat{S}^- e^{i\theta} + S^+ e^{-i\theta}) / 2 \right]_{t_a}^{t_b} = - \int_{t_a}^{t_b} \dot{\theta}^2 dt / \tau$$

Tous les termes sauf un dans la partie gauche de cette égalité tendent vers zéro si l'on divise tous par $|t_b - t_a|$, qui tend vers l'infini. Par exemple :

$$\lim_{t_b - t_a \rightarrow \infty} \frac{\dot{\theta}^2(t_b) - \dot{\theta}^2(t_a)}{t_b - t_a} = 0$$

car la valeur moyenne de la fréquence d'oscillation de la phase ne peut pas augmenter indéfiniment, à cause des frottements. Soit, comme le carré du spin total est borné :

$$\frac{\omega S^z + \lambda(\hat{S}^- e^{i\hat{\theta}} + \hat{S}^+ e^{-i\hat{\theta}})/2}{t_b - t_a} \Big|_{t_a}^{t_b} \longrightarrow 0$$

Nous obtenons donc :

$$g\tau \langle \dot{\theta} \rangle = g\tau \frac{\theta(t_b) - \theta(t_a)}{t_b - t_a} = \frac{\int_{t_a}^{t_b} \dot{\theta}^2 dt}{t_b - t_a} \stackrel{\text{def}}{\longleftrightarrow} \langle \dot{\theta}^2 \rangle \quad (3.40)$$

Nous arrivons à un résultat important pour le système d'équations que nous regardons : $\boxed{g\tau \langle \dot{\theta} \rangle = \langle \dot{\theta}^2 \rangle}$. En développant la moyenne du carré $\langle \dot{\theta}^2 \rangle = \langle \dot{\theta} \rangle^2 + \langle (\dot{\theta} - \langle \dot{\theta} \rangle)^2 \rangle$, où le deuxième terme décrit l'importance des oscillations de Rabi, nous introduisons le paramètre de la force d'oscillation $\alpha > 1$: $\langle \dot{\theta}^2 \rangle = \alpha \langle \dot{\theta} \rangle^2$. Enfin : $\boxed{\langle \dot{\theta} \rangle = g\tau/\alpha}$. Il faut maintenant se souvenir que $\langle \dot{\theta} \rangle \sim V$ et $g \sim I$. Donc la courbe IV doit être une droite, sauf si les oscillations commencent à jouer un rôle important $\alpha \gg 1$. Intuitivement, ceci se produit au voisinage de la condition de résonance $\langle \dot{\theta} \rangle = \omega$, car c'est ici que les échanges d'énergie entre la phase θ et le spin sont les plus intenses. Cet effet est à l'origine d'apparition des plateaux de mode locking, mais son importance reste à vérifier numériquement.

Récapitulatif de la section :

En s'appuyant sur les représentations de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale nous proposons deux schémas d'expérience les plus simples, où l'effet d'accrochage de modes pourra être visible. Ces schémas peuvent être utilisés en pratique comme des spectromètres IV de l'énergie des q-bits. La technique de mesures nécessaire pour ce spectromètre étant largement accessible, la diminution considérable du coût des manipulations est envisageable.

Conclusion

Cette thèse doctorale a porté au premier regard sur trois sujets distincts : l'étude des réseaux de *Liquides de Luttinger* par le groupe de renormalisation (chapitre 1), le développement d'une approche algébrique liant la *géométrie particulière du réseau* \mathbb{Z}_2 avec ses propriétés de transport électronique (chapitre 2) et la proposition d'un spectromètre courant-tension des niveaux énergétiques d'un *q-bit* en forme de jonction Josephson de type \mathbb{Z}_2 (chapitre 3). En regardant ce travail plus en détail, de nombreux points communs deviennent apparents. Tous les trois sujets touchent à un domaine de la physique mésoscopique, qui tente de traduire l'impact de la nature ondulatoire des particules sur les observables classiques. Nous avons toujours cherché à être réalistes en considérant des modèles théoriques avec une réalisation expérimentale envisageable dans le futur proche.

Premièrement nous nous sommes intéressés au mécanisme de l'évolution des propriétés électroniques à l'interface entre une et deux dimensions. Des systèmes physiques ayant une géométrie bien plus simple que celle des fractales, montrent un comportement multidimensionnel à différentes échelles de température. Nous avons considéré les réseaux équidistants de fils électroniques en présence d'interaction. Actuellement il existe au moins deux réalisations expérimentales possibles de fils électroniques *1D*. D'une part, c'est l'utilisation du gaz bidimensionnel d'électrons formé à la surface de séparation de deux semiconducteurs, ou bien il s'agit d'autre part de l'exploitation des conducteurs auto-organisés que représentent les nanotubes de carbone. Dans ce dernier cas, les interactions électroniques jouent un rôle crucial, tandis que dans les filaments quantiques le transport purement balistique est facilement réalisable. Nous avons exploré deux régions du paramètre caractérisant l'interaction électronique. Les diagrammes de phase ont été proposés. Dans le régime de forte interaction électronique, nous avons utilisé la technique de la bosonisation. Dans la limite opposée, nous avons construit une approche basée sur le groupe de renormalisation adapté aux systèmes périodiques. Les effets de commensurabilité sur réseau ont été mis en évidence, notamment la suppression de la conductivité à basse température pour le remplissage entier. Nous avons aussi retrouvé la caractéristique courant-tension à différentes échelles de température, qui peut être testée expérimentalement.

Dans les problèmes physiques la seule connaissance des symétries du système fournit souvent ses caractéristiques les plus importantes. Dans la suite de ce travail, motivés par les progrès récents dans la fabrication expérimentale de réseaux de fils quan-

tiques [NFM01], nous avons étudié l'impact de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale sur les propriétés électroniques des réseaux qui la possèdent. Dans le premier temps, nous avons construit explicitement les générateurs de cette symétrie, ce qui nous a permis d'obtenir de nombreuses propriétés physiques de réseaux \mathbb{Z}_2 sans passer par de lourds calculs numériques ou analytiques. La présence d'états localisés dans une cage d'Aharonov-Bohm est directement liée à la forme de la représentation irréductible du groupe \mathbb{Z}_2 local. De même, la possibilité de transport de paires d'électrons en interaction a été associée à la préservation de cette symétrie par un vaste ensemble d'interactions électroniques. Nous avons complété cette étude par l'analyse de la phase "supraconductrice" du réseau. À l'aide de la méthode du groupe de renormalisation pour les fluctuations quasi unidimensionnelles [DVD02] nous avons constaté que, la transition supraconductrice n'étant pas favorable à basse température, il existe une transition vers un état d'onde de densité de charges, stabilisée par l'effet des cages AB. Cet état, qu'on appelle la phase du métal non-cohérent, n'est pas un liquide de Fermi, car les fonctions de Green à un électron sont à très courte portée spatiale.

Dans la troisième partie nous avons utilisé nos connaissances de la symétrie \mathbb{Z}_2 pour les réseaux de jonctions Josephson. Une seule jonction ayant la symétrie \mathbb{Z}_2 est caractérisée par la dégénérescence énergétique obtenue au niveau classique. Les fluctuations quantiques lèvent légèrement cette dégénérescence, de sorte que la jonction \mathbb{Z}_2 peut être utilisée comme un q-bit d'énergie caractéristique Δ dans la théorie de l'information quantique. En s'appuyant sur la différence entre les générateurs de la symétrie \mathbb{Z}_2 locale à une et à deux dimensions, nous avons proposé deux schémas différents pour l'évaluation du gap Δ par des simples mesures de la caractéristique courant-tension de l'échantillon. Cette partie de travail repose essentiellement sur l'intuition physique, l'ensemble des conjectures n'étant pas toujours démontré rigoureusement. Au contraire, nous avons essayé de traiter en détail toutes les questions conceptuelles, notamment le modèle d'une *source de courant quantique*. L'analyse numérique reste encore nécessaire, notamment pour le schéma expérimental bidimensionnel dont nous avons obtenu les équations du mouvement classiques.

Perspectives

La physique des ces trois sujets étant très riche, nous pouvons imaginer plusieurs axes pour la recherche future. Nous avons démontré que le réseau carré possède l'unique point fixe à basse énergie (correspondant à des brins déconnectés), ce qui incite à regarder si une légère déformation de cette géométrie n'entraînera pas un changement du diagramme de phases. Il sera fructueux de regarder des systèmes proches du réseau carré caractérisés par encore un paramètre supplémentaire. Deux exemples viennent à l'esprit immédiatement : le réseau rectangulaire et le réseau de losanges. Si la transition de phase est observée, l'échantillon réalisé à base de nanotubes de carbone pourra servir dans le futur de coupleur électromécanique pour les appareils nanométriques. Nous pouvons aussi essayer de compléter nos études qualitatives des diagrammes de phases pour le facteur de remplissage électronique non-entier. Une transition métal-isolant par brisure d'analyticité [Aub80, ZCS02] est attendue pour le régime de faibles fluctuations quantiques. Toutefois, il faut être conscient de la complexité du sujet et du fait que toutes les études analytiques d'un tel système nécessiteront la connaissance approfondie

d'outils mathématiques élaborés, particulièrement la théorie de KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser).

Du côté expérimental, il sera intéressant de reprendre le modèle du réseau \mathbb{Z}_2 de filaments quantiques en prenant en compte la diffusion électronique entre les différents canaux de la conductance. Ceci expliquera probablement le doublement de la fréquence des oscillations de la magnétorésistance, observée sur le réseau "dice" à fort champ magnétique.

Notre étude des jonctions Josephson en courant continu n'étant pas encore achevée, l'analyse numérique des équations du mouvement se poursuit. Dès l'obtention des premiers résultats nous comptons réfléchir en collaboration avec une équipe expérimentale sur la réalisation dans la pratique de nos modèles théoriques.

Appendix A

Propriétés de la matrice de diffusion

La matrice de diffusion¹ est un outil puissant et parfois irremplaçable pour la description des potentiels complexes. Bien que sa définition soit très simple, les propriétés de la matrice \hat{S} , même à une dimension, ne sont pas triviales. Je consacre cet annexe pour éclairer leurs propriétés avec des exemples.

A.1 Continuation analytique de la matrice de diffusion pour les valeurs de k négatives

La matrice de diffusion, telle qu'elle est définie dans la section (1.2), n'a de sens physique que pour les valeurs d'énergie réelles, $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Pour avoir une application bijective entre k et $E \in \mathbb{R}$, k doit être soit réel positif $k > 0$, soit imaginaire positif $ik < 0$. Pour certains problèmes, il est fort utile de savoir comment se comporte la matrice \hat{S} pour les valeurs de k dans le plan complexe. Comme, par exemple, pour le cas de calcul d'intégrales de type :²

$$\int_0^{\infty} dk r^*(k) e^{-ik\Delta} + \int_0^{\infty} dk r(k) e^{ik\Delta}$$

Essayons d'abord de donner un sens physique à la matrice de transfert pour les valeurs de k négatives. On utilise la même définition de la matrice de diffusion que dans la section (1.2), voir Fig. 1.10 et Eq. (1.2). D'une façon formelle, l'expression pour la matrice de diffusion Eq. (1.4) ne changera pas si l'on y remplace k par $-k$ en même temps que les amplitudes des ondes propageant vers la gauche par les ondes propageant

¹qui est parfois appelée la matrice de transfert, la matrice de scattering ou bien la matrice- \hat{S}

²on présentera le résultat de ce calcul à la fin de cet annexe

vers la droite et vice versa ; $k \leftrightarrow -k$, $A \leftrightarrow B$ et $A' \leftrightarrow B'$. L'équation (1.4) prend la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} B' \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r'(-k) & t(-k) \\ t'(-k) & r(-k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B \end{pmatrix} \equiv \hat{S}(-k) \begin{pmatrix} A' \\ B \end{pmatrix}$$

Mais toujours de l'équation (1.4) :

$$\begin{pmatrix} A' \\ B \end{pmatrix} = \hat{S}(k) \begin{pmatrix} B' \\ A \end{pmatrix}$$

Donc on obtient une relation matricielle simple :

$$\mathbb{I} = \hat{S}(-k)\hat{S}(k), \text{ soit } \hat{S}(-k) = \hat{S}^{-1}(k) \quad (\text{A.1})$$

Cette expression se simplifie encore plus pour les potentiels qui possèdent la symétrie d'inversion du temps $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^*$ ou l'unitarité $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^\dagger$; $\hat{S}(-k) = \hat{S}^*(k)$ pour l'inversion du temps et $\hat{S}(-k) = \hat{S}^\dagger(k)$ pour l'unitarité.

Comment peut-on étendre la définition de la matrice $\hat{S}(k)$ dans tout le plan complexe de k ? On a déjà donné un sens pour $\hat{S}(k)$ sur tout l'axe réel de k . Regardons l'équation de Schrödinger pour les valeurs complexes de k (l'énergie est aussi complexe, $E \in \mathbb{C}$).

$$(\hat{H}_0 + V(x))\psi(x) = E\psi(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x) \quad (\text{A.2})$$

Les solutions en dehors de l'impureté sont, comme avant, données par les ondes planes, Eq. (1.2) page 21. En considérant le problème de Cauchy, on peut refaire le même raisonnement que dans la section 1.2, page 22, et d'en conclure que la solution existe pour toutes les valeurs de k complexes. Ceci peut paraître bizarre, mais il ne faut pas oublier qu'une bonne partie de ses solutions divergent à l'infini et ne sont donc pas physiques. D'une façon analogue à la section 1.2, Eq. (1.7), la matrice $\hat{S}(k)$ peut être défini désormais sur tout le plan complexe de k , sauf les points où $p_{11}(k) = 0$ et $k = 0$.³

On a établi précédemment, section 1.2, que la condition $p_{11}(k_0) = 0$ est équivalente à l'existence, à cette énergie E_0 , d'une solution caractérisée par seules ondes sortantes non nulles ($A' \neq 0$, $B \neq 0$, $A = B' = 0$), Fig. (1.11), et vice versa. Regardons le demi-plan supérieur de k complexe. Les ondes sortantes décroissent à l'infini, $\lim_{x \rightarrow \infty} \exp(ikx) = 0$, pour $\text{Im } k > 0$. Comme l'Hamiltonien défini sur les fonctions d'onde qui décroissent à l'infini est un opérateur hermitien, ses valeurs propres sont réelles, $E \in \mathbb{R} \Leftrightarrow ik \in \mathbb{R}$. *Les pôles dans le demi-plan supérieur de k ne peuvent exister que pour les valeurs purement imaginaires de k , $ik < 0$.* Si jamais il existait un pôle dans le plan supérieur de k , tel que $ik \notin \mathbb{R}$, cela signifierait l'existence d'une solution de l'équation de Schrödinger

³La fonction analytique $k \sim \sqrt{E}$, étant définie sur deux feuilles de Riemann, possède deux point de ramification à $E = 0$ et $E = \infty$. On peut démontrer que la matrice de diffusion reste finie dans le point $k = 0$ et ne mentionnera plus ce point spécialement.

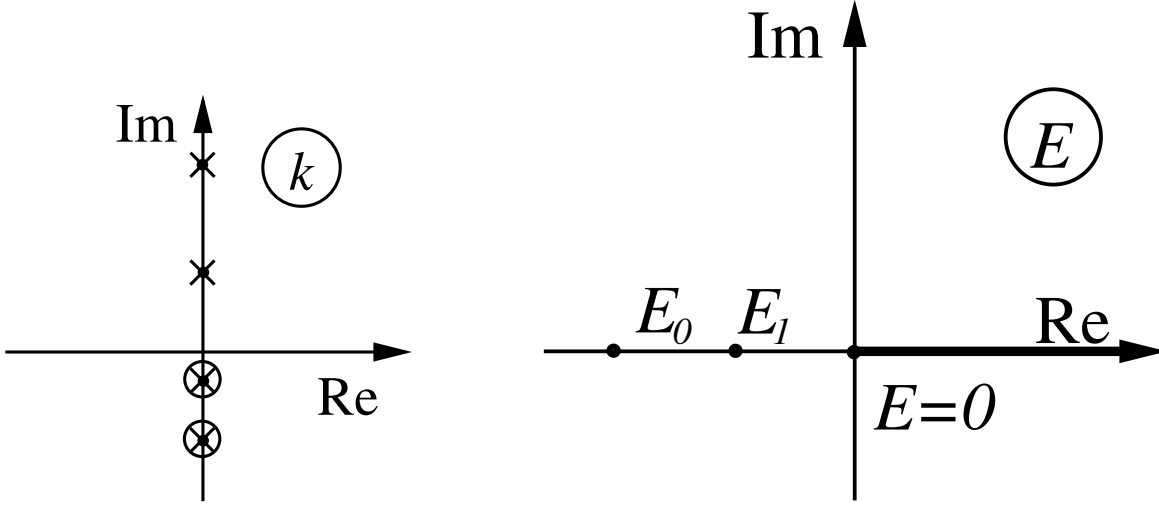


FIGURE A.1: Plans complexes de l'énergie E et du vecteur d'onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, qui mettent en évidence la présence de pôles de la matrice de diffusion $\hat{S}(k)$. Sur le plan de k les pôles, notés par \times , correspondent aux vrais niveaux énergétiques, tandis que \otimes correspondent aux niveaux d'énergie virtuels. Ces derniers se trouvent sur la feuille de Riemann non physique dans le plan complexe d'énergie. Les états virtuels sont caractérisés par la phase d'énergie égale à 3π . Ils correspondent aux solutions de l'équation de Schrödinger, qui divergent à l'infini.

évanescence à l'infini pour cette énergie, ce qui est en contradiction avec l'hermiticité d'Hamiltonien.

Avec le même raisonnement on ne peut pas, a priori, faire une affirmation pareille pour le demi-plan complexe inférieur de k . En effet la solution caractérisée par les seules ondes sortantes non nulles est divergente à l'infini pour les valeurs de k en question, donc elle a le droit d'exister. On étendra la définition de la matrice $\hat{S}(k)$ dans le demi-plan inférieur en utilisant la formule (A.1). Cette extension n'est pas valide dans les points où p_{11} ou p_{22} s'annulent : pour $p_{11}(k) = 0$ la solution n'existe pas même dans le plan supérieur et pour $p_{22}(k) = 0$ la matrice inverse \hat{S}^{-1} n'est pas définie, $\det \hat{S} = p_{22}/p_{11} = 0$. Les points où $p_{11}(k) = 0$ peuvent être éliminés par la continuation analytique, comme la limite de la matrice de diffusion dans ces points est finie :

$$\hat{S}(-k) = \hat{S}(k)^{-1} = \frac{1}{p_{22}} \begin{pmatrix} -p_{21} & 1 \\ \det \hat{\mathcal{P}} & p_{12} \end{pmatrix} \implies p_{11}(k) = p_{22}(-k)$$

On obtient donc que les divergences de la matrice de diffusion dans le demi-plan inférieur correspondent aux zéros du déterminant de \hat{S} dans le demi-plan supérieur et vice-versa. En conséquence ces divergences ne peuvent être que des pôles isolés, la fonction holomorphe ne peut s'annuler que dans les points isolés. Les points de divergence dans le demi-plan inférieur peuvent se trouver aussi à des valeurs complexes. On appelle ces états *virtuels*, car dans la théorie de diffusion générale, voir [LL89], ils correspondent à la résonance de la matrice de transmission. Pour exprimer tous ces

résultats en terme d'énergie $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, on aura à prendre le carré du vecteur d'onde k . La correspondance $E \leftrightarrow k$ sera bijective si l'on définit l'énergie sur deux feuilles de Riemann. En faisant la coupure du plan complexe d'énergie sur le demi-axe réel positif $E > 0$, on définit *la feuille physique* par la phase zéro de l'énergie juste au-dessus de la coupure. La feuille physique, qui est l'image du demi-plan supérieur de k , contiendra toutes les informations sur les états liés du potentiel. Ils se trouvent sur demi-axe réel négatif, Fig. (A.1).

Récapitulatif des informations, voir aussi [LL89] :

1. La matrice de diffusion, considérée comme fonction d'énergie complexe, possède des pôles simples sur *la feuille de Riemann physique* à des énergies négatives. Ces pôles sont associés à des états liés du potentiel.
2. Les valeurs de la matrice de diffusion sur les deux feuilles de Riemann sont reliées par $\hat{S}_{\text{phys}} = \hat{S}_{\text{nonphys}}^{-1}$
3. On appelle *états virtuels* les pôles de la matrice de diffusion sur les feuilles de Riemann non physiques. Ils correspondent aux énergies de résonance du coefficient de transmission. Normalement leur présence indique le fait que la modification mineure du potentiel conduira à l'apparition d'un état lié.
4. La coupure de l'axe réel positif du plan complexe d'énergie définit deux feuilles de Riemann. Ce nombre de feuilles est minimal pour avoir la dépendance analytique de la matrice de diffusion en énergie et provient du fait que, à l'infini, les solutions sont données par les ondes planes dépendant de la racine carrée de l'énergie $\exp(\pm i\sqrt{\varepsilon})$. Dans le cas général, pour avoir une dépendance analytique des coefficients de diffusion en fonction de l'énergie, il faut couper le plan complexe d'énergie dans plusieurs endroits et, de ce fait, rajouter les feuilles de Riemann supplémentaires. Pour des "bons" potentiels, dont le potentiel localisé fait partie, il n'y a pas de points de divergence supplémentaires sur la feuille physique. Si le potentiel à l'infini ne tend pas suffisamment vite vers zéro, $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0$, on peut avoir des pôles et même des points de ramification sur l'axe d'énergies négatives. Par exemple, pour le potentiel $V(x) = \text{const} \cdot x^n e^{-|x|^a}$ on peut avoir les pôles supplémentaires sur l'axe négatif d'énergie (*S.T.Ma, 1946*).

Pour illustrer l'utilité de la continuation analytique de la matrice \hat{S} nous finissons par donner une application simple. Soit on a affaire à un potentiel non captif (qui ne possède pas d'état lié) et on est sensé calculer une intégrale, donnée au début de l'annexe. A l'aide de prolongement analytique on obtient :

$$\int_0^{\infty} dk r^*(k) e^{-ik\Delta} + \int_0^{\infty} dk r(k) e^{ik\Delta} = \int_{-\infty}^{\infty} dk r(k) e^{ik\Delta} = 2\pi i \sum_{\text{res}} r(k) e^{ik\Delta} = 0 \quad (\text{A.3})$$

On a supposé que Δ fût positif.

A.2 Matrice \hat{S} pour deux impuretés consécutives

Dans cette section, je calculerai la matrice de diffusion correspondant à deux impuretés consécutives, placées à une distance a l'une de l'autre. Une application sera faite pour deux fonctions δ , de hauteurs différentes L_1 et L_2 , comme cette matrice est souvent utile pour tester des théories ou vérifier des hypothèses, car elle dépend déjà de trois paramètres (L_1, L_2, a).

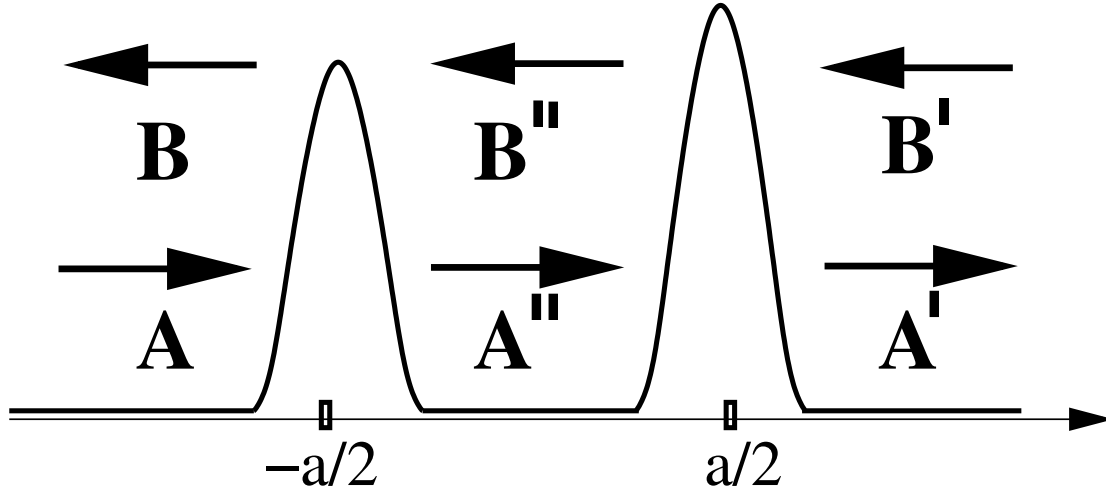


FIGURE A.2: Potentiel de deux impuretés consécutives. Les coefficients A, B sont les amplitudes de probabilité de propagation vers la gauche et vers la droite.

Supposons que le potentiel d'impuretés soit donné par :

$$V(x) = V_-(x + a/2) + V_+(x - a/2) \quad (\text{A.4})$$

où V_{\pm} sont les potentiels locaux autour du point $x = 0$.

Les matrices de diffusion de chaque impureté seront modifiées, car elles ne sont plus placées à l'origine des coordonnées. Cette propriété est directement liée à la définition de la matrice \hat{S} : si on change l'origine des coordonnées, les coefficients devant les exponentielles seront multipliés par une phase, en conséquence, les éléments de la matrice de diffusion doivent être aussi modifiés. La matrice \hat{S}_1 de l'impureté placée au point $x = -a/2$ sera :

$$\hat{S}_1 = \begin{pmatrix} r'_1 & t_1 \\ t'_1 & r_1 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} e^{ika}r'_- & t_- \\ t'_- & e^{-ika}r_- \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

On note ici par \hat{S}_- la matrice de diffusion de la même impureté placée au point $x = 0$. D'une façon analogue, on définit la matrice correspondant à l'impureté de droite :

$$\hat{S}_2 = \begin{pmatrix} r'_2 & t_2 \\ t'_2 & r_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} e^{-ika}r'_+ & t_+ \\ t'_+ & e^{ika}r_+ \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Une astuce est utile pour retrouver les multiplicateurs de phase de la matrice de diffusion. Il est évident que les coefficients de transmission ne changent pas si l'origine de

l'axe x est déplacée, comme ils relient les composantes, qui propagent dans la même direction. Pour obtenir les phases des coefficients de réflexion il est plus simple de considérer un fil déconnecté, décrit par la matrice diagonale $\hat{S} = -I$, et de remarquer que la valeur de la fonction d'onde dans à la position de l'impureté, $x = \pm a/2$, est égale à zéro.

Pour retrouver la matrice \hat{S}_{tot} de diffusion de deux impuretés consécutives, il faudrait trouver la relation entre les amplitudes des ondes entrantes (A, B') et des ondes sortantes (A', B) . Par définition des matrices \hat{S}_1 et \hat{S}_2 on a :

$$\begin{aligned} A'' &= t_1 A + r_1 B'' \\ B'' &= t'_2 B' + r_2 A'' \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Donc la solution entre les impuretés est donnée par :

$$\begin{aligned} A'' &= \frac{t_1}{1 - r'_1 r_2} A + \frac{r'_1 t'_2}{1 - r'_1 r_2} B' \\ B'' &= \frac{r_2 t_1}{1 - r'_1 r_2} A + \frac{t'_2}{1 - r'_1 r_2} B' \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

D'un autre côté, les amplitudes des ondes sortantes s'écrivent en termes de la matrice de diffusion comme :

$$\begin{aligned} B &= r_1 A + t'_1 B'' = \left(r_1 + \frac{r_2 t'_1 t_1}{1 - r'_1 r_2} \right) A + \frac{t'_1 t'_2}{1 - r'_1 r_2} B' \\ A' &= r_2 B' + t_2 A'' = \frac{t_1 t_2}{1 - r'_1 r_2} A + \left(r'_2 + \frac{r'_1 t'_2 t_2}{1 - r'_1 r_2} \right) B' \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

De là on obtient l'expression pour les coefficients de la matrice \hat{S}_{tot} de diffusion sur l'ensemble de deux impuretés :

$$\begin{aligned} r'_{\text{tot}} &= r'_2 + \frac{r'_1 t_2 t'_2}{1 - r'_1 r_2} & t_{\text{tot}} &= \frac{t_1 t_2}{1 - r'_1 r_2} \\ t'_{\text{tot}} &= \frac{t'_1 t'_2}{1 - r'_1 r_2} & r_{\text{tot}} &= r_1 + \frac{r_2 t'_1 t_1}{1 - r'_1 r_2} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Les équations (A.10) sont valables pour tous les types d'impureté, car pendant la démonstration, on n'a utilisé aucune contrainte sur les matrices de diffusion. Dans le cas où le processus de diffusion conserve le nombre de particules, nous pouvons simplifier (A.10) en utilisant l'unitarité des matrices \hat{S}_1 et \hat{S}_2 .

$$\begin{aligned} r'_{\text{tot}} &= \frac{r'_2}{r_2^*} \cdot \frac{r_2^* - r'_1}{1 - r'_1 r_2} & t_{\text{tot}} &= \frac{t_1 t_2}{1 - r'_1 r_2} \\ t'_{\text{tot}} &= \frac{t'_1 t'_2}{1 - r'_1 r_2} & r_{\text{tot}} &= \frac{r_1}{r_1^*} \cdot \frac{r_1^* - r_2}{1 - r'_1 r_2} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Cette écriture de la matrice de diffusion est beaucoup plus transparente. A part l'unitarité, on identifie facilement la condition de résonance $r'_1 = r_2^*$, c'est-à-dire la situation

où, malgré la présence de deux impuretés non triviales, l'ensemble des deux n'est pas visible lors de processus de diffusion $r_{\text{tot}} = 0$, $|t|_{\text{tot}} = 1$. En effet les amplitudes d'ondes réfléchies de la première et de la deuxième impuretés se compensent, laissant passer une onde à travers l'obstacle sans aucune diffusion en arrière. Cette propriété est utilisée aussi en optique pour augmenter la transparence des surfaces multicouches.

A.2.1 Deux fonctions δ

Considérons un exemple simple de deux impuretés delta consécutives. Soit le potentiel d'impureté s'écrit comme :

$$V(x) = \frac{1}{L_1}\delta(x + a/2) + \frac{1}{L_2}\delta(x - a/2) \quad (\text{A.12})$$

Dans ce calcul on n'écrira pas explicitement le coefficient dimensionnel multiplicatif $\frac{\hbar^2}{2m}$, car il ne modifiera pas l'expression pour la matrice de diffusion. On utilise (A.11) et les expressions de coefficients de la matrice de diffusion pour δ -fonction :

$$\begin{aligned} t_1 = t'_1 &= \frac{2ikL_1}{2ikL_1 - 1} & r'_1 &= \frac{\exp(ika)}{2ikL_1 - 1} & r_1 &= \frac{\exp(-ika)}{2ikL_1 - 1} \\ t_2 = t'_2 &= \frac{2ikL_2}{2ikL_2 - 1} & r'_2 &= \frac{\exp(-ika)}{2ikL_2 - 1} & r_2 &= \frac{\exp(ika)}{2ikL_2 - 1} \end{aligned}$$

pour obtenir la matrice de diffusion de deux fonctions δ :

$$\begin{aligned} r'_{2\delta} &= e^{-ika} \frac{2ikL_1 - 1}{\Delta(k)} + e^{ika} \frac{2ikL_2 + 1}{\Delta(k)} & t'_{2\delta} &= \frac{4k^2 L_1 L_2}{\Delta(k)} \\ r_{2\delta} &= e^{-ika} \frac{2ikL_2 - 1}{\Delta(k)} + e^{ika} \frac{2ikL_1 + 1}{\Delta(k)} & t_{2\delta} &= \frac{4k^2 L_1 L_2}{\Delta(k)} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

On introduit la fonction : $\Delta(k) \stackrel{\text{def}}{=} (2ikL_1 - 1)(2ikL_2 - 1) - \exp(2ika)$, qui définit la position des pôles de la matrice $\hat{S}(k)$.

Sur cet exemple, on peut tester les propriétés de la matrice de diffusion annoncées en A.1. Commençons par l'analyse de la fonction $\Delta(k)$ pour les valeurs de k réelles, $k \in \mathbb{R}$. Soit $\Delta(k) = 0$, alors, $(2ikL_1 - 1)(2ikL_2 - 1) = \exp(2ika)$, d'où $|(2ikL_1 - 1)(2ikL_2 - 1)| = 1$, mais $(4k^2 L_1^2 + 1)(4k^2 L_2^2 + 1) \neq 1$. Donc on conclut qu'il n'y a pas de pôle sur l'axe réel. Sur l'axe imaginaire l'analyse est plus complexe, mais peut être faite sans difficultés. Selon la figure (A.1), pour une nouvelle variable z , définie comme $z \stackrel{\text{def}}{=} 2ik$, $z \in \mathbb{R}$, les pôles de z positif vont correspondre aux états non physiques (*virtuels*) et les pôles de z négatif – aux états liés. Les résultats sont représentés sur le diagramme (A.2.1) :

1. Dans la région, où $L_1 > 0$ et $L_2 > 0$ (deux pics), il n'y a pas d'états liés de l'Hamiltonien. Pour certaines hauteurs de barrières il existe deux états virtuels, qui correspondent aux solutions divergentes à l'infini.

2. Le cas le plus intéressant est celui où on a un pic et un puits, $L_1 L_2 < 0$. On a soit un état physique, si $L_1 + L_2 + a > 0$, soit un état virtuel, si $L_1 + L_2 + a < 0$. On voit que la condition ($\int V(x)dx < 0$), qui donne ici $1/L_1 + 1/L_2 < 0 \Leftrightarrow L_1 + L_2 > 0$, n'est suffisante que pour avoir un état lié; on a déjà un état propre de l'Hamiltonien, par exemple au point $L_1 = -a/2$, $L_2 = a/10$, où cette condition n'est pas satisfaite. Cet effet est bien compréhensible. D'une manière générale, supposons qu'on ait deux impuretés de type puits et pic, qui sont assez éloignées l'une de l'autre. Si l'on calcule la moyenne de l'opérateur de Hamilton dans l'état fondamental de l'impureté de type puits, on obtiendra une valeur pas très différente de l'énergie fondamentale du puits tout seul, donc une valeur négative. Ceci est vrai, comme l'état lié est évanescent en dehors de l'impureté (décroissance exponentielle). Ensuite, par principe variationnel on conclut que l'énergie fondamentale de l'Hamiltonien total doit être plus petite que la moyenne dans tous les autres états, donc elle est négative et en conséquence l'état fondamental est un état lié. Soit $H_{\text{puits}}|\psi\rangle = E_0^p|\psi\rangle$, $E_0^p < 0$. Comme $a \gg 1$ alors $\langle\psi|\hat{H}_{\text{tot}}|\psi\rangle = E_0^p + \varepsilon$, où $\varepsilon > 0$ est la contribution positive due à l'impureté de type pic, $H_{\text{tot}}|\phi\rangle = E_0|\phi\rangle$, où $E_0 < E_0^p + \varepsilon < 0$ correspond à l'état lié. Si maintenant on rapproche le pic vers le puits, la contribution ε augmentera et peut dans certains cas rendre la valeur moyenne $E_0^p + \varepsilon$ positive. Ceci illustre la façon dont le rapprochement de deux impuretés peut détruire un état lié. Dans notre exemple nous avons une valeur critique de profondeur, $L_c = a$, au-delà de laquelle rien ne peut plus détruire un état lié; si $|L_1| > L_c$ il y a toujours un état lié. Curieusement, on a la même profondeur critique lorsque l'on rapproche un mur imperméable, caractérisé par $V(a/2) = \infty$.
3. Dans le cas de deux impuretés de type puits $L_1 < 0$, $L_2 < 0$, on a toujours deux solutions de l'équation de Schrödinger. A nouveau pour $L_1 + L_2 + a > 1$, on a deux états physiques, et dans le cas inverse un état physique et un état virtuel.

L'expression (A.13) confirme la validité de la continuation analytique de la matrice de diffusion, voir l'annexe (A.1). Les éléments de la matrice $\hat{S}(k)$ dépendent de l'énergie à travers une variable ik , et il est évident que la conjugaison hermitienne d'éléments de matrice est équivalente à la réflexion $k \Rightarrow -k$.

A.3 Matrice de diffusion ponctuelle

Je présente dans cette partie quelques propriétés de la matrice de diffusion ponctuelle, c'est -à-dire où le potentiel correspondant est décrit par les fonctions δ et ses dérivées. L'idée générale est d'analyser une base complète des solutions incidentes et d'en extraire les relations entre les éléments de la matrice de diffusion à différentes énergies.

On considère un fil unidimensionnel avec un potentiel de type δ placé dans le

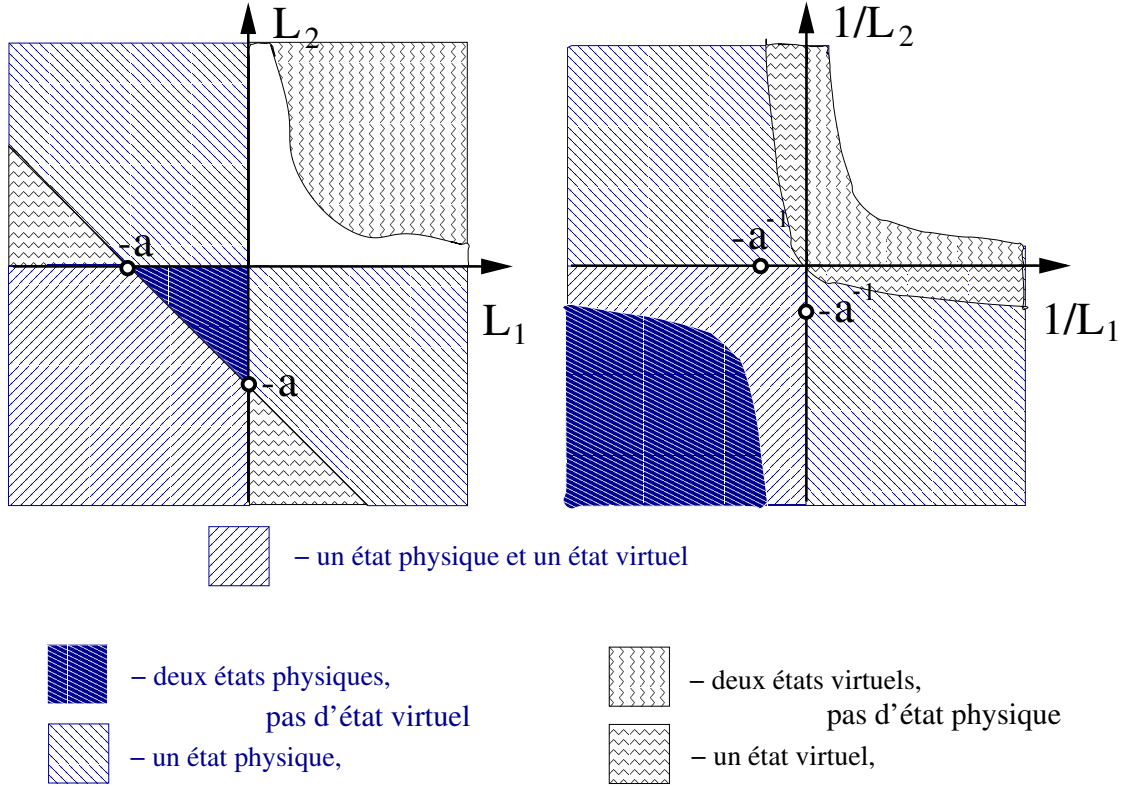


FIGURE A.3: Diagramme d'états propres de l'équation de Schrödinger pour deux fonctions δ , $V(x) = \delta(x-a/2)/L_1 + \delta(x+a/2)/L_2$, en fonction des paramètres de profondeur des puits L_1 et L_2 . Il y a des régions où on a deux ou un état lié de l'Hamiltonien. On note aussi les états virtuels, qui correspondent aux solutions non physiques divergentes à l'infini.

point $x = 0$. Les solutions, dites incidentes, s'écrivent sous la forme :

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{ikx} + r_k e^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ t_k e^{ikx} & \text{pour } x > 0 \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

où r_k , t_k sont les coefficients de réflexion et transmission gauche. D'une façon équivalente on peut définir les ondes incidentes droites. Comme l'Hamiltonien est un opérateur hermitien, les solutions incidentes correspondant aux différentes valeurs propres doivent être orthogonales : $\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \delta(k - k')$. Regardons cette expression plus en détail.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 (e^{-ikx} + r_k^* e^{ikx})(e^{ik'x} + r_k' e^{-ik'x}) dx + \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} t_k^* t_{k'} e^{i(k'-k)x} dx \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

En régularisant cette intégrale, $\int_0^\infty e^{ikx} dx = i(k + i\varepsilon)^{-1}$, on obtient

$$2\pi \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \frac{i}{k - k' + i\varepsilon} + \frac{i(t_k^* t_{k'} + r_k^* r_{k'})}{k' - k + i\varepsilon} + \frac{i r_{k'}}{k' + k + i\varepsilon} - \frac{i r_k^*}{k' + k - i\varepsilon} \quad (\text{A.16})$$

On simplifie cette expression en utilisant la formule de Sokhotsky, $(x + i\varepsilon)^{-1} = \mathcal{P}(1/x) - i\pi\delta(x)$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \frac{i}{2\pi} & \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{k - k'} \right) (1 - t_k^* t_{k'} - r_k^* r_{k'}) + \mathcal{P} \left(\frac{1}{k + k'} \right) (r_{k'} - r_k^*) \right] + \\ & + \delta(k - k') \cdot (1 + t_k^* t_{k'} + r_k^* r_{k'})/2 + \delta(k + k') \cdot (r_{k'} + r_k^*)/2 \end{aligned}$$

Dans la partie droite de l'équation, seuls les termes avec fonction delta contribuent à la normalisation de fonction d'onde, tandis que l'expression entre les crochets doit être égale à zéro, d'où :

$$1 - t_k^* t_{k'} - r_k^* r_{k'} = \frac{k' - k}{k + k'} (r_{k'} - r_k^*) \quad (\text{A.17})$$

D'une façon similaire on pourrait considérer la normalisation des fonctions d'onde incidente gauche et droite, $\int \phi_k^* \phi_{-k'} dk = 0$. Ceci donne une deuxième formule liant les composantes de la matrice de diffusion :

$$r_k^* t'_{k'} + t_k^* r'_{k'} = \frac{k - k'}{k + k'} (t'_{k'} - t_k^*) \quad (\text{A.18})$$

Ces deux relations peuvent être vérifiées sur le potentiel δ , où notre Hamiltonien est de la forme suivante : $\hat{H} = \hbar^2/(2m)(-d^2/dx^2 + \frac{1}{L}\delta(x))$. La matrice de diffusion correspondante est donnée par :

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix} = \frac{1}{2ikL - 1} \begin{pmatrix} 1 & 2ikL \\ 2ikL & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

On peut aisément vérifier les relations (A.17, A.18) pour la matrice de diffusion d'une impureté δ Eq. (A.19).

A.4 Relation de complétude pour un problème monocal

Dans cette section nous allons démontrer la complétude de la base formée des états "in". Nous utiliserons les propriétés analytiques de la matrice de diffusion établies plus haut. Supposons qu'il y a une seule impureté localisée dans le gaz électronique unidimensionnel. Le potentiel peut être décrit par la matrice S dépendant de k :

$$\hat{S}(k) = \begin{pmatrix} r'(k) & t(k) \\ t'(k) & r(k) \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

L'énergie est donnée par $E(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Nous cherchons une base complète des solutions de l'équation de Schrödinger. On fabrique alors des états "in" de diffusion : Nous pouvons essayer de fabriquer cette base à partir des états de diffusion :

$$\begin{aligned}\Psi_{k\rightarrow}(x) &= e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & \text{pour } x < 0 \\ \Psi_{k\rightarrow}(x) &= t(k)e^{ikx}, & \text{pour } x > 0\end{aligned}\quad (\text{A.21})$$

$x < 0$, resp($x > 0$) sont les notations abrégées pour signifier que la particule se trouve à gauche (à droite) de la région où le potentiel extérieur est non nul.

$$\begin{aligned}\Psi_{k\leftarrow}(x) &= t'(k)e^{-ikx}, & \text{pour } x < 0 \\ \Psi_{k\leftarrow}(x) &= e^{-ikx} + r'(k)e^{+ikx}, & \text{pour } x > 0\end{aligned}\quad (\text{A.22})$$

Notons que dans l'esprit de l'approche en terme de matrice $S(k)$, nous n'avons pas accès aux fonctions d'onde dans la région centrale, il est donc pas possible de passer d'abord par des relations d'orthogonalité pour démontrer la relation de complétude :

$$\delta(x - x') = \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} (\Psi_{k\rightarrow}(x)\Psi_{k\rightarrow}^*(x') + \Psi_{k\leftarrow}(x)\Psi_{k\leftarrow}^*(x')) \quad (\text{A.23})$$

Nous procédons directement : que signifie cette équation en terme de matrice $S(k)$? Supposons que x et x' se trouvent à gauche de l'impureté, $x < 0$ et $x' < 0$, alors :

$$\begin{aligned}\Psi_{k\rightarrow}(x)\Psi_{k\rightarrow}^*(x') &= e^{ik(x-x')} + |r(k)|^2 e^{ik(x'-x)} + r^*(k)e^{ik(x+x')} + r(k)e^{-ik(x+x')} \\ \Psi_{k\leftarrow}(x)\Psi_{k\leftarrow}^*(x') &= |t'(k)|^2 e^{ik(x'-x)}\end{aligned}$$

En utilisant l'unitarité de la matrice de transfert, $|t'(k)|^2 + |r(k)|^2 = 1$, nous simplifions l'équation (A.23) :

$$\begin{aligned}& \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} (\Psi_{k\rightarrow}(x)\Psi_{k\rightarrow}^*(x') + \Psi_{k\leftarrow}(x)\Psi_{k\leftarrow}^*(x')) = \\ &= \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} \{2 \cos[k(x - x')] + r^*(k)e^{ik(x+x')} + r(k)e^{-ik(x+x')}\}\end{aligned}$$

C'est maintenant qu'il est fructueux de se souvenir des propriétés analytiques de la matrice de diffusion. Nous avons établi précédemment (A.3), comme dans notre cas $\delta = -x - x' > 0$, ce qui annule le terme proportionnel au coefficient de diffusion :

$$\int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} (\Psi_{k\rightarrow}(x)\Psi_{k\rightarrow}^*(x') + \Psi_{k\leftarrow}(x)\Psi_{k\leftarrow}^*(x')) = \int_0^\infty \frac{dk}{\pi} \cos[k(x - x')] = \delta(x - x')$$

Mais c'est exactement cette équation que nous avons cherchée à démontrer. Si maintenant $x * x' < 0$, nous obtenons analogiquement :

$$\begin{aligned}\Psi_{k\rightarrow}(x)\Psi_{k\rightarrow}^*(x') &= t(k)e^{ik(x-x')} + t(k)r^*(k)e^{ik(x+x')} \\ \Psi_{k\leftarrow}(x)\Psi_{k\leftarrow}^*(x') &= t'(k)^* e^{ik(x'-x)} + t'(k)^* r'(k)e^{ik(x+x')}\end{aligned}$$

Ce qui donne pour la relation de complétude :

$$\int_0^{\infty} \frac{dk}{2\pi} (\Psi_{k \rightarrow}(x) \Psi_{k \rightarrow}^*(x') + \Psi_{k \leftarrow}(x) \Psi_{k \leftarrow}^*(x')) = \int_0^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \{t(k) e^{ik(x-x')} + t'(k)^* e^{ik(x'-x)}\}$$

La continuation analytique du coefficient de transmission donne :

$$\int_0^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \{t(k) e^{ik(x-x')} + t'(k)^* e^{ik(x'-x)}\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} t(k) e^{ik(x-x')}$$

Comme à haute énergie la transmission pour n'importe quel potentiel d'impureté doit être parfaite, $\lim_{k \rightarrow \infty} |t(k)|^2 = 1$, l'intégrale ne sera plus zéro à cause de la présence du résidu à l'infini :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} t(k) e^{ik(x-x')} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \{[t(k) - 1] e^{ik(x-x')} + e^{ik(x-x')}\} = \delta(x - x')$$

Donc la relation de complétude est valable pour toutes valeurs de x et x' . Notons que dans notre démonstration nous avons utilisé explicitement le fait que l'impureté ne génère pas d'états liés de l'Hamiltonien, car c'est seulement dans ce cas que la matrice S ne possède pas de pôle dans le plan supérieur de k . D'une façon analogue nous pouvons démontrer la complétude de la base "out".

Appendix B

Calcul en réponse linéaire pour le réseau de fonctions δ

Dans cette annexe je calcule les oscillations de la densité électronique dans l'approximation de la réponse linéaire pour une chaîne de fonctions δ . Soit le potentiel d'impureté :

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \quad (\text{B.1})$$

La densité d'état exprimée à l'aide de la susceptibilité de charge est :

$$\delta\rho(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \chi(x - x') \delta V(x') \quad (\text{B.2})$$

En utilisant la formule de Poisson pour les fonctions δ nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_m \delta(x - ma) &= \frac{1}{a} \sum_n \exp(2\pi i n x / a) \\ \rho(x) &= \frac{\hbar^2}{2mLa} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp(2i\pi n x' / a) \chi(x - x') = \\ &= \frac{\hbar^2}{2mLa} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(iq_n x) \chi(-q_n) = \\ \rho(x) &= \frac{1}{4\pi^2 L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(2i\pi n x / a)}{n} \log \left(\frac{k_F a - n\pi}{k_F a + n\pi} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Nous avons fait ce calcul dans l'approximation de la réponse linéaire en prenant la susceptibilité d'électrons libres (1.12). Cette approche est valable tant que le vecteur d'onde k_F est grand par rapport au paramètre caractéristique d'interaction $k_{\text{imp}} \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi/L$, $k_{\text{imp}}/k_F \ll 1$. Il est clair que la somme converge pour tout x et pour n'importe quel remplissage incommensurable $k_F a \neq n\pi$.¹ Plus on se rapproche du

¹pour ne pas avoir de divergences à remplissage commensurable, il faut considérer un système de taille finie.

remplissage entier, plus le mode d'oscillation à $2k_F$ domine les autres. L'application numérique est présentée sur la Fig. 1.19 page 35.

Appendix C

Mode locking

Nous allons décrire dans cette annexe une propriété des équations différentielles, qui détermine le comportement des nombreux systèmes physiques. Considérons d'abord une application non-linéaire d'un cercle vers lui-même $x \mapsto x' = f(x)$:¹

$$x_{n+1} = f(x_n) = x_n + \Omega - \frac{k}{2\pi} \sin 2\pi x_n \pmod{1} \quad (\text{C.1})$$

où k est le paramètre de non-linéarité et Ω est la fréquence "nue". Pour $k = 0$ cette application est une simple rotation. Dans le cas où Ω est rationnel, quoi qu'il soit la condition initiale, l'application (C.1) converge toujours vers son attracteur, ou plus précisément on retombe sur la même valeur de x_0 au bout de nombre fini d'itérations : si $\Omega = p/q$, alors $f^q(x) = x \pmod{1}$. Par contre pour les valeurs de la fréquence "nue" irrationnelles, il n'existe plus de point fixe de notre application et nous parcourons l'intervalle entier $[0,1]$. Que change le branchement du terme non-linéaire dans notre application ? Dès que $k \neq 0$, pour toutes valeurs de Ω rationnel il existe un intervalle de taille fini, dont les orbites se referment à nouveau. Cet intervalle Δ porte le nom de l'intervalle de mode locking (en anglais *mode-locked interval*). Cela signifie que le terme non linéaire de l'application permet avoir les orbites fermées même pour les valeurs de Ω irrationnel "proche" d'un nombre rationnel. La largeur de l'intervalle de mode locking dépend du nombre rationnel, auquel il est associé, $\Delta = \Delta(\Omega)$. Les nombres "les plus proches"² des nombres entiers ont une largeur de l'intervalle de stabilité plus importante. De plus, l'intervalle de stabilité s'élargit si l'on augmente l'intensité de la non-linéarité : $\Delta \nearrow$ si $k \nearrow$. Pour la valeur critique de $k = 1$ les intervalles de mode locking couvrent tout l'intervalle de $[0, 1]$, en conséquence toutes les trajectoires ($\forall \Omega$) deviennent fermées, voir [CAM⁺04].

¹en anglais *circle map*

²Evidemment la notion de "proche" peut être définie rigoureusement, par l'introduction de la classification des nombres rationnels. A titre d'exemple je donne quelques nombres rationnels en fonction de la décroissance de leur intervalle de stabilité $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{3}{5}\}$ etc.

Une interprétation des ces résultats directement en terme des équations différentielles peut être trouvée dans le livre d'Arnold [Arn88].³ Supposons qu'on considère un problème physique qui dépend de deux variables de phase ψ et ϕ . L'équation différentielle caractérisant ce système⁴ sera définie sur un tore, car les variables de phase sont périodiques $\psi \equiv \psi + 2\pi$ et $\phi \equiv \phi + 2\pi$. Supposons que le système soit très simple et que l'équation de l'évolution dépende d'un seul paramètre Ω , de sorte que :

$$\frac{d\psi}{dt} = a(\psi, \phi, t), \quad \frac{d\phi}{dt} = b(\psi, \phi, t), \quad \implies \quad \frac{d\psi}{d\phi} = \Omega = \text{const} \quad (\text{C.2})$$

Si Ω est rationnel (cas commensurable) le système parcourra un sous-espace dans son espace de phase pendant son évolution, tandis que pour Ω irrationnel (cas incommensurable), il explorera tout l'espace de phase. Le fait de brancher une interaction non-linéaire changera le comportement du système qui préférera rester dans le cas commensurable (orbite fermée) même pour certaines valeurs de Ω irrationnelles.

Cette propriété mathématique est à l'origine de nombreux phénomènes physiques, comme par exemple en optique l'utilisation d'un élément non-linéaire permet de délivrer des impulsions ultra-courtes. On pourrait aussi imaginer que le système caractérisé par les deux énergies typiques subit une résonance prolongée, non pas seulement dans le point où les deux énergies sont égales, mais dans un intervalle d'énergie.

³les propriétés de commensurabilité pour les équations sur le tore sont définies par l'application de Poincaré, qui est elle-même le difféomorphisme du cercle.

⁴par exemple l'équation de mouvement classique

Appendix D

Diagonalisation d'une matrice symplectique

Dans cette annexe nous allons discuter les propriétés des matrices symplectiques, que nous utilisons dans la quantification canonique. Dans la première partie nous démontrons comment diagonaliser la matrice symplectique non dégénérée ($\det \mathcal{M} \neq 0$). Dans la deuxième partie nous traitons l'exemple plus général, le théorème de Williamson est donné sans démonstration [Wil36], mais nous discutons en détail ses conséquences physiques.

D.1 Matrice \mathcal{H} définie positive

Supposons que nous ayons une forme bilinéaire antisymétrique (*la forme symplectique*) définie dans l'espace \mathbb{C}^{2n} :¹

$$\{\vec{X}, \vec{X}'\} = -\{\vec{X}', \vec{X}\} \stackrel{\text{def}}{\iff} (\vec{X}, J\vec{X}') = \sum J_{i,j} X_i X'_j \quad \text{où} \quad J = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix}$$

La matrice \mathcal{M} est appelée symplectique,² si la forme symplectique est invariante du mouvement de l'équation différentielle correspondante :

$$\frac{d}{dt} \vec{X} = \mathcal{M} \vec{X} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \{\vec{X}, \vec{X}'\} = 0 \quad (\text{D.1})$$

La matrice symplectique obéit à l'équation vectorielle suivante : $\mathcal{M}^t = J\mathcal{M}J$.³ Ceci implique qu'on peut définir l'opérateur symétrique \mathcal{H} correspondant à la matrice symplectique \mathcal{M} par : $\mathcal{H} \stackrel{\text{def}}{\iff} -\frac{1}{2}J\mathcal{M}$, tel que $\mathcal{H} = \mathcal{H}^t$.

¹nous notons par les parenthèses le produit scalaire dans l'espace réel : $(\vec{\xi}, \vec{\zeta}) = \sum \xi_i \zeta_i$.

²cette matrice est un élément de l'algèbre du groupe symplectique qui préserve la forme symplectique

³ \mathcal{M}^t dénote la matrice transposée (non pas la matrice conjuguée hermitienne).

Proposition : Si la matrice \mathcal{H} est réelle et définie positive, alors la matrice \mathcal{M} est diagonalisable dans \mathbb{C}^{2n} , donc toutes ses valeurs propres sont imaginaires et regroupées par paires conjuguées.

Soit μ est une valeur propre de \mathcal{M} . $\mathcal{M}\vec{X}_\mu = \mu\vec{X}_\mu$, soit $2\mathcal{H}\vec{X}_\mu = -\mu J\vec{X}_\mu$, ceci implique que $2(\vec{X}_\mu^*; \mathcal{H}\vec{X}_\mu) = -\mu\{\vec{X}_\mu^*; \vec{X}_\mu\}$.⁴ Mais comme la matrice \mathcal{H} est réelle positive $\mathbb{R} \ni (\vec{X}_\mu^*; \mathcal{H}\vec{X}_\mu) \neq 0$. Nous obtenons non seulement que $\{\vec{X}_\mu^*; \vec{X}_\mu\} \neq 0$, mais de plus que μ est purement imaginaire, comme $\{\vec{X}_\mu^*; \vec{X}_\mu\}$ est lui-même purement imaginaire :⁵ si $\mathcal{M}\vec{X}_\mu = \mu\vec{X}_\mu$, alors $\mu = i\omega \neq 0$, où $\omega \in \mathbb{R}$ et $\{\vec{X}_\mu^*; \vec{X}_\mu\} \neq 0$.

Notons que les valeurs propres de \mathcal{M} arrivent par paires, c'est-à-dire que si $i\omega_\mu$ est valeur propre de \mathcal{M} avec le vecteur propre \vec{X}_μ , $\mathcal{M}\vec{X}_\mu = i\omega_\mu\vec{X}_\mu$, alors $-i\omega_\mu$ est aussi la valeur propre de \mathcal{M} avec le vecteur propre \vec{X}_μ^* , $\mathcal{M}\vec{X}_\mu^* = -i\omega_\mu\vec{X}_\mu^*$. Ceci est une simple conséquence du fait que, la matrice \mathcal{M} n'étant composée que des éléments réels, \vec{X}_μ^* et \vec{X}_μ sont linéairement indépendants.

La procédure de diagonalisation de la matrice \mathcal{M} est strictement analogue à celle d'une matrice hermitienne. Nous savons que toutes les matrices non-nulles possèdent au moins une valeur et un vecteur propres. Dans notre cas comme les valeurs propres arrivent par paires nous pouvons trouver au moins deux valeurs propres conjuguées. Soit V le supplément orthogonal⁶ à l'espace linéaire composé de ces deux vecteurs propres \vec{X}_1, \vec{X}_1^* ; $\mathcal{M}\vec{X}_1 = i\omega_1\vec{X}_1$ et $\mathcal{M}\vec{X}_1^* = -i\omega_1\vec{X}_1^*$.

$$\vec{v} \in V \quad \text{ssi} \quad \{\vec{v}; \vec{X}_1\} = \{\vec{v}; \vec{X}_1^*\} = 0$$

Montrons que l'espace V ne contient plus de combinaisons linéaires de deux vecteurs propres initiales. Procédons par contradiction, soit il existe α, β tels que $(\alpha\vec{X}_1 + \beta\vec{X}_2) \in V$. Par définition de l'espace V on obtient que $\{\alpha\vec{X}_1 + \beta\vec{X}_2; \vec{X}_1\} = \{\alpha\vec{X}_1 + \beta\vec{X}_1^*; \vec{X}_1^*\} = 0$, soit $\beta\{\vec{X}_1^*; \vec{X}_1\} = \alpha\{\vec{X}_1; \vec{X}_1^*\} = 0$. Mais comme nous l'avons démontré $\{\vec{X}_1; \vec{X}_1^*\} \neq 0$, alors $\alpha = \beta = 0$. Donc comme en plus $\det J \neq 0$, alors $\dim V = 2(n-1)$. Le fait que \mathcal{M} ne fait pas évoluer la forme symplectique nous permet de chercher les valeurs propres dans le sous-espace V . Si $\vec{X} \in V$, alors $\mathcal{M}\vec{X} \in V$, comme $\{\mathcal{M}\vec{X}, \vec{X}_1\} = \{\mathcal{M}\vec{X}_1, \vec{X}\} = i\omega_1\{\vec{X}_1, \vec{X}\} = 0$. Nous pouvons réitérer cette procédure et obtenir $2n$ vecteurs propres de la matrice \mathcal{M} . La proposition est démontrée. Les corollaires de cette proposition sont plus importants.

Corollaires :

1) La matrice \mathcal{P} qui diagonalise \mathcal{M} a la forme suivante :

$$\mathcal{P} = (\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n, \vec{X}_1^*, \dots, \vec{X}_n^*) \quad (\text{D.2})$$

$$\mathcal{P}^{-1}\mathcal{M}\mathcal{P} = i \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n, -\omega_1, \dots, -\omega_n) \equiv i\Omega$$

⁴ \vec{X}^* est le conjugué complexe de \vec{X} .

⁵on vérifie aisément que $\{\vec{X}^*; \vec{X}\} = -\{\vec{X}; \vec{X}^*\} \Rightarrow i\{\vec{X}^*; \vec{X}\} \in \mathbb{R}$.

⁶je souligne que la notion d'orthogonalité est définie par la forme symplectique

2) Nous pouvons choisir une base orthonormale des vecteurs propres :

$$\{\vec{X}_l^*, \vec{X}_j\} = i\delta_{lj}; \quad \{\vec{X}_l, \vec{X}_j\} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{P}^t J \mathcal{P} = -iJ \quad (\text{D.3})$$

3) Vu la structure de la matrice \mathcal{P} , nous obtenons :

$$\mathcal{P}^* = \mathcal{P} \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \quad (\text{D.4})$$

D.2 Quantification canonique générale

Enfin je donne ici sans démonstration le théorème de Williamson, qui est valable dans le cas plus général où \mathcal{H} possède des valeurs propres nulles. Nous discutons ensuite les conséquences physiques de ce théorème. Dans ce cas la matrice \mathcal{M} a aussi des valeurs propres nulles, elle n'est plus diagonalisable, mais peut être ramenée dans sa forme de Jordan. La particularité de la matrice \mathcal{M} est que les blocs de Jordan ne peuvent être que de la taille 2×2 et les autres valeurs propres sont toujours des paires de nombres purement imaginaires : si $(\vec{X}, \mathcal{H}\vec{X}) \geq 0$ alors il existe \mathcal{P} telle que $\mathcal{M} \equiv 2J\mathcal{H} = \mathcal{P}^{-1} \mathcal{J} \mathcal{P}$ où \mathcal{J} est la forme de Jordan de la matrice \mathcal{M} est donnée par :

$$\mathcal{J} = \left[\begin{array}{cccc} \begin{bmatrix} 0 & m_1^{-1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \begin{bmatrix} 0 & m_l^{-1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \\ & & & \begin{bmatrix} i\omega_1 & 0 \\ 0 & -i\omega_1 \end{bmatrix} \\ & & & & \ddots \\ & & & & & \begin{bmatrix} i\omega_l & 0 \\ 0 & -i\omega_l \end{bmatrix} \end{array} \right] \quad (\text{D.5})$$

où $k + l = n$ est le nombre total de degrés de liberté.⁷ Le théorème de Williamson a des conséquences physiques importantes. Dans le cas où l'Hamiltonien du problème est défini positif (strictement) il peut être ramené par la quantification canonique à une somme d'oscillateurs (3.14) : si $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle > 0$, alors

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^n \hbar \omega_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

C'est une conséquence de la complète diagonalisation de la matrice \mathcal{M} (D.2). Que se passe-t-il si nous avons l'Hamiltonien stable, qui n'est pas strictement positif, $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq 0$. Selon le théorème de Williamson les blocs de Jordan de la taille 2×2

⁷je note les constantes dans les blocs de Jordan par m_i , car comme on le verra plus loin m_i a la dimension d'une masse.

apparaissent en plus de la partie diagonale dans la forme réduite de la matrice \mathcal{M} . Pour comprendre ce que signifie la présence de ces blocs, nous regardons la matrice \mathcal{M} pour un Hamiltonien d'une particule libre : $\hat{H} = p^2/2m$.

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & m^{-1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathcal{M} = \begin{pmatrix} 0 & m^{-1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Les blocs de Jordan de la taille 2×2 correspondent à des particules libres. Nous pouvons alors donner la forme générale de la quantification canonique : si $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq 0$, alors il peut être ramené dans la forme suivante :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^k \hbar \omega_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_{\alpha=1}^l \frac{\hat{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} \quad (\text{D.6})$$

où les opérateurs ont les règles de commutation suivante :

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] &= \delta_{i,j} & [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] &= i\hbar \delta_{\alpha,\beta} \\ [\hat{x}_\alpha, \hat{a}_j^\dagger] &= [\hat{x}_\alpha, \hat{a}_j] = 0 & [\hat{p}_\alpha, \hat{a}_j^\dagger] &= [\hat{p}_\alpha, \hat{a}_j] = 0 \end{aligned}$$

Appendix E

Modèle continu de l'Hamiltonien de dissipation

Dans cette annexe nous proposons un Hamiltonien continu de dissipation pour l'objet dans le champ gravitationnel. Soit

$$\begin{aligned}\hat{H}_{ND} &= \frac{p^2}{2m} - m\gamma x \\ \hat{H}_D &= \frac{\pi\tau}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \Pi^2(\omega) d\omega + \frac{m}{2\tau\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (x - u(\omega))^2 d\omega\end{aligned}$$

où x, p et $u(\omega), \Pi(\omega)$ sont les paires d'opérateurs conjugués : $[u(\omega'), \Pi(\omega)] = i\delta(\omega - \omega')$ et $[x, p] = i$. Les équations du mouvement s'écrivent comme :

$$\begin{aligned}\partial_t u(\omega, t) &= \frac{\pi\tau}{m} \Pi(\omega, t) \omega^2 & dx/dt &= p/m \\ \partial_t \Pi(\omega, t) &= \frac{m}{\pi\tau} (x - u(\omega, t)) & dp/dt &= m\gamma - \frac{m}{\pi\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [x(t) - u(\omega)] d\omega\end{aligned}$$

La solution pour le bain d'oscillateurs est donnée par :

$$u(\omega, t) = u^0(\omega, t) + \omega \int_{-\infty}^t dt' x(t') \sin \omega(t - t')$$

où $u^0(\omega, t)$ est la solution pour le bain d'oscillateurs isolés. Cette solution dépend des conditions initiales du problème. Comme le nombre de degrés de liberté est infini et l'objet est couplé faiblement à chaque mode donné, nous pouvons considérer cette solution comme un bruit quantique. En tenant compte de cette dernière remarque nous obtenons pour $x(t)$ l'équation du mouvement suivante :

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = m\gamma - \frac{m}{\pi\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [x(t) - \omega \int_{-\infty}^t dt' \sin \omega(t - t') x(t')] + \langle \text{bruit} \rangle$$

L'intégration par parties nous donne le résultat attendu :

$$\boxed{\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{dx(t)}{dt} = \gamma + \langle \text{bruit} \rangle}$$

List of Figures

1.1	La physique multidimensionnelle à différentes températures.	11
1.2	Quelques exemples des réseaux équidistants.	13
1.3	La jonction idéale <i>GaAlAs/GaAs</i>	15
1.4	La jonction de deux semi-conducteurs de structure cristallographique différente.	16
1.5	Réalisation expérimentale du gaz d'électron <i>2D</i> dans une hétérojonction <i>GaAlAs/GaAs</i>	17
1.6	La lithographie électronique.	18
1.7	Images du masque métallique de réseaux \mathbb{Z}_2 et T_3 (dice).	18
1.8	La gravure.	19
1.9	Le schéma de la diffusion élastique d'électrons dans une jonction.	20
1.10	Représentation schématique d'un potentiel d'impureté localisé.	21
1.11	Représentation schématique d'un état lié.	23
1.12	La matrice \hat{S} de la jonction de deux fils quantiques	24
1.13	<i>Oscillations de Friedel</i> à une dimension.	27
1.14	La susceptibilité de charge <i>1D</i> et sa transformée de Fourier.	28
1.15	Deux types d'excitations de basses énergies pour les électrons libres, $q = 0$ et $q = 2k_F$	29
1.16	Le support de la densité d'états pour les électrons libres et dans l'approximation de liaisons fortes.	30
1.17	Le potentiel de perturbation périodique.	31
1.18	La susceptibilité de charge pour un fil infini et pour le réseau de fils.	32
1.19	Calcul numérique via la réponse linéaire des oscillations de Friedel.	35
1.20	Calcul numérique des oscillations de Friedel pour le potentiel périodique de type δ	36
1.21	Contribution de la dernière bande aux oscillations de Friedel pour une matrice de diffusion constante.	37
1.22	Solutions graphique pour les états de la théorie de bande généralisée.	40

1.23	Trois exemples où on voit la structure de bande généralisée.	41
1.24	Schéma des domaines de validité pour l'approche de bosonisation et l'approche de physique du solide.	43
1.25	Le modèle de Tomonaga-Luttinger.	44
1.26	Diagramme de phase pour une impureté unique.	48
1.27	Les deux états de plus basse énergie du modèle de Frenkel-Kontorova classique.	51
1.28	Diagramme de phase du modèle de Frenkel-Kontorova pour le remplissage entier.	52
1.29	Diagramme de phase du modèle de Frenkel-Kontorova pour le remplissage rationnel.	53
1.30	Illustration du processus de la perte de mobilité par le phason.	53
1.31	Lien entre le mode locking et l'isolant de Mott.	54
1.32	Diagramme de phase possible à remplissage incommensurable $k_F a / \pi \notin \mathbb{Q}$	55
1.33	Le support du champ de phase dans le régime de faibles fluctuations quantiques.	59
2.1	Réseau \mathbb{Z}_2 unidimensionnel en présence du champ magnétique perpendiculaire.	79
2.2	L'effet d'Aharonov-Bohm.	81
2.3	La cage d'Aharonov-Bohm.	81
2.4	Représentation du réseau \mathcal{T}_3 (dice lattice) et de réseaux \mathbb{Z}_2 uni et bidimensionnel.	82
3.1	Représentation d'un q-bit à base d'une jonction Josephson \mathbb{Z}_2	101
3.2	Comportement de l'énergie de la JJ \mathbb{Z}_2 en fonction de $\gamma = \phi / \phi_0$	105
3.3	Une jonction Josephson réaliste [Shunted Josephson junction].	106
3.4	Le potentiel "washboard" pour la JJ traversée par le courant continu.	107
3.5	Le schéma de la JJ \mathbb{Z}_2 connectée à une source de courant.	108
3.6	Le schéma électrique de la JJ \mathbb{Z}_2 connectée à une source de courant.	109
3.7	L'énergie du bulk supra en fonction de la différence de phases aux extrémités.	110
3.8	La courbe IV recherchée et l'escalier du diable.	120
3.9	Le schéma de l'expérience proposée à une dimension.	121
3.10	Les deux états de plus basse énergie d'une JJ \mathbb{Z}_2 soumis à un forçage périodique.	123
3.11	Représentation de l'état fondamental du bulk \mathbb{Z}_2 à l'aide des opérateurs de spin et un mode de Goldstone.	124
3.12	Le schéma de l'expérience proposée à $2D$	125

LIST OF FIGURES

A.1	Plans complexes de l'énergie E et du vecteur d'onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, qui mettent en évidence la présence de pôles de la matrice de diffusion $\hat{S}(k)$	135
A.2	Potentiel de deux impuretés consécutives.	137
A.3	Diagramme d'états propres de l'équation de Schrödinger pour deux fonctions δ	141

Bibliography

- [APSJ85] C. Aslangul, N. Pottier, and D. Saint-James, *J. Physique*. **46** (1985), 2031.
- [APSJ86] ———, *J. Physique*. **47** (1986), 1657.
- [Arn88] V. I. Arnold, *Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations*, ch. 3, Springer, 1988.
- [Aub80] S. Aubry, Proceedings of the Les Houches Summer School, Session XXXV, North-Holland Publishing Company, 1980, p. 431.
- [Aub83] S. Aubry, *J. Physique*. **44** (1983), 147.
- [BCB⁺04] P. Bertet, I. Chiorescu, G. Burkard, K. Semba, C. J. P. M. Harmans, D. P. DiVencenzo, and J. E. Mooij, cond-mat/0412485 (2004).
- [BCS57] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *PRL* **108** (1957), 1175.
- [BEAH01] I. S. Beloborodov, K. B. Efetov, A. Altland, and F. W. J. Hekking, *Phys. Rev. B* **63** (2001), 115109.
- [BH00] O. Buisson and F. W. Hekking, cond-mat/0008275 (2000).
- [Büt86] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986), 1761.
- [CAM⁺04] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner, and G. Vattay, *Chaos : Classical and quantum*, ch. Irrationnaly winding, ChaosBook.org/version10 Niels Bohr Institute, Copenhagen, 2004.
- [CBHB04] J. Claudon, F. Balestro, F. W. J. Hekking, and O. Buisson, cond-mat/0405430 (2004).
- [CF01] V. Cataudella and R. Fazio, cond-mat/0112307 (2001).
- [CL81] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981), 211.
- [CNHM03] I. Chiorescu, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans, and J. E. Mooij, *Science* **299** (2003), 1869.
- [Dev97] M. H. Devoret, *Fluctuations quantiques*, ch. Quantum Fluctuations in Electrical Circuits, Elsevier Science, 1997.
- [DFI03] B. Douçot, M. V. Feigel'man, and L. B. Ioffe, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), 107003.
- [DJ94] P. Singha Deo and A. M. Jayannavar, *Phys. Rev. B* **50** (1994), 11629.
- [DM04] J. Dufouleur and D. Mailly, *communication privée*, 2004.
- [DMS00] T. Dröse and C. Morais-Smith, *Phys. Rev. B* **61** (2000), 1506.
- [Dou99] B. Douçot, *Lectures on strongly correlated electrons, Vietnam*, 1999.
- [Dus02] S. Dusuel, *Déformation de la surface de fermi pour un système fortement anisotrope d'électrons en interaction*, Ph.D. thesis, Université Denis Diderot, 2002.
- [DV02] B. Douçot and J. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), 227005.
- [DVD02] S. Dusuel, F. Vistulo de Abreu, and B. Douçot, *Phys. Rev. B* **65** (2002), 094505.
- [DWM04] M. H. Devoret, A. Wallraff, and J. M. Martinis, cond-mat/0411174 (2004).
- [EG95] R. Egger and H. Grabert, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), 3505.

- [FHK98] R. Fazio, F. W. J. Hekking, and D. E. Khmel'nitski, Phys. Rev. Lett. **80** (1998), 5611.
- [FIG⁺04] M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, Geshkenbein, P. Dayal, and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **92** (2004), 098301.
- [FK38] Y. I. Frenkel and T. K. Kontorova, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **8** (1938), 1340.
- [FPC⁺00] Jonathan R. Friedman, Vijay Patel, W. Chen, S. K. Tolpygo, and J. E. Lukens, Nature (London) **406** (2000), 43.
- [Fri58] J. Friedel, Nouvo Cim. Suppl. **7** (1958), 287.
- [HA85] V. Hakim and V. Ambegaokar, Phys. Rev. A **32** (1985), 423.
- [Hal81] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14** (1981), 2585.
- [HC00] C. Ho and C. Chou, Phys. Rev. E **63** (2000), 016203.
- [HCJH03] H. Hayashi, T. Fujisawa H. D. Cheong, Y. H. Jeong, and Y. Hirayama, Phys. Rev. Lett. **91** (2003), 226804.
- [HL00] B. Hu and B. Li, Physica A **288** (2000), 81.
- [IFI⁺02] L. B. Ioffe, M. V. Feigel'man, A. Ioselevich, D. Ivanov, M. Troyer, and G. Blatter, Nature (London) **415** (2002), 503.
- [IGF⁺02] L. B. Ioffe, V. B. Geshkenbein, M. V. Feigel'man, A. L. Fauchere, and G. Blatter, Nature (London) **415** (2002), 503.
- [Jos62] B. Josephson, Phys. Lett. **1** (1962), 251.
- [KD05] K. Kazymyrenko and B. Douçot, Phys. Rev. B **71** (2005), 075110.
- [KDD05] K. Kazymyrenko, S. Dusuel, and B. Douçot, cond-mat/0507376 (2005).
- [KF92a] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **46** (1992), 15223.
- [KF92b] ———, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 1220.
- [KNC⁺05] J. M. Kivioja, T. E. Nieminen, J. Claudon, O. Buisson, F. W. J. Hekking, and J. P. Pekola, cond-mat/0501383 (2005).
- [KS97] T. Kottos and U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. **79** (1997), 4794.
- [Lan70] R. Landauer, Phil. Mag. **21** (1970), 863.
- [LL89] L. D. Landau and E. M. Livshitz, *Quantum mechanics*, ch. XVII, Nauka, 1989.
- [LLS96] A. Leclair, F. Lesage, and H. Saleur, Phys. Rev. B **54** (1996), 13597.
- [LRS02] S. Lal, S. Rao, and D. Sen, Phys. Rev. B **66** (2002), 165327.
- [Lut63] J. M. Luttinger, J. of Math. Phys. **4** (1963), 1154.
- [Mar04] J. M. Martinis, cond-mat/0402415 (2004).
- [MCB93] D. Mailly, C. Chapelier, and A. Benoit, Phys. Rev. Lett. **70** (1993), 2020.
- [MNAU02] John M. Martinis, S. Nam, J. Aumentado, and C. Urbina, Phys. Rev. Lett. **89** (2002), 117901.
- [Mon98] G. Montambaux, Eur. Phys. J. **1** (1998), 377.
- [Nau02] C. Naud, *Transport quantique dans des nanostructure*, Ph.D. thesis, Université Paris VI, 2002.
- [NC00] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [NFM01] C. Naud, G. Faini, and D. Mailly, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 5104.
- [Pei96] R. Peierls, *Quantum theory of solids*, ch. 5, Oxford University Press, 1996.
- [PF04] I. Protopopov and M. Feigel'man, cond-mat/0405170 (2004).
- [PYA⁺03] Yu. A. Pashkin, T. Yamamoto, O. Astafiev, Y. Nakamura, D. V. Averin, and J. S. Tsai, Nature (London) **421** (2003), 823.

- [Saf97] I. Safi, *Propriété d'un fil quantique connecté à des fils de mesure*, Ann. Phys. **22** (1997), 463–679.
- [Ser02] E. Serret, *Etude de réseaux de nanojonctions josephson*, Ph.D. thesis, Université Joseph Fourier, 2002.
- [Sho95] P. Shor, Phys. Rev. A **52** (1995), R2493.
- [SLH⁺04] R. W. Simmonds, K. M. Lang, D. A. Hite, S. Nam, D. P. Pappas, and John M. Martinis, Phys. Rev. Lett. **93** (2004), 077003.
- [SS95] I. Safi and H. J. Schulz, Phys. Rev. B **52** (1995), R17040.
- [SS04] I. Safi and H. Saleur, Phys. Rev. Lett. **93** (2004), 126602.
- [SWR90] R. L. Schult, H. W. Wyld, and D. G. Ravenhall, Phys. Rev. B **41** (1990), 12760.
- [Tin96] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity*, Mac graw-Hill New York, 1996.
- [TM04] C. Texier and G. Montambaux, cond-mat/0505199 (2004).
- [Tom50] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5** (1950), 544.
- [UA96] S. Uryu and T. Ando, Phys. Rev. B **53** (1996), 13613.
- [VMD98] J. Vidal, R. Mosseri, and B. Douçot, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), 5888.
- [VMD00] J. Vidal, G. Montambaux, and B. Douçot, Phys. Rev. B **62** (2000), R16294.
- [WH01] M. Wanatabe and D. Haviland, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 5120.
- [Wil36] J. Williamson, Amer. J. of Math. **58** (1936), 141.
- [YGM94] D. Yue, L. I. Glazman, and K. A. Matveev, Phys. Rev. B **49** (1994), 1966.
- [ZCS02] O. V. Zhirov, G. Casati, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. E **65** (2002), 026220.

Réseaux de Liquides de Luttinger Couplés

Résumé :

Cette thèse propose une étude théorique des propriétés de transport électronique dans divers réseaux d'une taille nanoscopique, dont la production est devenue possible grâce au progrès récents de la technique de nanofabrication. Les trois types de dispositifs ont été analysés : les nanotubes, les filaments quantiques et les jonctions Josephson. Dans la première partie nous retrouvons, par les méthodes du groupe de renormalisation et de la bosonisation, les diagrammes de phase pour les réseaux réguliers de fils quantiques dans les régimes de faible et forte interaction électronique. Dans la deuxième partie nous nous intéressons aux effets combinés des interférences quantiques dans les réseaux de symétrie \mathbb{Z}_2 locale en présence d'interaction Coulombienne. Dans le dernier chapitre nous proposons un modèle du spectromètre courant-tension mesurant l'énergie des q-bits, qui peut trouver ses applications dans la théorie de l'information quantique.

Mots-clés : *Liquide de Luttinger, filament quantique, jonction Josephson, matrice de diffusion, oscillation de Friedel, cage d'Aharonov-Bohm*

Regular Networks of Luttinger Liquids

Abstract :

This thesis broaches the theoretical study of electronic transport properties for diverse nanoscale arrays, which fabrication was made possible by the recent advances in nanotechnology. Three types of experimental setups are analysed : the nanotubes, the quantum wires and the Josephson junctions. In the first chapter, using the renormalisation group method and the bosonisation technique, we find the phase diagrams for regular networks of quantum wires in two regimes of strong and weak electronic interaction. Next, we focus on combined effects of quantum interference for local \mathbb{Z}_2 symmetry arrays in the presence of Coulomb interaction. In the last chapter we propose the tension-current spectrometer of qubits, that could be used in the domain of quantum information.

Mots-clés : *Luttinger Liquid, quantum wire, Josephson junction, scattering matrix, Friedel oscillation, Aharonov-Bohm cage*