



Effet Kondo dans une géométrie triterminale

Julien Salomez

► To cite this version:

Julien Salomez. Effet Kondo dans une géométrie triterminale. Physique [physics]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2006. Français. NNT: . tel-00079827v1

HAL Id: tel-00079827

<https://theses.hal.science/tel-00079827v1>

Submitted on 13 Jun 2006 (v1), last revised 14 Jun 2006 (v3)

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.

Thèse

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Joseph Fourier
Grenoble I

Discipline : *Physique*

Auteur : *Julien SALOMEZ*

Date de soutenance : *2 Juin 2006*

Effet Kondo dans une géométrie triterminale

Composition du jury :

Frank HEKKING (Président)

Pascal DEGIOVANNI (Rapporteur)

Karyn LE HUR (Rapporteur)

Christopher BAUERLE (Examineur)

Denis FEINBERG (Directeur)

Pascal SIMON (Co-directeur)

Thèse préparée au Laboratoire de Physique et Modélisation des
Milieux Condensés, CNRS et UJF, Grenoble

Table des matières

I Introduction à la physique mésoscopique et à l'effet Kondo 15

1 Généralités sur la physique mésoscopique 19

1.1	Hétérostructures semi-conductrices, gaz d'électrons bidimensionnel	19
1.2	Points quantiques	21
1.2.1	Définition d'un point quantique	21
1.2.2	Energies caractéristiques d'un point quantique	22
1.3	Cadre de la physique mésoscopique	23
1.3.1	Généralités	23
1.3.2	Quelques mots sur le régime diffusif ; notion de désordre	24
1.4	Formule de Landauer et Buttiker	24
1.4.1	Introduction de la formule de Landauer	24
1.4.2	Démonstration de la formule de Landauer	25
1.4.3	Généralisation multiterminale	26
1.4.4	Lien avec la matrice S	26
1.5	Formalisme de Keldysh et formule de Meir-Wingreen	27
1.5.1	Formalisme de Keldysh	27
1.5.2	Application à la formule de Meir-Wingreen	29
1.6	Blocage de Coulomb	30
1.6.1	Définition du blocage de Coulomb	30
1.6.2	Allure de la courbe donnant la conductance du système en fonction de la température dans un régime de blocage de Coulomb	33

2 Effet Kondo 41

2.1	Effet Kondo dans un métal	41
2.1.1	Introduction historique	41
2.1.2	Observation de l'effet Kondo par microscopie à effet tunnel	43
2.2	Effet Kondo dans un point quantique	44
2.3	Différents types de points quantiques	45
2.3.1	Effet Kondo dans un nanotube de carbone	45
2.3.2	Effet Kondo dans une molécule	46
2.4	Groupe de renormalisation et points fixes de l'Hamiltonien Kondo	46
2.4.1	Introduction du groupe de renormalisation ([27],[49])	46
2.4.2	Points fixes du groupe de renormalisation	48

2.4.3	Point fixe de couplage fort et écrantage	48
2.4.4	Interpolation entre le point fixe de couplage fort et le point fixe de couplage faible	50
2.4.5	Résumé des techniques utilisées pour l'étude du problème Kondo . .	52
2.4.6	Résonance Kondo	52
2.5	Effet Kondo en présence d'effets de taille finie	54
2.5.1	Effet Kondo dans une boîte de petite taille contenant des impuretés magnétiques ([55],[57])	54
2.5.2	Point quantique inséré dans un fil quantique de taille finie	55
2.5.3	Anneau contenant un point quantique	58
2.6	Approche expérimentale de l'effet Kondo ([19],[20])	62
2.7	Différents types d'effet Kondo	64
II	Première approche de la géométrie triterminale	69
3	Introduction de la géométrie triterminale	73
3.1	Définition de la géométrie triterminale	73
3.1.1	Position du problème	73
3.1.2	Modélisation du système	74
3.2	Motivation de l'étude	79
3.2.1	Calcul de la conductance pour les géométries biterminale et triterminale	79
3.2.2	Comparaison des géométries biterminale et triterminale	83
3.3	Bilan	85
4	Etude du système à température nulle par la théorie des liquides de Fermi	87
4.1	Modèle de liaisons fortes	87
4.1.1	Hamiltonien du système	87
4.1.2	Formule de Landauer et Büttiker	88
4.2	Expression de la conductance à $T = 0$ grâce à un formalisme de diffusion et à la formule de Landauer et Büttiker	90
4.3	Expression de la conductance à $T = 0$ en utilisant la théorie des liquides de Fermi	91
4.4	Cas T_3 non conducteur	92
4.5	Au-delà du régime liquide de Fermi	92
4.6	Bilan	94
III	Effets de taille finie dans une géométrie triterminale	97
5	Groupe de renormalisation et calcul de la température Kondo	101
5.1	Introduction du groupe de renormalisation	101

5.2	Cas triterminal	108
5.2.1	Equations du groupe de renormalisation	108
5.2.2	Evaluation de la densité d'état de T_3	109
5.2.3	Calcul de la température Kondo	110
5.3	Bilan	113
6	Influence des effets de taille finie sur la conductance	115
6.1	Etude perturbative du système à haute température	115
6.1.1	Principe du calcul perturbatif	116
6.1.2	Calcul perturbatif de la matrice de conductance au deuxième ordre	116
6.1.3	Matrice de conductance à l'ordre 3	118
6.1.4	Bilan	123
6.2	Comportement de la conductance à température finie très inférieure à T_K .	123
6.2.1	Résumé de l'article de Nozières [26]	125
6.2.2	Position du problème et hypothèses	128
6.2.3	Calcul de $Im(T(\epsilon))$	129
6.2.4	Calcul de la conductance	132
6.2.5	Bilan	133
6.3	Etude du système pour $T < T_K$	134
6.3.1	Présentation de la méthode des bosons esclaves en champ moyen . .	134
6.3.2	Spectroscopie de la densité locale d'état du point quantique	135
6.3.3	Conductance en fonction de la température	140
6.3.4	Bilan	142
6.4	Bilan général	144
7	Conclusion	145
7.1	Résumé des résultats	145
7.2	Perspectives	146
7.2.1	Effets d'interaction en présence d'effets de taille finie	146
7.2.2	Effet Kondo hors équilibre en présence d'effets de taille finie	148
7.2.3	Perspectives expérimentales	150
7.2.4	Résumé des perspectives	152
A	Démonstration de la formule de Meir-Wingreen	153
B	Transformation de Schrieffer-Wolff	155
C	Modélisation du système par des condensateurs : construction du diagramme de stabilité	157
D	Détermination des coefficients de transmission dans un modèle de liaisons fortes, dans le cas sans interaction	165

E	Calcul perturbatif de la matrice de conductance à haute température à l'ordre 3	167
F	Calcul de la conductance à $T \ll T_K$ dans le cas $\frac{\gamma}{T} \ll 1$	171
G	Calcul de la hauteur du plateau de la courbe donnant la conductance à la résonance d'un point quantique inséré entre deux fils de taille finie	173
H	Etude de l'origine physique de la scission du pic Kondo lorsque le niveau de Fermi est un maximum de la densité d'état de T_3	175

Remerciements

Bien que la physique mésoscopique ne soit pas le domaine de la physique qui me passionne le plus, mes trois ans de thèse ont été pour moi une expérience très intéressante et positive.

Ces années ont été pour moi l'occasion d'approfondir mes connaissances en physique du solide. Elles ont aussi été l'occasion de me familiariser avec des méthodes théoriques que j'avais étudié en DEA mais que je n'avais pas vraiment eu l'occasion d'appliquer. Ainsi, j'ai été amené à utiliser des notions de théorie des champs comme la seconde quantification ou le groupe de renormalisation, et cela m'a beaucoup intéressé.

Je souhaite tout d'abord remercier Denis Feinberg et Pascal Simon pour le temps important qu'ils ont consacré à mon encadrement.

Ensuite, je veux remercier les membres de mon jury pour le travail qu'ils ont accompli. Je les remercie en particulier pour les remarques qu'ils ont faites en vue d'améliorer le manuscrit.

Que soient remerciés aussi mes collègues de bureau Alexandre, Raffaello, Guillaume, Domitille et les stagiaires qui sont passés. Ils ont tous été très sympathiques et ont contribué à créer une excellente ambiance au labo.

Mes remerciements également à Michelle pour le côté administratif de la thèse et à Françoise pour le côté informatique.

Introduction

Historiquement, l'effet Kondo a été découvert après qu'il ait été observé une valeur anormalement élevée de la résistance de certains métaux à basse température. Cette anomalie a été interprétée en supposant la présence d'impuretés magnétiques écrantées par des nuages d'électrons. Ces nuages d'électrons ont pour effet de diffuser les électrons de conduction en augmentant ainsi la résistance ([1]).

Plus tard, on s'est rendu compte que le même type d'effet pouvait se manifester dans les points quantiques, sortes de boîtes à électrons mésoscopiques. Lorsque le spin d'un point quantique est impair (et lorsque certaines autres conditions que nous verrons ultérieurement sont satisfaites), le spin du point est écranté par les électrons de conduction à basse température. Contrairement à ce qui se passe dans un métal, ce nuage d'électrons, appelé *nuage Kondo*, a pour effet d'augmenter la conductance, celle-ci atteignant même sa valeur maximale à température nulle.

La littérature évoquant l'effet Kondo dans un point quantique inséré entre deux terminaux est aujourd'hui extrêmement vaste. Citons par exemple [14] pour une approche introductive.

Le cas d'un point quantique couplé à deux terminaux et à un troisième réservoir a aussi été étudié dans certains régimes. Ainsi, certains auteurs ont étudié la possibilité de sonder la densité d'état hors équilibre du point quantique grâce à un troisième terminal faiblement couplé au point quantique ([2] et [3]). D'autres auteurs ont quant à eux montré que l'ajout d'une énergie de charge au troisième réservoir peut mener dans certaines conditions à un effet Kondo à deux canaux ([4],[5] et [6]).

Le but de cette thèse est l'étude d'une telle géométrie dans le cas où il y a des effets de taille finie dans le troisième réservoir, c'est-à-dire dans le cas où la densité d'état de ce réservoir acquiert une structure en pics à cause du confinement du système. On portera une attention particulière au cas où aucun courant ne peut circuler à travers le troisième réservoir.

L'intérêt premier de ces développements est d'étudier le déploiement du nuage Kondo dans un système de taille finie, avec l'espoir sous-jacent de détecter expérimentalement ce nuage.

Un article relatant les lignes directrices de cette thèse a été publié : [74].

Hypothèses et conventions

Dans cette thèse, nous adopterons l'hypothèse et les conventions suivantes :

- On supposera qu'il n'y a pas de champ magnétique ni de matériaux ferromagnétiques dans les problèmes soulevés. On s'autorisera à supprimer l'indice de spin d'une grandeur si cette grandeur ne dépend pas du spin.
- La constante de Boltzmann sera prise égale à 1, ce qui implique que les températures seront mesurées en unités d'énergie.
- Nous prendrons l'origine des énergies au niveau de Fermi.

Mots clés et résumé

Mots clés en français :

mésoscopie, nanostructures, transport, Kondo, Anderson, multiterminal, renormalisation, Keldysh

Mots clés en anglais :

mesoscopy, nanostructures, transport, Kondo, Anderson, multiterminal, renormalisation, Keldysh

Résumé en français :

Dans cette thèse, nous nous intéressons à un point quantique connecté à trois réservoirs. Le nuage Kondo se développe essentiellement dans le troisième réservoir, fortement couplé au point quantique, alors que les deux autres réservoirs, faiblement couplés au point quantique, servent à sonder le système par des mesures de transport.

Après avoir modélisé une telle géométrie triterminale, nous avons calculé la matrice de conductance à température nulle par la théorie des liquides de Fermi.

Dans le reste de la thèse, nous nous sommes intéressés au cas où le troisième réservoir est de taille finie, ce qui confère à sa densité d'état une structure en pics.

Dans un premier temps, nous avons étudié le système par le groupe de renormalisation perturbatif et nous avons calculé la température Kondo, principale échelle d'énergie du problème.

Ensuite, nous avons calculé la matrice de conductance du système dans différents régimes de température. Pour des températures très grandes devant la température Kondo, nous avons utilisé une approche perturbative. Pour des températures très petites devant la température Kondo, nous avons utilisé une théorie de type liquides de Fermi. Et dans le régime intermédiaire, nous avons utilisé une méthode numérique appelée théorie des bosons esclaves en champ moyen. Dans ce dernier régime a également été menée à terme une analyse spectroscopique de la densité d'état du point quantique.

Résumé en anglais :

In this manuscript, we are interested in a quantum dot connected to three reservoirs. The Kondo cloud essentially develops in the third reservoir which is strongly coupled to the quantum dot. The other two reservoirs are weakly coupled to the quantum dot and are used to probe the system by transport measurements.

After modeling such a three-terminal geometry, we have calculated the conductance

matrix at zero temperature by Fermi liquids theory.

In the remaining of the manuscript, we focus on the case where the third reservoir has a finite size, which confers to its density of state a peaks structure.

We have first studied the system by the perturbative renormalisation group and have evaluated the Kondo temperature, which is the main energy scale of the problem.

Next, we have calculated the conductance matrix of the system at different temperatures. For temperatures much stronger than the Kondo temperature, we have used a perturbative approach. For temperatures much weaker than the Kondo temperature, we have used a Fermi liquid type theory. In the intermediate regime, we have used a numerical method called slave bosons mean field theory. In the latter regime, we have also performed a spectroscopic analysis of the dot density of states.

Première partie

Introduction à la physique mésoscopique et à l'effet Kondo

Dans cette première partie, nous allons résumer les notions essentielles sur la physique mésoscopique et l'effet Kondo qui serviront dans cette thèse.

Dans un premier chapitre, nous énoncerons des généralités sur la physique mésoscopique :

- Nous commencerons par introduire les circuits mésoscopiques d'un point de vue technologique.

- Ensuite, nous nous intéresserons à la formule de Landauer et Buttiker.

- Puis nous aborderons le formalisme de Keldysh, dont le but est de traiter les systèmes hors équilibre. Et nous appliquerons ces notions à l'étude de la formule de Meir-Wingreen.

- Enfin, nous exposerons la notion de blocage de Coulomb, importante dans cet exposé.

Le deuxième chapitre sera entièrement consacré à l'effet Kondo, sujet central dans cette thèse :

- Tout d'abord, nous évoquerons l'effet Kondo dans un métal.

- Puis, nous aborderons l'effet Kondo dans une nanostructure.

- Nous ferons alors un bilan des techniques utilisées dans les différents régimes de température.

- Nous verrons ensuite l'effet Kondo en présence d'effets de taille finie.

- Puis, pour terminer, nous nous intéresserons à une approche expérimentale de l'effet Kondo.

Chapitre 1

Généralités sur la physique mésoscopique

1.1 Hétérostructures semi-conductrices, gaz d'électrons bidimensionnel

Soit une jonction entre le semi-conducteur intrinsèque GaAs et le semi-conducteur dopé n AlGaAs. Ce système est appelé *hétérostructure semiconductrice*.

La figure 1.1. représente pour ces deux matériaux la limite inférieure de la bande de conduction E_C , le niveau de Fermi E_F et la limite supérieure de la bande de valence E_V . En haut est représentée la situation avant que les deux semiconducteurs n'aient été mis en contact et en bas la situation après qu'ils aient été mis en contact : après mise en contact, les niveaux de Fermi s'égalisent et il y a donc un transfert d'électrons de AlGaAs vers GaAs. Ce transfert engendre un défaut d'électrons du côté AlGaAs et un excès d'électrons du côté GaAs. Cet excès d'électrons forme un gaz d'électrons bidimensionnel à l'interface des deux semiconducteurs.

On peut éliminer le gaz d'électrons bidimensionnel d'une partie de la jonction en y déposant une électrode métallique portée à un potentiel négatif.

Signalons pour terminer que la densité de porteurs de charge dans un gaz d'électrons bidimensionnel varie typiquement de $2 \cdot 10^{11} cm^{-2}$ à $2 \cdot 10^{12} cm^{-2}$.

Un exposé sur les hétérostructures semiconductrices se trouve dans [7]. Elles sont d'une importance capitale pour cette thèse car elles constituent les nanostructures les plus adaptées à l'étude de l'effet Kondo (voir prochain chapitre). Nous verrons cependant que l'effet Kondo peut survenir aussi dans d'autres systèmes : nanotubes de carbone, molécules.

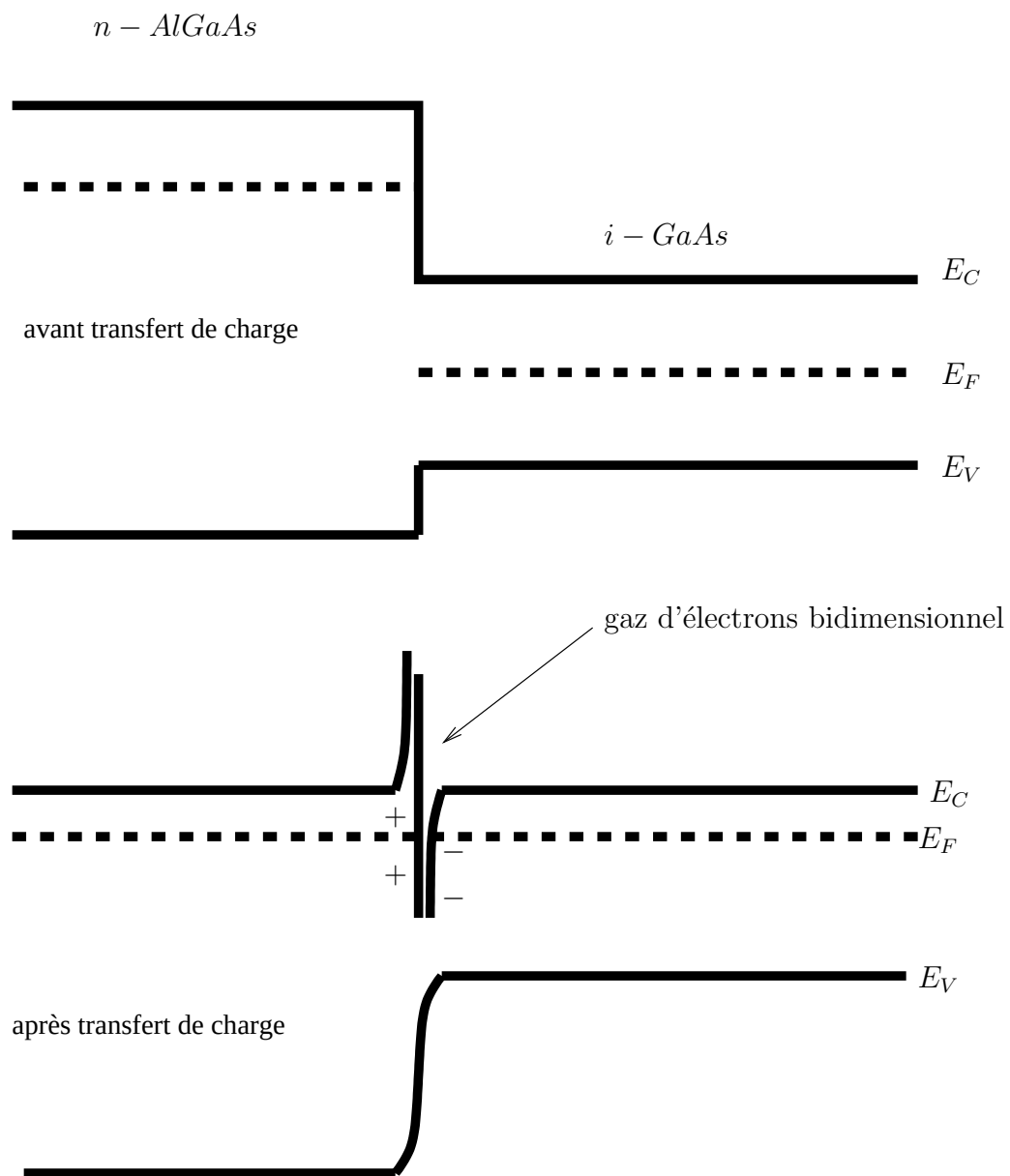


FIG. 1.1 – Hétérostructure semiconductrice. Figure tirée de [27]

1.2 Points quantiques

1.2.1 Définition d'un point quantique

On peut confiner un gaz d'électrons bidimensionnel dans une certaine région du plan défini par la jonction en apposant autour de cette région des électrodes portées à des potentiels négatifs. On obtient alors ce que l'on appelle un *point quantique*.

Approximation de Hartree-Fock (champ moyen) : Un point quantique est un système contenant plusieurs électrons en interaction. Par conséquent, il ne peut en général pas être décrit en attribuant à chaque électron un niveau d'énergie monoélectronique ; les seuls niveaux d'énergie qui peuvent être introduits sont les valeurs propres de l'Hamiltonien du système à plusieurs électrons.

Cependant, on peut introduire une approximation, dite de *Hartree-Fock*, dans laquelle on peut décrire le système en terme de niveaux d'énergie à 1 électron ([36],[37]).

Dans cette approximation, on suppose que l'état $|\Psi\rangle$ d'un système à N électrons peut être construit à partir d'un déterminant de Slater de N états à une particule ψ_i orthonormés. Pour déterminer les équations auxquelles obéissent les ψ_i , on impose que la grandeur $\langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ est stationnaire sous la contrainte que $|\Psi\rangle$ est un déterminant de Slater d'états orthonormés à 1 particule (H est l'Hamiltonien du système). On obtient les équations :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_i(\vec{r}) + U^{ion}(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \sum_j |\psi_j(\vec{r}')|^2 U(\vec{r} - \vec{r}')\psi_i(\vec{r}) - \sum_j \int d\vec{r}' U(\vec{r} - \vec{r}')\psi_j^*(\vec{r}')\psi_i(\vec{r}')\psi_j(\vec{r})\delta_{s_i s_j} = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}) \quad (1.1)$$

Dans cette équation, m est la masse de l'électron, U^{ion} est le potentiel électrostatique créé par les ions et s_i désigne le spin du i -ème électron.

Les deuxième et troisième termes du membre de gauche traduisent l'interaction coulombienne entre électrons.

Le deuxième terme, appelé terme de Hartree, s'obtient simplement à partir de l'énergie de Coulomb classique, en remplaçant la densité de charge par son expression en terme de fonctions d'ondes.

Le dernier terme du membre de gauche, appelé terme de Fock, est lié à l'antisymétrie de la fonction d'onde du système, imposée par le principe de Pauli. Contrairement au terme de Hartree, ce terme est d'origine purement quantique. Nous le négligerons par la suite.

Les termes de Hartree et de Fock font intervenir l'énergie d'interaction à 2 électrons $U(\vec{r} - \vec{r}')$. $U(\vec{r})$ n'est en général pas le potentiel de Coulomb : il tient compte de l'écrantage des électrons. Lorsque les électrons sont parfaitement écrantés, l'interaction coulombienne devient locale : $U(\vec{r} - \vec{r}') = U\delta(\vec{r} - \vec{r}')$.

Pour illustrer l'utilité des équations de Hartree-Fock, on trouvera dans la référence [35] l'étude de la répartition de la densité électronique dans un point quantique parabolique.

Dorénavant, lorsque nous parlerons des niveaux d'énergie d'un point quantique, il s'agira des niveaux d'énergie à une particule qui interviennent dans l'approximation de Hartree-Fock.

Sur la figure 1.2 est représenté un point quantique. Pour simplifier, on suppose qu'il n'est relié qu'à deux conducteurs. Dans la partie basse de la figure sont représentées trois électrodes ayant les fonctions suivantes :

- L'électrode de gauche (respectivement de droite) détermine la probabilité de transfert d'un électron entre le point quantique et le réservoir gauche (respectivement droit). On sait que la somme de ces deux probabilités est proportionnelle à la largeur Γ des niveaux d'énergie du point quantique.

- L'électrode centrale détermine la position des niveaux d'énergie du point quantique, qui est liée au nombre d'électrons qu'il contient.

1.2.2 Energies caractéristiques d'un point quantique

Nous appellerons *énergies caractéristiques* d'un système les grandeurs physiques caractérisant ce système ayant la dimension d'une énergie. Donnons les différentes énergies caractéristiques d'un point quantique relié à deux terminaux.

Il y a deux effets distincts qui contribuent au caractère discret de l'énergie du point quantique :

- Tout d'abord, on a un *effet de confinement* : on sait qu'en théorie quantique, lorsqu'une particule est confinée dans une région de taille finie, son énergie prend des valeurs discrètes. Soit δE l'écart typique entre les niveaux d'énergie du point quantique, au voisinage du niveau de Fermi.

- Ensuite, la quantification de la charge implique un *effet de quantification de l'énergie électrostatique*. Cet effet est déjà présent en physique classique du moins si l'on tient compte de la quantification de la charge ; il n'a donc rien à voir avec la quantification de l'énergie due au confinement, qui est purement quantique. L'énergie U définie ci-dessus est un quantum d'énergie électrostatique.

Nous avons ainsi identifié deux énergies caractéristiques dans notre problème : δE et U . A ces deux énergies caractéristiques, il faut ajouter la différence de potentiel $|eV|$ entre les deux terminaux, la température T et la largeur des niveaux du point quantique Γ .

Sauf mention explicite du contraire, nous supposons que $|eV|$ est très petit devant toutes les autres échelles d'énergie du problème, ce qui revient à affirmer que l'on étudie le transport presque à l'équilibre.

Typiquement, un point quantique contient de 50 à 100 électrons, bien que ce nombre puisse atteindre plusieurs dizaines de milliers dans les points quantiques formés de nanotubes de carbone. En général, δE et U sont de l'ordre du *meV*. Ces échelles d'énergie sont

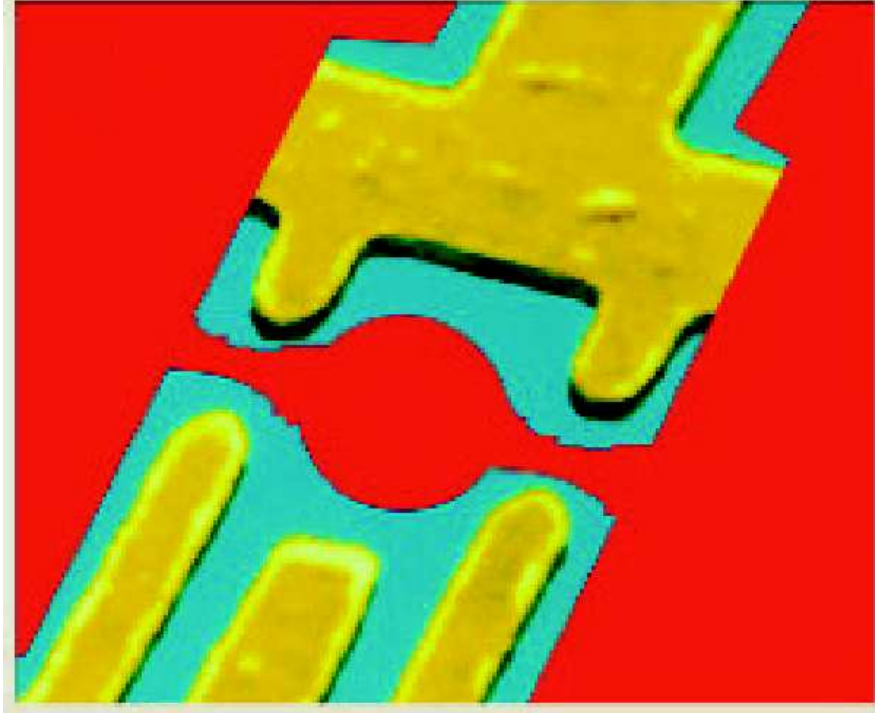


FIG. 1.2 – Point quantique. Figure tirée de [71]

présentées dans [8].

1.3 Cadre de la physique mésoscopique

1.3.1 Généralités

Commençons par définir les libres parcours moyen élastique et inélastique ([7]) :

-Le *libre parcours moyen élastique* l_e est la distance typique parcourue par un électron entre deux collisions élastiques avec une impureté (on rappelle qu'une collision élastique est une collision qui conserve l'énergie).

-Le *libre parcours moyen inélastique* l_i est la distance typique parcourue par un électron entre deux collisions inélastiques avec un autre électron, une impureté ou un phonon. On peut augmenter le libre parcours moyen inélastique en diminuant la température car à température nulle, les impuretés sont immobiles et ne subissent donc pas de chocs inélastiques.

Contrairement aux collisions inélastiques, les collisions élastiques conservent la cohérence de phase et la longueur de cohérence de phase l_ϕ , c'est-à-dire la distance sur laquelle on peut parler de la phase d'un électron, est donc égale à l_i .

L'échelle mésoscopique correspond à des échantillons dont la taille est inférieure à l_ϕ ou de l'ordre de l_ϕ ; à cette échelle, on ne peut pas négliger les interférences électroniques.

Si l_e est très inférieur à la taille de l'échantillon, on dit qu'on est dans un régime *diffusif* alors que si l_e est très supérieur à la taille de l'échantillon, on dit qu'on est dans un régime *ballistique*.

1.3.2 Quelques mots sur le régime diffusif; notion de désordre

Pour étudier le régime diffusif, on suppose que les diffuseurs (impuretés, phonons) sont distribués aléatoirement dans l'espace, autrement dit qu'on est en présence de désordre ([39] chapitre 2).

Pour caractériser un mouvement diffusif dans un échantillon de taille L , on introduit le temps caractéristique de la diffusion τ_T qui est lié au coefficient de diffusion D par la relation $D = \frac{L^2}{\tau_T}$. L'énergie associée au temps τ_T est appelée *énergie de Thouless* : $E_T \equiv \frac{\pi\hbar}{\tau_T}$.

La conductance dans la région de taille L est donnée par $G = \frac{2e^2}{h} \frac{E_T}{\Delta E}$ où e est la charge de l'électron et ΔE l'écart typique entre les niveaux d'énergie au voisinage du niveau de Fermi.

Lorsque E_T tend vers 0, c'est-à-dire lorsque τ_T tend vers l'infini, la conductance s'annule. Cette annulation de la conductance correspond à un régime où les électrons sont localisés. On peut montrer d'une manière générale ([38]) que le désordre tend à localiser les électrons. Cela peut s'expliquer par l'interférence constructive entre un chemin formant une boucle, et le chemin qui s'en déduit par renversement du temps.

Signalons pour terminer ([40]) que dans un système mésoscopique désordonné, lorsque T est inférieur à l'énergie de Thouless, on observe des fluctuations de conductance de l'ordre de $\frac{e^2}{h}$; elles sont appelées *fluctuations universelles de conductance*.

1.4 Formule de Landauer et Buttiker

1.4.1 Introduction de la formule de Landauer

Notion de mode transverse

Dans un conducteur, la fonction d'onde d'un électron varie à l'échelle atomique. Cependant, on peut oublier cette dépendance à petite échelle à condition de remplacer la masse de l'électron par une masse effective. Ainsi, on obtient une équation de Schrödinger effective dans laquelle le potentiel subi par les électrons ne dépend plus des irrégularités rencontrées à l'échelle atomique.

Pour un conducteur dans lequel les électrons se propagent dans la direction z , on peut alors factoriser la fonction d'onde sous la forme $\Psi(x, y, z) = e^{ikz}\Phi(y, x)$. La fonction Φ obéit à une équation d'onde bidimensionnelle dont les fonctions propres sont appelées *modes transverses*.

Formule en T et formule en T/R

Considérons un conducteur mésoscopique C relié à deux réservoirs L et R . On suppose que le nombre de modes des réservoirs est très grand devant celui de C .

La formule de Landauer donne une relation entre la conductance de C et son coefficient de transmission ([7]). Dans le cas où le coefficient de transmission est indépendant de l'énergie $T(E) = T$, la formule s'écrit $G = \frac{2e^2}{h} TM$ où G est la conductance et M le nombre de modes, supposé également indépendant de l'énergie : cette formule est appelée *formule de Landauer en T* .

Une autre formule pour la conductance de C a été établie ([41]) : $G = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{1-T} M$. On l'appelle *formule en $\frac{T}{R}$* .

La question se pose de savoir si c'est la formule en T ou la formule en $\frac{T}{R}$ qui est correcte. La réponse est que c'est la formule en T qui est correcte si on inclut dans le système C les contacts avec les réservoirs alors que c'est la formule en T/R qui est correcte si on ne tient pas compte de ces contacts ([7] et [42]). La différence des résistances G_T^{-1} et $G_{T/R}^{-1}$ donne la résistance introduite par les contacts de C avec les réservoirs : $G_T^{-1} - G_{T/R}^{-1} = \frac{h}{2e^2 M}$.

Dans tout ce qui suit, nous nous intéresserons uniquement à la formule en T .

1.4.2 Démonstration de la formule de Landauer

Considérons un conducteur de longueur L compris entre un terminal gauche L et un terminal droit R . La densité électronique associée à un état de nombre d'onde k est $1/L$. Par conséquent, le courant transporté par cet état est :

$$I(k) = \frac{e}{L} v(k) \quad (1.2)$$

Où $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$ est la vitesse de l'électron (E désigne son énergie). Si $k > 0$, le nombre d'occupation de l'état k est donné par la distribution de Fermi-Dirac du terminal gauche $f_L(E(k))$ alors que si $k < 0$, ce nombre d'occupation est donné par la distribution de Fermi-Dirac du terminal droit $f_R(E(k))$; en effet, les électrons venant de L (respectivement de R) ressentent le potentiel chimique de L (respectivement de R). Le courant total vaut donc :

$$I = \sum_{k>0} I(k) \times 2M(E(k)) \times f_L(E(k)) + \sum_{k<0} I(k) \times 2M(E(k)) \times f_R(E(k)) \quad (1.3)$$

Dans cette équation, $M(E)$ désigne le nombre de modes transverses à l'énergie E et le facteur 2 est dû au spin.

En remplaçant $I(k)$ par son expression en fonction de $\frac{\partial E}{\partial k}$ et en transformant les sommes sur k en intégrales sur l'énergie, on obtient finalement :

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} (f_L(E) - f_R(E)) M(E) dE \quad (1.4)$$

Supposons maintenant qu'un électron a une probabilité de transmission $T(E) \neq 1$. Le courant transmis entre E et $E + dE$ sera alors une fraction $T(E)$ du courant transmis dans le cas $T(E) = 1$. On aura donc :

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} (f_L(E) - f_R(E)) M(E) T(E) dE \quad (1.5)$$

C'est la *formule de Landauer*.

1.4.3 Généralisation multiterminale

Donnons la généralisation de la formule de Landauer pour un système relié à plus de deux terminaux (pour simplifier, supposons que le nombre de modes transverses est égal à 1). Le courant entrant dans le système par le terminal p est donné par :

$$I_p = \frac{2e}{h} \int \sum_q (T_{qp}(E) f_p(E) - T_{pq}(E) f_q(E)) dE \quad (1.6)$$

Où T_{qp} désigne la probabilité de transmission du terminal p vers le terminal q .

La généralisation multiterminale de la formule de Landauer est appelée *formule de Landauer et Büttiker*.

A propos du principe d'exclusion :

On pourrait se demander pourquoi il ne faudrait pas remplacer la formule (1.6) par la formule suivante :

$$I_p = \frac{2e}{h} \int \sum_q (T_{qp}(E) f_p(E) (1 - f_q(E)) - T_{pq}(E) f_q(E) (1 - f_p(E))) dE \quad (1.7)$$

En effet, le principe de Pauli implique qu'un état déjà rempli dans un certain terminal ne peut pas être occupé par un électron supplémentaire arrivant dans ce terminal. Cependant, les états initialement occupés dans un terminal p ont un vecteur d'onde qui *sort* de p et par conséquent un électron *entrant* dans p après avoir transité par le conducteur étudié rencontre un état vide et ne subit donc pas le blocage de Pauli. C'est donc bien la formule (1.6) et non la formule (1.7) qui est valable. Pour une discussion plus détaillée de cette question, on pourra se reporter à [7] et [42].

1.4.4 Lien avec la matrice S

Considérons un système relié à N terminaux. Pour tout i compris entre 1 et N , notons a_i l'amplitude entrant dans le système par le terminal i et b_i l'amplitude sortante du système par le terminal i (voir figure 1.3).

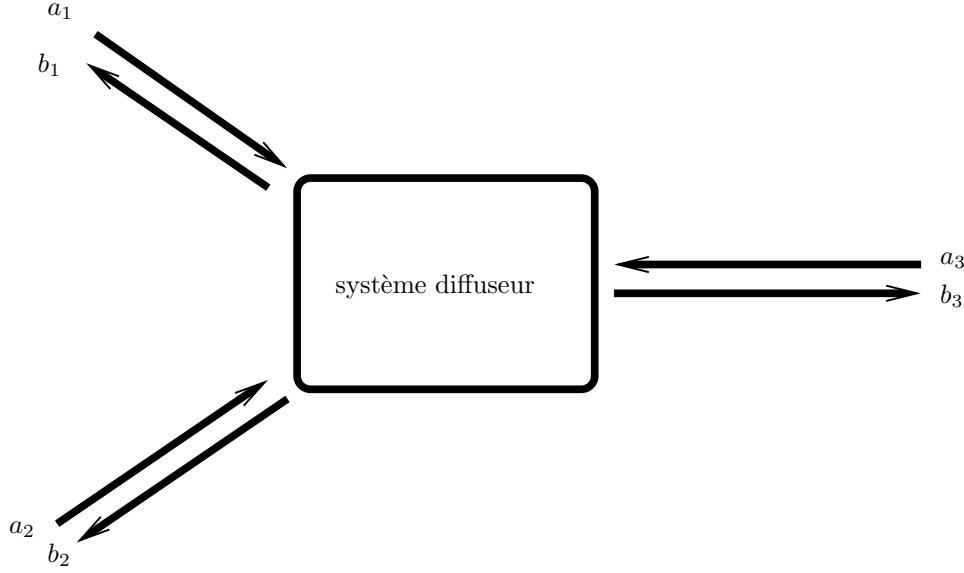


FIG. 1.3 – Définition des amplitudes entrantes et sortantes d'un système

Alors, on définit la matrice $N \times N$, S , par la relation :

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ \dots \\ b_N \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Propriétés de la matrice S :

-La propriété la plus essentielle de la matrice S est son unitarité : $SS^\dagger = 1$. Cette unitarité résulte simplement de la conservation du courant.

-Bien que nous ne nous intéressions pas aux effets des champs magnétiques dans cette thèse, citons cette propriété de la matrice S : $S(B) = {}^t S(-B)$.

Expression des probabilités de transmission en fonction de la matrice S :

En admettant encore une fois que l'on n'a qu'un seul mode transverse, écrivons la relation fondamentale entre les probabilités de transmission T_{pq} et la matrice S :

$$T_{pq} = |S_{pq}|^2 \quad (1.9)$$

1.5 Formalisme de Keldysh et formule de Meir-Wingreen

1.5.1 Formalisme de Keldysh

Introduction historique

Julian Schwinger s'intéressa à la mécanique statistique des systèmes hors équilibre dès 1959 ([43]). Il étudia les propriétés macroscopiques d'un système ayant un grand nombre

de particules, à partir d'un formalisme de théorie quantique des champs. Après avoir exprimé la densité d'état en fonction de variables thermodynamiques et après avoir étudié les fonctions de Green du système, il s'intéressa à la mise hors équilibre du système par l'application d'un champ électromagnétique variable. En traitant le champ comme une perturbation, Schwinger exprima le courant grâce une théorie de réponse linéaire faisant intervenir les fonctions de Green à deux particules (décrivant les corrélations de courant). Pour déterminer les fonctions de Green, Schwinger utilisa une *approximation* consistant à exprimer les fonctions de Green à n particules en fonction des fonctions de Green à moins de n particules.

Ces problèmes de systèmes hors équilibre ont aussi été abordés par Keldysh en 1965 ([44]). Keldysh introduit quatre types de fonctions de Green, formant les composantes d'une matrice 4×4 . Par un changement de base, on peut se ramener à trois fonctions de Green : les fonctions de Green retardée et avancée, qui décrivent les propriétés dynamiques des particules, et une fonction de Green supplémentaire F décrivant la distribution statique des particules. Ces fonctions de Green peuvent être décrites de façon compacte en considérant leurs arguments temporels comme appartenant à un certain contour appelé *contour de Keldysh*; cette notion sera explicitée dans un instant.

Keldysh a pu montrer que pour un champ extérieur quasiclassique et une interaction entre particules faible, son formalisme permet de retrouver l'équation de Boltzmann.

Signalons que le formalisme de Keldysh ne fonctionne que pour un système en contact avec un thermostat ou partant d'un état d'équilibre thermodynamique.

Dans l'article [45], on a une application du formalisme de Keldysh au transport dans une jonction tunnel.

Dans cet article, les auteurs s'intéressent à une jonction métal-isolant-métal et partent d'un modèle dit de liaisons fortes où chacun de ces trois systèmes est décrit par une succession unidimensionnelle de sites localisés et équidistants. L'hamiltonien introduit des couplages tunnel entre les sites mais les auteurs supposent qu'il n'y a pas d'interactions entre électrons. Dans ces conditions, les auteurs ont pu calculer les fonctions de Green du système. En appliquant le formalisme de Keldysh, où les couplages tunnels entre l'isolant et les métaux sont traités comme une perturbation, ils ont calculé le courant en fonction des fonctions de Green. Bien que l'article [45] s'intéresse à un système sans interactions, ce formalisme a été ultérieurement généralisé à des problèmes avec interactions.

Fonctions de Green de Keldysh

Soit un système dont l'hamiltonien s'écrit $H = H_0 + V$ où H_0 est un opérateur dont on connaît les valeurs propres et V est une perturbation. Si l'on suppose que l'interaction V est branchée après $t = -\infty$, on peut admettre qu'à $t = -\infty$ le système est dans l'état fondamental ϕ_0 de l'hamiltonien H_0 .

Dans la théorie des perturbations habituelle, on suppose qu'à $t = +\infty$ le système est encore dans l'état ϕ_0 (à un facteur de phase près). Cette hypothèse convient pour décrire des systèmes en équilibre mais pour des systèmes hors équilibre, elle n'est pas vérifiée.

Pour décrire les systèmes à l'équilibre, on passe de l'état ϕ_0 à l'état ϕ_0 lorsque t passe de $-\infty$ à $+\infty$. Pour les systèmes hors équilibre, on passe de ϕ_0 à ϕ_0 en allant d'abord de $t = -\infty$ à $t = +\infty$ puis en revenant de $t = +\infty$ à $t = -\infty$. Il faut donc rempacer l'intervalle $[-\infty, +\infty]$ par un contour (dit de Keldysh) formé de 2 branches :

-D'abord une branche $+$ allant de $t = -\infty$ à $t = +\infty$.

-Puis une branche $-$ allant de $t = +\infty$ à $t = -\infty$.

En notant c_i l'opérateur d'annihilation d'une particule dans l'état de base i , on définit 4 types de fonctions de Green ([9]) :

$$\begin{aligned} G_{ij}^>(t_1, t_2) &= -i \langle c_i(t_1) c_j^\dagger(t_2) \rangle \\ G_{ij}^<(t_1, t_2) &= i \langle c_j^\dagger(t_2) c_i(t_1) \rangle \\ G_{ij}^t(t_1, t_2) &= -i \langle T c_i(t_1) c_j^\dagger(t_2) \rangle \\ G_{ij}^{\tilde{t}}(t_1, t_2) &= -i \langle \tilde{T} c_i(t_1) c_j^\dagger(t_2) \rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

Dans ces expressions, T représente l'opérateur d'ordonnement du temps (opérateurs avec temps les plus grand à gauche), $\tilde{T}$ représente l'opérateur d'anti-ordonnement du temps (opérateurs avec temps les plus grand à droite).

La fonction de Green $G^>(t_1, t_2)$ correspond à t_1 sur la branche $-$ et t_2 sur la branche $+$. La fonction de Green $G^<(t_1, t_2)$ correspond à t_1 sur la branche $+$ et t_2 sur la branche $-$. La fonction de Green $G^t(t_1, t_2)$ correspond à t_1 et t_2 sur la branche $+$. Et enfin, la fonction de Green $G^{\tilde{t}}(t_1, t_2)$ correspond à t_1 et t_2 sur la branche $-$.

On définit aussi les fonctions de Green retardée et avancée par les relations :

$$\begin{aligned} G_{ij}^r(t_1, t_2) &= G_{ij}^t(t_1, t_2) - G_{ij}^<(t_1, t_2) \\ G_{ij}^a(t_1, t_2) &= G_{ij}^t(t_1, t_2) - G_{ij}^>(t_1, t_2) \end{aligned} \quad (1.11)$$

1.5.2 Application à la formule de Meir-Wingreen

Considérons un système D comportant des interactions électron-électron, inséré entre deux terminaux indexés par un indice $\alpha \in \{L, R\}$.

La formule de Meir-Wingreen exprime la conductance à travers le système D en fonction des fonctions de Green retardées du système D . Avant de nous intéresser à cette formule, signalons que l'article [45] dont nous avons parlé ci-dessus introduit un formalisme relativement proche de celui de Meir-Wingreen.

En effet, cet article donne une formule *exacte* pour le courant à travers une jonction tunnel, en terme des fonctions de Green retardée et avancée. Plus précisément, le coefficient de transfert est le produit d'une fonction de Green avancée par une fonction de Green retardée.

Revenons maintenant à la formule de Meir-Wingreen. On suppose que l'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \sum_{k\sigma\alpha} \epsilon_{k\alpha} c_{k\sigma\alpha}^\dagger c_{k\sigma\alpha} + H_{int}(\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}) + \sum_{k\sigma\alpha, n} (t_{k\alpha, n} c_{k\sigma\alpha}^\dagger d_n + H.C.) \quad (1.12)$$

Où $c_{k\sigma\alpha}^\dagger$ est l'opérateur de création d'un électron de nombre d'onde k et de spin σ dans le terminal α , alors que $d_n^\dagger$ est l'opérateur de création d'un électron d'état n dans le système D . En modifiant la phase des états de base, on peut se ramener au cas où les $t_{k\alpha,n}$ sont réels, ce que nous ferons pour alléger l'écriture.

Meir et Wingreen ([10]) ont montré que le courant circulant à travers le système D est donné par la formule suivante (pour simplifier, on a supposé que l'on n'a qu'un seul mode transverse) :

$$I = \frac{2ie}{\hbar} \sum_{mn} \int d\epsilon \rho_L(\epsilon) t_{Ln}(\epsilon) t_{Lm}(\epsilon) (f_L(\epsilon) 2i \text{Im}(G_{mn}^r(\epsilon)) + G_{mn}^<(\epsilon)) \quad (1.13)$$

Dans cette expression, $\rho_L(\epsilon)$ est la densité d'état du terminal L , f_L est la distribution de Fermi-Dirac du terminal L , et on a posé $t_{Ln}(\epsilon) = t_{kL,n}$ pour $\epsilon = \epsilon_{k\sigma L}$. $G_{mn}^r(\epsilon)$ et $G_{mn}^<(\epsilon)$ représentent les fonctions de Green retardées et inférieures du système D .

Bien entendu, on a une formule analogue à (1.13) pour le terminal R . Cette formule (1.13) est démontrée dans l'annexe A.

Définissons pour $\alpha \in \{L, R\}$ la matrice :

$$\Gamma_{\alpha mn}(\epsilon) = \pi \rho_\alpha(\epsilon) t_{\alpha n}(\epsilon) t_{\alpha m}(\epsilon) \quad (1.14)$$

Alors si il existe un scalaire k indépendant de ϵ tel que $\Gamma_{Rmn}(\epsilon) = k \Gamma_{Lmn}(\epsilon)$, la conservation du courant impose :

$$I = \frac{4e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon (f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon)) (-\text{Im}(\text{Tr}(\Gamma(\epsilon) G^r(\epsilon)))) \quad (1.15)$$

Où $G^r(\epsilon)$ est la matrice de composantes $G_{mn}^r(\epsilon)$ et $\Gamma = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R}$, si l'on note Γ_α la matrice de composantes $\Gamma_{\alpha mn}$. Cette formule est appelée *formule de Meir-Wingreen* et elle est très importante pour ce qui va suivre.

Physiquement, dans le cas où $\Gamma_{Rmn}(\epsilon) = k(\epsilon) \Gamma_{Lmn}(\epsilon)$ avec $k(\epsilon)$ scalaire, pour que la formule (1.15) soit satisfaite, il suffit que la différence de potentiel $|eV|$ et la température T soient très petites devant les échelles typiques de variation des $\Gamma_\alpha(\epsilon)$.

Notons enfin que si n est un état localisé dans l'espace, on définit la grandeur :

$$\rho_n(\epsilon) = -\frac{Im}{\pi} (G_{nn}^r(\epsilon)) \quad (1.16)$$

Cette grandeur est appelée *densité locale d'état au point n* .

1.6 Blocage de Coulomb

1.6.1 Définition du blocage de Coulomb

D'une manière générale, on parle de blocage de Coulomb dès que l'interaction coulombienne entre électrons empêche le passage d'un courant ([46] chapitre 1).

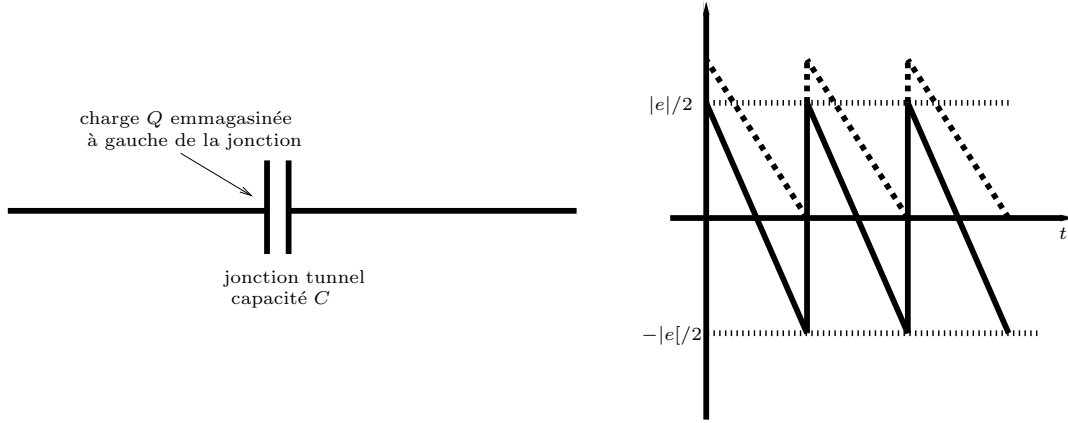


FIG. 1.4 – Blocage de Coulomb dans une jonction tunnel ; à droite, Q en fonction du temps en trait plein et ΔE en fonction du temps en tirets

Le système le plus simple pour lequel le blocage de Coulomb peut survenir est une jonction tunnel : voir figure 1.4. Notons Q la charge emmagasinée à gauche de la jonction. Cette charge est une variable continue qui est liée à la densité électronique à gauche de la jonction.

Lors du passage d'un électron à travers la jonction, on a une variation d'énergie électrostatique :

$$\Delta E = \frac{(Q - e)^2}{2C} - \frac{Q^2}{2C} = -e(Q - e/2)/C \quad (1.17)$$

où C est la capacité de la jonction.

Tant que cette différence d'énergie est positive, aucun électron ne peut passer à travers la jonction.

Lorsque l'on applique un courant I négatif et constant à la jonction, Q diminue linéairement avec le temps (au fur et à mesure que la charge s'emmagine à gauche de la jonction), jusqu'à ce que ΔE devienne positif. Lorsque cela arrive, un électron passe à travers la jonction et Q augmente donc de $|e|$; ainsi de suite (voir figure 1.4). On a ainsi un phénomène oscillatoire de fréquence $I/|e|$. Si maintenant on ne force plus le passage d'un courant, lorsque ΔE est négatif, on a le blocage de Coulomb.

Un système un peu plus compliqué dans lequel le blocage de Coulomb peut survenir est une double jonction tunnel : deux jonctions tunnel successives J_1 et J_2 . Lorsque l'on applique un courant constant à la double jonction, la charge à gauche de J_1 varie linéairement avec le temps jusqu'à ce que la variation d'énergie électrostatique due au passage d'un électron à travers J_1 devienne positive. On a alors passage d'un électron à travers J_1 et la variation d'énergie électrostatique due au passage d'un électron à travers J_2 est alors strictement positive. On a donc passage d'un électron à travers J_2 accompagnée d'une *dissipation d'énergie*. Là encore, lorsque l'on ne force pas le passage d'un courant, entre deux processus de transfert tunnel à travers l'une des jonctions, on a le blocage de Coulomb.

Conditions requises pour l'apparition du blocage de Coulomb :

-Tout d'abord, pour qu'il y ait blocage de Coulomb, il est nécessaire que la résistance R_T de chaque jonction tunnel soit très grande devant $R_K = h/e^2$. Cette condition équivaut à imposer que le temps de relaxation de la charge $\tau_T = R_T C$ est très grand devant le temps pendant lequel l'interaction coulombienne peut être négligée $\tau_C = h/E_c$, $E_c = \frac{e^2}{2C}$ étant l'énergie de charge. En d'autres termes, la condition $R_T \gg R_K$ équivaut à imposer que la charge n'a pas le temps de se relaxer avant que les effets de l'interaction coulombienne, et en particulier le blocage de Coulomb, ne deviennent importants.

-Une deuxième condition pour que le blocage de Coulomb survienne est bien sûr que $T \ll E_c$; si cela n'est pas le cas, l'énergie thermique permet de franchir la barrière de Coulomb.

Blocage de Coulomb dans un point quantique :

On va modéliser un point quantique couplé à deux terminaux L et R , par une double jonction tunnel; à chacune des deux jonctions est associé une résistance $R_{L/R}$ et une capacité $C_{L/R}$. On suppose que les conditions d'apparition du blocage de Coulomb que l'on vient de voir sont satisfaites et que L et R sont portés aux potentiels respectifs V_L et V_R . Soit V_g le potentiel de la grille reliée au point quantique pour contrôler son nombre d'électrons et soit C_g la capacité de la jonction avec cette grille. Soit n le nombre d'électrons contenus dans le point quantique et soit $E_n(V_L, V_R, V_g)$ l'énergie électrostatique associée. La fonction $E_n(V_L, V_R, V_g)$ sera calculée ultérieurement mais disons déjà que l'énergie coulombienne U que nous avons introduit plus haut vaut $\frac{e^2}{2(C_L + C_R + C_g)}$.

Classiquement, à température nulle, le nombre d'électrons n minimise $E_n(V_L, V_R, V_g)$. Par conséquent, si deux valeurs de n minimisent l'énergie électrostatique, il peut y avoir fluctuation de la charge entre ces deux valeurs. Dans ce cas, du courant peut circuler à travers le point quantique.

On a alors un transport en deux étapes : un électron entre dans le point quantique puis au bout d'un deuxième temps, de l'ordre de h/Γ , un électron sort du point quantique (ou l'inverse).

Ce transport purement classique, qui par définition est le contraire du blocage de Coulomb, s'appelle *transport séquentiel*. Nous verrons qu'en théorie quantique, il peut quand même y avoir du transport dans un régime de blocage de Coulomb (cotunneling, effet Kondo).

Voyons maintenant une autre approche du blocage de Coulomb et du transport séquentiel, qui est plus précise, car elle tient compte de l'énergie apportée aux électrons par le biais entre L et R , et aussi de la quantification de l'énergie due au confinement dans le point quantique.

L'énergie du point quantique contenant N électrons peut être approximée à $T = 0$ par $\mathcal{E}_N(V_L, V_R, V_g) = E_N(V_L, V_R, V_g) + \sum_{i=1}^N \epsilon_i$ où les ϵ_i sont les niveaux d'énergie à une particule de l'approximation d'Hartree-Fock (et E_N a déjà été défini : c'est l'énergie électrostatique). Supposons alors que $\mu_L > \mathcal{E}_{N+1}(V_L, V_R, V_g) - \mathcal{E}_N(V_L, V_R, V_g) = \epsilon_{N+1} +$

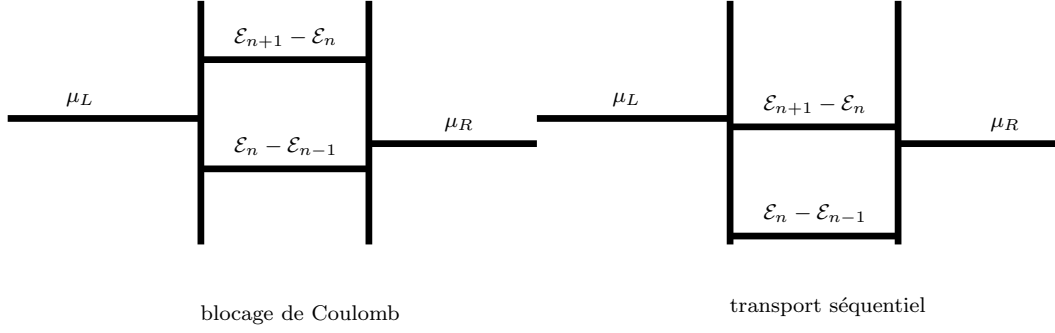


FIG. 1.5 – Blocage de Coulomb et transport séquentiel

$E_{N+1}(V_L, V_R, V_g) - E_N(V_L, V_R, V_g) > \mu_R$ où $\mu_{L/R}$ est le potentiel chimique de L/R .

Alors, un électron au niveau de Fermi de L pourra passer dans D provoquant la transition $N \rightarrow N + 1$ puis un électron de D pourra passer dans R provoquant la transition $N + 1 \rightarrow N$. On aura alors du transport séquentiel.

Si cette condition n'est pas vérifiée, on aura du blocage de Coulomb.

Ceci est illustré sur la figure 1.5.

Intéressons-nous pour terminer à l'évolution de l'état du point quantique lorsque l'on fait varier V_g . Supposons que le point quantique contienne n électrons. Lorsque l'on augmente le potentiel V_g , les énergies $E_m(V_L, V_R, V_g)$ varient, jusqu'à ce que pour une certaine valeur $V_g = V_{gs}$, les m qui minimisent $E_m(V_L, V_R, V_g)$ soient à la fois n et $n + 1$. On a alors dégénérescence de l'énergie électrostatique et transport séquentiel, d'où apparition d'un pic de conductance. Au delà de $V_g = V_{gs}$, c'est $n + 1$ qui minimise l'énergie électrostatique et donc le point quantique contient $n + 1$ électrons. Et ainsi de suite. Ceci est illustré sur la figure 1.6.

1.6.2 Allure de la courbe donnant la conductance du système en fonction de la température dans un régime de blocage de Coulomb

Dans cette section, nous allons faire l'hypothèse que $\delta E \ll U$. Cette hypothèse est adoptée pour fixer les idées et n'a rien d'indispensable.

Nous allons nous intéresser au comportement de la conductance en fonction de la température ([14]).

Régime de haute température ; tunneling thermiquement assisté

Pour des températures très supérieures à l'énergie de charge U , la température fournit l'énergie nécessaire aux transitions du réservoir gauche vers le point quantique ou du

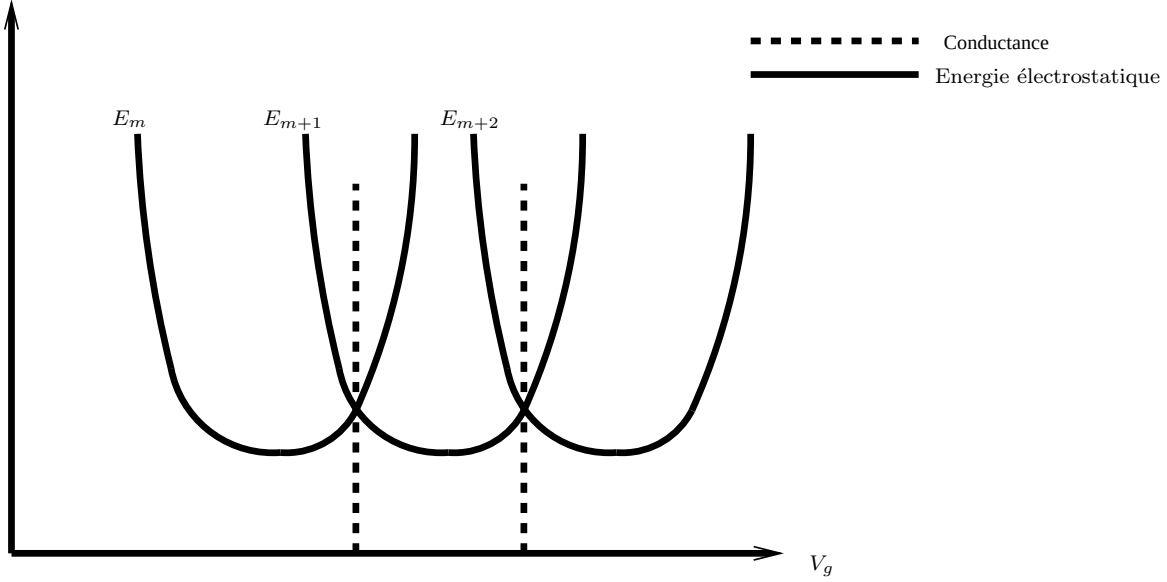


FIG. 1.6 – Energie électrostatique du système en fonction de V_g et du nombre d'électrons dans le point quantique (à V_L et V_R fixés) ; en pointillé, conductance théorique *classique* pour $T = 0$

point quantique vers le réservoir droit ; on parle alors de *tunneling thermiquement assisté*. Dans le cas où $T \gg U$, on peut dire de plus que le transport ne dépend pas de l'énergie électrostatique. Dans un tel régime, la résistance du système est égale à la somme des résistances des deux jonctions.

Pour des températures inférieures à U mais supérieures à une certaine température caractéristique T_{in} , le transport est encore thermiquement assisté mais l'on ne peut plus négliger l'énergie électrostatique ; on calcule alors la conductance à l'aide d'une équation maîtresse faisant intervenir les taux de transition point quantique-terminaux calculés à l'aide de la règle d'or de Fermi. Voyons cela plus en détail.

Méthode de l'équation maîtresse ([47] ou chapitre 5 de [46]) :

Pour chaque niveau p du point quantique, on introduit une énergie ϵ_p (qui n'inclut pas l'énergie coulombienne), un taux de transition élastique vers le réservoir gauche Γ_p^L et un taux de transition élastique vers le réservoir droit Γ_p^R . On suppose que $T, \delta E \gg \Gamma_p^{L/R}$, que l'on a un continuum d'états dans les réservoirs et que l'on peut négliger les transitions inélastiques dans le point quantique.

Dans ces conditions, on peut écrire une équation maîtresse exprimant le caractère stationnaire de la distribution des électrons dans les niveaux du point quantique, sachant que ces électrons sont soumis aux taux de transition $\Gamma_p^{L/R}$.

Résumons la dérivation de l'équation maîtresse.

Notons $U(N)$ l'énergie électrostatique lorsque l'on a N électrons dans le point quantique.

Lorsqu'un électron transite du réservoir gauche vers le niveau p du point quantique, son énergie initiale vaut :

$$E^{i,L}(N) = \epsilon_p + U(N+1) - U(N) - \eta eV \quad (1.18)$$

Dans cette expression, N désigne le nombre d'électrons du point quantique *avant* la transition et ηV est la fraction du biais V qui s'établit entre L et le point quantique.

De la même manière, on calcule $E^{f,L}$ énergie finale d'un électron transitant du point quantique vers le réservoir gauche, $E^{i,R}$ énergie initiale d'un électron transitant du réservoir droit vers le point quantique et $E^{f,R}$ énergie finale d'un électron transitant du point quantique vers le réservoir droit :

$$\begin{aligned} E^{f,L}(N) &= \epsilon_p + U(N) - U(N-1) - \eta eV \\ E^{i,R}(N) &= \epsilon_p + U(N+1) - U(N) + (1-\eta)eV \\ E^{f,R}(N) &= \epsilon_p + U(N) - U(N-1) + (1-\eta)eV \end{aligned} \quad (1.19)$$

Notons n_i le nombre d'occupation du niveau i .

La distribution de probabilité $P(\{n_i\})$ est donnée à l'équilibre par la distribution grand canonique. Hors équilibre, cette distribution satisfait à l'équation maîtresse :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\{n_i\})}{\partial t} &= 0 = - \sum_p P(\{n_i\}) \delta_{n_p,0} \left(\Gamma_p^L f(E^{i,L}(N)) + \Gamma_p^R f(E^{i,R}(N)) \right) \\ &\quad - \sum_p P(\{n_i\}) \delta_{n_p,1} \left(\Gamma_p^L (1 - f(E^{f,L}(N))) + \Gamma_p^R (1 - f(E^{f,R}(N))) \right) \\ &\quad + \sum_p P(n_1, \dots, n_{p-1}, 1, n_{p+1}, \dots) \delta_{n_p,0} \left(\Gamma_p^L (1 - f(E^{f,L}(N+1))) + \Gamma_p^R (1 - f(E^{f,R}(N+1))) \right) \\ &\quad + \sum_p P(n_1, \dots, n_{p-1}, 0, n_{p+1}, \dots) \delta_{n_p,1} \left(\Gamma_p^L f(E^{i,L}(N-1)) + \Gamma_p^R f(E^{i,R}(N-1)) \right) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Les premier et quatrième termes de l'équation maîtresse correspondent à la transition de $n_p = 0$ à $n_p = 1$; le premier terme correspond au dépeuplement des états où $n_p = 0$ lors de cette transition et le quatrième terme correspond au peuplement des états où $n_p = 1$ lors de cette transition.

Les deuxième et troisième termes de l'équation maîtresse correspondent à la transition de $n_p = 1$ à $n_p = 0$; le deuxième terme correspond au dépeuplement des états où $n_p = 1$ lors de cette transition et le troisième terme correspond au peuplement des états où $n_p = 0$ lors de cette transition.

Pour résoudre l'équation maîtresse dans le régime de réponse linéaire, on cherche une solution de la forme :

$$P(\{n_i\}) = P_{eq}(\{n_i\}) \left(1 - \frac{eV}{T} \Psi(\{n_i\}) \right) \quad (1.21)$$

où P_{eq} est la distribution d'équilibre.

On trouve alors la formule suivante pour la conductance :

$$G = \frac{e^2}{T} \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\Gamma_p^L \Gamma_p^R}{\Gamma_p^L + \Gamma_p^R} P_{eq}(N) F_{eq}(\epsilon_p | N) (1 - f(\epsilon_p + U(N) - U(N-1))) \quad (1.22)$$

Dans cette équation, $P_{eq}(N)$ est la probabilité que le point quantique contienne N électrons à l'équilibre et $F(\epsilon_p | N)$ est la probabilité à l'équilibre que le niveau p soit occupé sachant que le point quantique contient N électrons.

Une fois que l'on a résolu l'équation maîtresse, le courant s'obtient par la formule :

$$I = e \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}} \Gamma_p^L P(\{n_i\}) (\delta_{n_p,0} f(E_p^{i,L}) - \delta_{n_p,1} (1 - f(E_p^{f,L}))) \quad (1.23)$$

Dans cette équation, le premier terme entre parenthèses est associé au taux de transition du réservoir gauche vers le point quantique et le deuxième terme est associé au taux de transition du point quantique vers le réservoir gauche.

Dans la limite des hautes températures $T \gg U$, on retrouve que la résistance du système est égale à la somme des résistances des deux jonctions.

Intéressons-nous maintenant à la limite $\delta E \ll T \ll U$. Dans ce régime, au voisinage d'une valeur de V_g qui correspond à un pic de Coulomb, la conductance est donnée par :

$$G = G_{max} \frac{\Delta_{min}/T}{\sinh(\Delta_{min}/T)} \quad (1.24)$$

Dans cette expression, $G_{max} = \frac{e^2}{2\delta E} \frac{\Gamma^L(E_F) \Gamma^R(E_F)}{\Gamma^L(E_F) + \Gamma^R(E_F)}$ où E_F est l'énergie de Fermi. De plus, on a appelé Δ_{min} la valeur minimale prise par la fonction de l'entier N définie par $\Delta(N) = E_N - E_{N-1} + \tilde{\mu} - E_F$, E_N étant l'énergie électrostatique du point quantique et $\tilde{\mu}$ le potentiel chimique d'équilibre du point quantique. *On constate que la largeur des pics de Coulomb augmente avec T alors que leur hauteur est indépendante de T .*

Dans la limite $T \ll \delta E$, enfin, on peut montrer que la hauteur des pics augmente lorsque T tend vers 0, tant que $T \gg \Gamma_p^{L/R}$.

Dans le régime $T \ll \Gamma_p^{L/R}$, on ne dispose pas de théorie simple. Cependant, dans le cas *sans interactions*, on peut montrer que la probabilité de transmission à travers le point quantique est une fonction lorentzienne de l'énergie mesurée par rapport à E_F .

Rôle de la diffusion inélastique ([48]) : La diffusion inélastique, que l'on a négligé jusqu'ici, a pour effet de thermaliser la distribution des électrons dans les niveaux du point quantique. Dans le régime $T \ll \Gamma_p^{L/R}$ en l'absence d'interaction, la diffusion inélastique diminue la conductance à la résonance et augmente la largeur des pics. Dans le régime $\Gamma_p^{L/R} \ll T \ll \delta E$, la diffusion inélastique est sans effet sur la conductance.

Minimas de conductance : On peut montrer que dans la théorie du blocage de Coulomb que nous considérons ici, les minimas de conductance sont supprimés exponentiellement quand la température diminue : $G_{min} \propto \exp(-E_{act}/T)$. L'énergie d'activation vaut

$E_{act} = 1/2(\delta E + U)$ si les $\Gamma_p^{L/R}$ sont égaux pour les deux niveaux p adjacents au minima considéré. Nous allons voir dans un instant qu'à température suffisamment basse, cette suppression de conductance n'existe plus.

Cotunneling

Dans le régime de blocage de Coulomb, et si l'on exclu le transport thermiquement assisté, la transition d'un électron du réservoir gauche vers le point quantique ou du point quantique vers le réservoir droit est énergétiquement interdite. Par contre, on peut imaginer un processus où l'on a simultanément transfert d'un électron du réservoir gauche vers le point quantique et transfert d'un électron du point quantique vers le réservoir droit. Un tel processus à deux électrons est appelé *cotunneling* (chapitre 6 de [46] et [14]). Lors d'un processus de cotunneling, il y a passage par un état intermédiaire virtuel ayant une énergie excédentaire de l'ordre de U . Selon la relation d'incertitude énergie-temps, ce passage ne peut se faire que pendant un temps de l'ordre de $\hbar/U$.

Pour étudier le cotunneling, on part d'un hamiltonien contenant :

- Les hamiltoniens libres du point quantique et des terminaux.
- Des termes de couplage tunnel entre les terminaux L et R et le point quantique.
- Un terme d'énergie coulombienne.

On applique alors la théorie des perturbations en traitant le couplage tunnel comme la perturbation. Les contributions au courant d'ordre impair en les couplages tunnel s'annulent trivialement. La contribution d'ordre deux s'annule à cause de l'absence supposée de transport séquentiel. La première contribution non nulle est d'ordre quatre ; elle décrit le cotunneling à deux électrons.

On distingue deux sortes de cotunneling ([46] et [14]) :

- le cotunneling *élastique* dans lequel l'état final de la transition réservoir gauche-point quantique a la même énergie que l'état initial de la transition point quantique-réservoir droit.
- le cotunneling *inélastique* dans lequel ces deux états ont au contraire une énergie différente. Lors d'un processus de cotunneling inélastique, il y a création d'une paire électron-trou dans le point quantique.

Cotunneling inélastique : Notons E_L (respectivement E_R) l'accroissement d'énergie électrostatique lors du passage d'un électron à travers la jonction de gauche (respectivement de droite). On a $U \sim E_L, E_R > 0$ car on s'est placé dans un régime de blocage de Coulomb.

Dans ces conditions, pour une différence de potentiel $|eV| \ll E_L, E_R$, le calcul donne l'expression suivante pour le courant ([46]) :

$$I(V) = \frac{\hbar}{12\pi e^2} G_L G_R \left(\frac{1}{E_L} + \frac{1}{E_R} \right)^2 ((eV)^2 + (2\pi T)^2) V \quad (1.25)$$

Dans cette équation, G_α est la conductance de la jonction α .

On constate que l'on a une conductance différentielle qui se comporte approximativement en $\max(|eV|, T)^2$. Cela peut s'interpréter physiquement en remarquant que les énergies de l'électron et du trou créés par le processus inélastique varient toutes les deux dans une fenêtre de l'ordre de $\max(|eV|, T)$.

Cotunneling élastique : Faisons l'hypothèse que le point quantique est désordonné et supposons que l'énergie de charge U est très petite devant l'énergie de Thouless.

Dans ces conditions, la conductance élastique revêt la forme suivante ([46]) :

$$G_{el} = \frac{\hbar G_L G_R \delta E}{4\pi e^2} \left(\frac{1}{E_L} + \frac{1}{E_R} \right) \quad (1.26)$$

En comparant cette expression avec celle du cotunneling inélastique, on trouve que *le cotunneling élastique domine le cotunneling inélastique à basse température et la transition a lieu pour une température de l'ordre de $T_{el} = \sqrt{U\delta E} \gg \delta E$* .

Quant à la transition entre le régime de cotunneling inélastique et le régime gouverné par l'équation maîtresse, elle survient à une température de l'ordre de ([14]) :

$$T_{in} = \frac{U}{\ln \left(\frac{e^2/h}{G_L + G_R} \right)} \quad (1.27)$$

(Cette température est obtenue en égalisant les conductances obtenues dans ces deux régimes).

Effet Kondo

Nous allons voir que sous certaines conditions, lorsque la température est inférieure à une température caractéristique T_K dont l'expression sera donnée au prochain chapitre, on atteint un régime où la conductance devient de l'ordre de $\frac{2e^2}{h}$ (pour L et R jouant un rôle symétriques) : c'est le régime Kondo qui fait l'objet du prochain chapitre.

Sur la figure 1.7. est représentée l'allure de la courbe donnant la conductance en fonction de la température dans les différents régimes que nous avons évoqué.

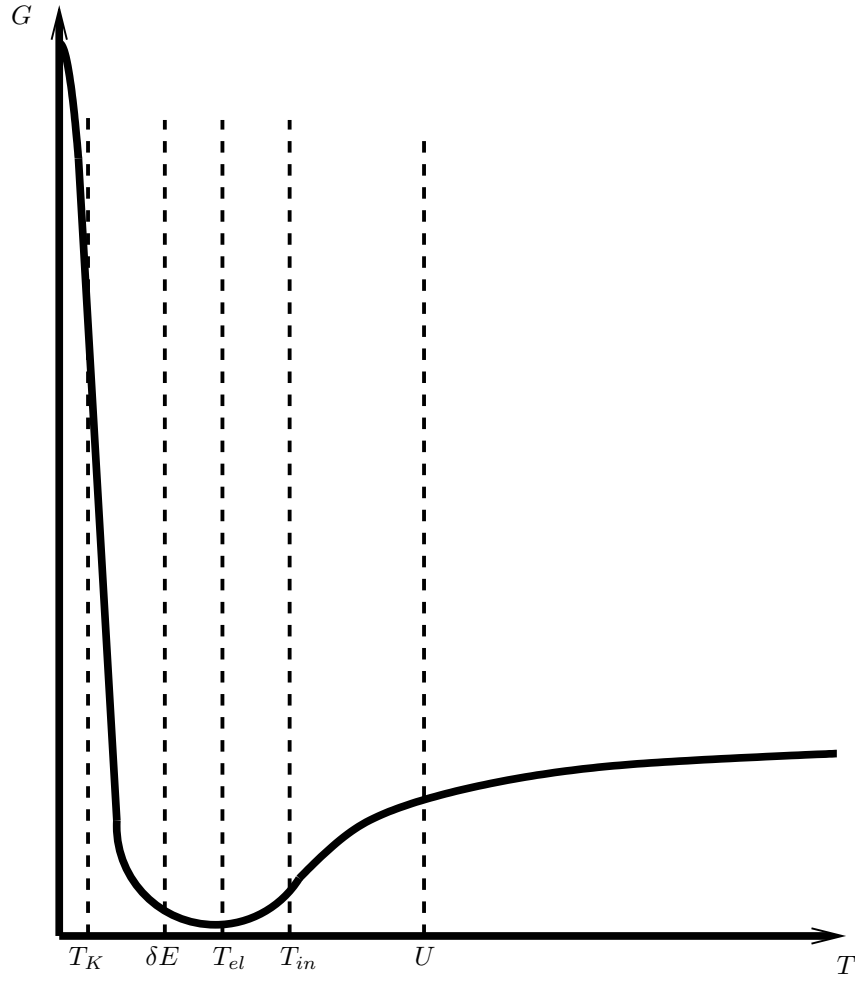


FIG. 1.7 – Conductance en fonction de la température pour un système Kondo (régime de blocage de Coulomb) ; cas où $\delta E \ll U$. Figure tirée de [14]

Chapitre 2

Effet Kondo

Dans ce chapitre, je vais résumer, d'une façon essentiellement qualitative, les résultats classiques sur l'effet Kondo dans un métal ou dans un point quantique connecté à deux terminaux.

2.1 Effet Kondo dans un métal

2.1.1 Introduction historique

Naïvement, on s'attend à ce que la résistance électrique d'un métal se comporte à basse température comme $aT^5 + b$ où a et b sont des constantes. Le terme en aT^5 correspond à la contribution des phonons alors que le terme constant b est lié à la présence d'impuretés non magnétiques.

Or, on constate expérimentalement que la résistance électrique de certains métaux admet un minimum ([27],[8]) comme l'indique la figure 2.1 .

Ce comportement anormal n'a été expliqué qu'en 1964 par Kondo ([1]) : il s'avère être lié à la présence d'impuretés magnétiques dans le métal et il fait intervenir des processus où un électron sort de l'impureté et est remplacé par un autre électron qui peut être de spin opposé (retournement du spin de l'impureté). Kondo est parti de l'Hamiltonien d'échange suivant, décrivant l'interaction d'une impureté magnétique avec les électrons de conduction :

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{kk'ss'} J_{kk'} c_{ks}^\dagger \vec{\sigma}_{ss'} \cdot \vec{S} c_{k's'} \quad (2.1)$$

Dans cette expression, c_{ks} est l'opérateur d'annihilation d'un électron de vecteur d'onde k et de spin s , $\vec{\sigma}$ désigne les matrices de Pauli et $\vec{S}$ représente un spin $\frac{1}{2}$ introduit pour modéliser l'impureté magnétique. Les $J_{kk'}$ sont appelées constantes de couplage.

Pour qu'il soit légitime de partir d'un tel Hamiltonien, qui néglige les interactions entre impuretés, il faut que la concentration en impuretés c_{imp} soit suffisamment faible.

Dans ces conditions, Kondo a montré qu'au troisième ordre en les constantes de cou-

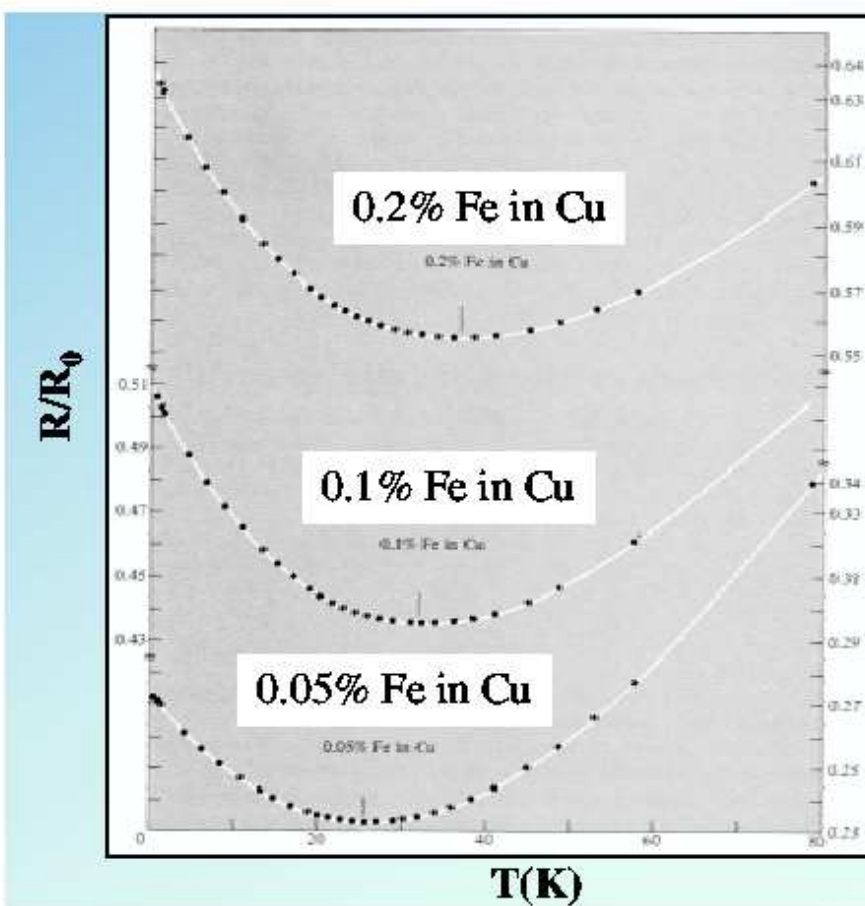


FIG. 2.1 – Résistance en fonction de la température dans un échantillon de cuivre contenant diverses concentrations d'impuretés magnétiques de fer. Figure tirée de [69]

plage, la résistance a la forme suivante :

$$R \simeq aT^5 + \frac{9\pi c_{imp}}{4|e|\rho^2 v_F^2} \left(\rho J + (\rho J)^2 \ln \left(\frac{D}{T} \right) + \dots \right)^2 \quad (2.2)$$

Dans cette expression, ρ est la densité d'état, v_F est la vitesse de Fermi et D est la largeur de la bande de conduction. Les constantes de couplage $J_{kk'}$ ont été supposées prendre une valeur constante J .

Le terme en aT^5 est la contribution des phonons pour des températures très inférieures à la température de Debye ([70]). Expliquons brièvement d'où vient ce terme. Selon l'équation de Boltzmann, la résistance est proportionnelle à l'intégrale $\int_0^\pi (1 - \cos(\theta)) \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta$ où $\sigma(\theta)$ est la section efficace. Les processus pour lesquels l'énergie du phonon échangé est très grande devant la température sont bloqués. Par conséquent, dans le modèle de Debye où l'on a une relation linéaire entre énergie et moment, le moment maximal qui contribue à la résistance varie en T . Par ailleurs, la section efficace σ pour de faibles angles varie en T . On a donc une résistance en $T \int_0^{CT} (1 - \cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta$ où C est une constante. Pour $CT \ll \pi$, l'intégrale est en T^4 et on trouve donc une résistance en T^5 .

Notons que ce calcul ne tient pas compte des processus où un phonon induit un changement de zone de Brillouin.

On constate que (2.2) admet bien un minimum, conformément à l'expérience. Cependant, cette expression admet aussi une divergence non physique lorsque $T \rightarrow 0$. Cette divergence est liée au fait que pour des températures suffisamment faibles, on sort du régime perturbatif où le calcul de Kondo est valable. La transition vers le régime non perturbatif a lieu à une température de l'ordre de $T_K \simeq D \exp\left(-\frac{1}{\rho J}\right)$ (T_K , appelée *température Kondo*, peut être évaluée comme étant l'échelle d'énergie à laquelle le terme en $(\rho J)^3$ devient du même ordre que le terme en $(\rho J)^2$).

Ultérieurement au travail fondateur de Kondo, de nombreuses méthodes, perturbatives ou non, ont été développées pour traiter l'effet Kondo. Dans la section 2.4, nous ferons le point sur ces méthodes.

2.1.2 Observation de l'effet Kondo par microscopie à effet tunnel

Après sa découverte, l'effet Kondo a été observé grâce à la microscopie par effet tunnel ([28]).

On s'intéresse à l'effet Kondo engendré par un atome de Cobalt déposé sur un plan Cu (1,1,1).

Lorsque l'on fixe la position de la pointe du microscope, la spectroscopie tunnel révèle à basse température un puit de la conductance différentielle à biais quasi-nul. Ce puit, ou antirésonance, est une signature de l'effet Kondo et peut être analysé à partir de la théorie de Fano sur le couplage entre un état discret et un continuum ([29]).

En déplaçant latéralement la pointe du microscope et en ajustant sa hauteur de sorte

que le courant qui la traverse reste constant, on peut identifier la résonance Kondo par une augmentation de la conductance différentielle.

On peut alors faire une expérience assez spectaculaire : supposons que l'on dispose sur le plan Cu des atomes de Cobalt le long du contour d'une ellipse et supposons que l'on place un atome de Cobalt supplémentaire sur l'un des foyers de l'ellipse. Alors, à basse température, non seulement une résonance Kondo est détectée par microscopie tunnel au foyer occupé de l'ellipse mais on en détecte aussi une à l'autre foyer. On a ainsi une sorte de mirage quantique d'un atome de Cobalt ; ce "mirage" est lié aux réflexions par l'ellipse d'atomes de Cobalt des ondes électroniques qui partent du foyer occupé pour aller converger à l'autre foyer. Ce mirage est bien lié à l'effet Kondo car il disparaît lorsque l'on remplace l'atome de Cobalt par un atome non magnétique. Par ailleurs, le mirage disparaît aussi lorsque l'on met l'atome de Cobalt supplémentaire ailleurs que sur un foyer de l'ellipse. Enfin, et c'est important, le mirage est fidèle à l'original, bien qu'atténué.

2.2 Effet Kondo dans un point quantique

L'effet Kondo que nous venons d'étudier dans un métal peut également survenir dans un point quantique connecté à deux terminaux L et R .

L'effet Kondo consiste alors en l'écrantage du spin du point quantique par des électrons de conduction, le nuage d'écran formant avec le point quantique un singlet de spin.

Mais alors que dans un métal, l'effet Kondo induit une augmentation de la résistance à basse température, nous verrons que dans un point quantique connecté à deux terminaux, il se manifeste au contraire par une augmentation *de la conductance* à basse température.

Nous allons maintenant nous intéresser aux conditions d'apparition de cet effet Kondo.

Pour que l'effet Kondo puisse avoir lieu, il faut que le spin du point quantique soit non nul. Pour cela, le point quantique doit contenir un nombre impair d'électrons (sauf dans les cas évoqués dans les articles [32] et [33] que nous évoquerons brièvement ultérieurement).

Mais pour que le nombre d'électrons dans le point quantique soit impair, encore faut-il qu'il soit fixé. Pour cela, il faut déjà être dans un régime de blocage de Coulomb.

Mais cela ne suffit pas : il faut aussi que la largeur des niveaux d'énergie du point quantique soit petite devant leur espacement, de sorte qu'il n'y ait pas de recouvrement entre ces niveaux et le niveau de Fermi. Il y a deux échelles d'énergie caractérisant l'espacement entre les niveaux : δE et U . Pour avoir un nombre d'électrons fixé dans le point quantique, il faut donc que la largeur Γ des niveaux soit très petite devant δE et U . Il manque une condition pour que l'effet Kondo puisse avoir lieu ; les énergies auxquelles le transport a lieu se répartissent dans un pic de largeur T centré au niveau de Fermi. Pour que le nombre d'électrons dans le point quantique soit fixé, il faut que ce pic de largeur T ne recouvre pas les niveaux d'énergie du point quantique d'où la condition $T \ll \delta E, U$.

En résumé, pour avoir de l'effet Kondo, il faut :

- 1) Etre dans une vallée du blocage de Coulomb.

2) $\delta E, U \gg T, \Gamma$.

3) nombre impair d'électrons dans le point quantique (sauf cas particuliers évoqués ci-dessous).

Lorsque ces conditions sont satisfaites, on peut définir une énergie caractéristique $T_K \ll \delta E, U$, la température Kondo, qui sépare deux régimes :

1) Le régime où $T_K \ll T \ll \delta E, U$. Ce régime est un régime de couplage faible où le système peut être étudié par des méthodes perturbatives.

2) Le régime où $T \ll T_K$. C'est un régime de couplage fort dans lequel l'effet Kondo apparaît et où la conductance augmente lorsque T diminue en atteignant même sa valeur maximale à $T = 0$, du moins pour des couplages aux réservoirs symétriques (on parle alors de conductance unitaire).

Signalons enfin que l'effet Kondo se manifeste dans la densité locale d'état du point quantique par un pic centré au niveau de Fermi et de largeur T_K . Dans le cas de l'effet Kondo dans un métal, on parle de résonance d'Abrikosov-Suhl.

2.3 Différents types de points quantiques

Après des généralités sur l'effet Kondo dans les points quantiques, nous allons nous intéresser aux effets spécifiques à tel ou tel type de point quantique.

En général, les points quantiques sont fabriqués à partir d'hétérostructures semiconductrices (voir chapitre 1). Cependant, l'effet Kondo a aussi été observé dans des points quantiques formés d'un nanotube de carbone ou d'une molécule.

2.3.1 Effet Kondo dans un nanotube de carbone

L'effet Kondo a été observé dans des nanotubes de carbone ([30]). Quels sont les avantages des nanotubes par rapport aux hétérostructures semiconductrices pour observer l'effet Kondo ?

-Tout d'abord, dans une hétérostructure semi-conductrice, on a une décroissance plus forte qu'exponentielle de la température Kondo avec la taille L du point quantique, ce qui limite le nombre d'électrons contenus dans le point quantique à environ une centaine. Dans un nanotube de carbone en revanche, on peut montrer que la température Kondo ne décroît qu'algébriquement avec L ([30] et [31]). Il en résulte que dans un nanotube de carbone, l'effet Kondo peut apparaître avec des nombres d'électrons très grands, de l'ordre de plusieurs dizaines de milliers.

-Par ailleurs, dans un nanotube de carbone, on a pour la première fois observé un effet Kondo à nombre d'électrons pair (prédit théoriquement dans [32]). Cet effet Kondo fonctionne de la manière suivante : on suppose qu'à champ magnétique nul, le fondamental est un singlet de spin et le premier état excité un triplet de spin. Alors, lorsque la séparation Zeeman de la composante du triplet $S_z = 1$ ou $S_z = -1$ compense l'écart initial entre le singlet et le triplet, on obtient deux états dégénérés de spin respectif 0 et 1 donnant lieu

à un effet Kondo.

Notons au passage qu’une autre sorte d’effet Kondo à nombre d’électrons pair survient lorsque l’écart en énergie entre le singlet et le triplet est compensé non pas par une séparation Zeeman mais par une énergie d’échange $-E_S \vec{S}^2$, où $\vec{S}$ désigne le spin. Dans ce cas, on se ramène à un problème Kondo à deux impuretés (à propos de cet effet, voir [33]).

2.3.2 Effet Kondo dans une molécule

On peut aussi observer l’effet Kondo lorsqu’une molécule joue le rôle du point quantique ([34]).

On considère ainsi un point quantique formé d’une molécule de divanadium V_2 connectée à 2 électrodes d’or.

Sur la figure 2.2, on a représenté la conductance différentielle du système en fonction du potentiel de grille V_g auquel est relié la molécule, et du biais V .

On constate l’existence de deux gaps de conductance I et II délimités par deux droites sur lesquelles la conductance a une valeur plus élevée. Dans la région I , on observe un pic de conductance à biais nul, qui est absent de la région II . Ce pic est une manifestation de l’effet Kondo. Ces résultats sont interprétés en supposant que la région I correspond à l’ion V_2^+ de spin $1/2$ alors que la région II correspond à la molécule V_2^0 de spin 0 .

Au point de croisement des deux limites des régions I et II , la température Kondo excède $30K$!

Enfin, notons que pour expliquer le comportement de la température Kondo en fonction de l’énergie de l’électron localisé, et de la largeur de ce niveau, on suspecte qu’il faille ajouter au degré de liberté de spin un degré de liberté orbital : la localisation de l’électron sur l’un ou l’autre des deux sites équivalents de la molécule de divanadium.

2.4 Groupe de renormalisation et points fixes de l’Hamiltonien Kondo

2.4.1 Introduction du groupe de renormalisation ([27],[49])

Le groupe de renormalisation permet d’étudier comment se transforment les grandeurs physiques lors d’un changement d’échelle d’énergie. Il en existe une version perturbative sur laquelle nous reviendront largement ultérieurement. Pour l’instant, nous allons donner les idées essentielles d’une version numérique du groupe de renormalisation qui permet d’aller au-delà du régime perturbatif.

Dans toute cette thèse, sauf mention explicite du contraire, on se limitera au cas où le spin du point quantique vaut $\frac{1}{2}$ et où on a un seul canal.

Les divergences qui apparaissent dans le calcul perturbatif de l’effet Kondo sont de la forme $\int_T^D \frac{d\epsilon}{\epsilon} \sim \ln\left(\frac{D}{T}\right)$. Si l’on note Λ un paramètre sans dimension strictement supérieur

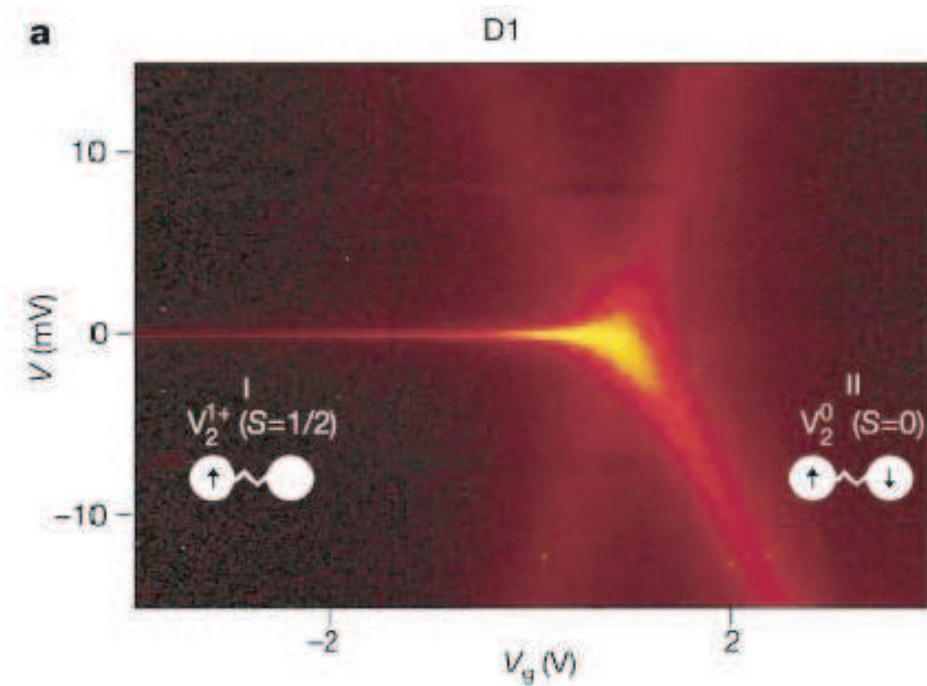


FIG. 2.2 – Conductance différentielle de la molécule de divanadium en fonction de V_g et V ; la conductance différentielle est nulle dans les régions noir-rouge et elle vaut $1.55e^2/h$ dans les régions jaune clair. Les mesures sont effectuées à $T = 300mK$. Figure tirée de [34].

à 1, on constate que les intervalles d'énergie ϵ telle que $D\Lambda^{-(n+1)} < |\epsilon| < D\Lambda^{-n}$ où n est un entier, contribuent également à cette intégrale.

D'où l'idée d'introduire pour chaque entier n des opérateurs d'annihilation $c_{n,\sigma}$ qui sont une combinaison linéaire des opérateurs d'annihilation associés aux énergies comprises dans la gamme $D\Lambda^{-(n+1)} < |\epsilon| < D\Lambda^{-n}$.

En terme de ces nouveaux états, l'Hamiltonien est celui d'une chaîne semi-infinie au premier site de laquelle se trouve l'impureté (ou le point quantique). Soit H_N l'Hamiltonien obtenu en ne gardant que les $N + 1$ premiers sites de la chaîne. L'Hamiltonien H_N est associé à l'échelle d'énergie $D\Lambda^{-N}$. Le groupe de renormalisation numérique est un procédé itératif qui consiste à diagonaliser H_{N+1} à partir du spectre de H_N . Si l'on devait appliquer ce procédé de façon exacte, on devrait vite diagonaliser des matrices ayant un nombre beaucoup trop grand de composantes. Pour résoudre ce problème, on fait l'approximation qui consiste à ne garder à chaque étape de l'itération que les N_{st} états d'énergies les plus basses, où N_{st} est un nombre fixé.

Il s'avère que lorsque l'on fait tendre N vers l'infini, ce n'est pas l'Hamiltonien H_N qui peut avoir une limite finie mais plutôt l'Hamiltonien renormalisé $\bar{H}_N = \frac{2\Lambda^{(N-1)/2}H_N}{D(1+\Lambda^{-1})}$ (en fait, cet hamiltonien admet une limite différente lorsque N est pair ou impair).

2.4.2 Points fixes du groupe de renormalisation

Si $\bar{H}_N$ admet une limite pour $N \rightarrow \infty$, on dit que cet Hamiltonien admet un point fixe. On peut montrer que dans le modèle Kondo (qui est supposé pour simplifier avoir des couplages $J_{kk'}$ égaux à une constante positive J), on a deux points fixes :

- Un point fixe de couplage faible $J = 0$. Ce point fixe est dit instable car si J est proche de 0, il va s'en éloigner lorsque l'on augmente N .
- Un point fixe de couplage fort $J = \infty$. Ce point fixe est dit stable car lorsque $J = \infty$ et que l'on augmente N , on a toujours $J = \infty$. Ce point fixe de couplage fort correspond au régime Kondo que nous allons maintenant étudier.

2.4.3 Point fixe de couplage fort et écrantage

Cas d'un spin $\frac{1}{2}$ couplé à un canal

Pour étudier le point fixe de couplage fort du problème Kondo, on peut utiliser une approche appelée *théorie conforme*.

D'une manière générale, une telle approche permet d'étudier la thermodynamique et le spectre du système au voisinage d'un point fixe.

Théorie conforme ([53]) :

L'Hamiltonien d'un système Kondo unidimensionnel de longueur l finie peut être décom-

posé sous la forme d'une somme d'un Hamiltonien de charge et d'un Hamiltonien de spin. L'Hamiltonien de spin, qui contient l'interaction Kondo, peut s'écrire :

$$H_s = \frac{\pi}{l} \left(\frac{1}{3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{I}_{-n} \cdot \vec{I}_n + \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{I}_n \cdot \vec{S} \right) \quad (2.3)$$

Dans cette expression, les $\vec{I}_n$ sont les composantes de Fourier du courant de spin $\vec{I}(x) = \sum_{ss'} c_s^\dagger(x) \vec{\sigma}_{ss'} c_{s'}(x)$, où les $c_s(x)$ sont les opérateurs champ. λ est un couplage adimensionné. Notons que conformément aux conventions utilisées en théorie des champs, on a posé $\hbar = c = 1$.

Lorsque $\lambda = 2/3$, l'Hamiltonien de spin se réécrit :

$$H_s = \frac{\pi}{3l} \sum_{n=-\infty}^{\infty} [(\vec{I}_{-n} + \vec{S}) \cdot (\vec{I}_n + \vec{S}) - \frac{3}{4}] \quad (2.4)$$

Autrement dit, tout se passe comme si l'on avait un système libre mais avec un courant de spin effectif $\vec{I}_n = \vec{I}_n + \vec{S}$. Cela équivaut à affirmer que l'impureté (ou le point quantique) forme un singulet de spin avec des électrons de conduction, modifiant ainsi d'une demi-unité le spin des électrons restés libres.

Dans l'approche conforme, le point fixe de couplage fort n'est plus $J = \infty$ mais $\lambda = 2/3$. On peut cependant définir un couplage effectif ayant un point fixe de couplage fort infini, par exemple $\lambda_{eff} = \frac{\lambda}{1 - \frac{3}{2}\lambda}$.

Ainsi, on arrive au résultat central suivant : le point fixe de couplage fort du problème Kondo se caractérise par l'écrantage du spin du point quantique (ou de l'impureté) par les électrons de conduction.

L'écrantage mène à la formation d'un singulet de spin qui se découple des autres électrons de conduction. Ainsi, on peut se ramener à l'étude d'un système d'électrons libres, qui forme un liquide de Fermi.

Théorie des liquides de Fermi ([27]) :

Cette théorie s'applique à $T = 0$. Elle consiste à remplacer un système de fermions en interaction par des quasi-particules libres.

Dans la théorie des liquides de Fermi, en développant à l'ordre un la self-énergie des électrons du point quantique, on ramène les fonctions de Green du point quantique à des fonctions de Green libres mais avec des paramètres renormalisés. Cela sera utilisé au chapitre 4.

Cas d'un spin S quelconque couplé à un nombre k quelconque de canaux ([53])

Dans ce cas, l'écrantage de l'impureté donne un spin effectif $S - \frac{k}{2}$. On distingue alors trois cas :

- Le cas sous-écrané $\frac{k}{2} < S$.
- Le cas standard $\frac{k}{2} = S$ où l'on a un singulet de spin.
- Le cas sur-écrané $\frac{k}{2} > S$.

Nous allons montrer que dans le cas sous-écrané, on a un point fixe de couplage fort liquide de Fermi alors que dans le cas sur-écrané, on a un point fixe non liquide de Fermi.

Pour cela, on suppose que le point quantique (ou l'impureté) est couplé au site 0 d'une chaîne infinie via un couplage Kondo $\lambda \vec{S}_{el0} \cdot \vec{S}$ où $\lambda > 0$, $\vec{S}_{el0}$ est le spin des électrons au site 0 et $\vec{S}$ est le spin du point quantique (ou de l'impureté).

Par ailleurs, on suppose un couplage antiferromagnétique $\lambda' \vec{S}_{el0} \cdot \vec{S}_{el1}$ entre les sites 0 et 1.

Après écrantage, on a un spin effectif $\vec{S}_{eff} = \vec{S} + \vec{S}_{el0}$.

Dans le cas sous-écrané, $\vec{S}_{eff}$ et $\vec{S}_{el0}$ sont anti-parallèles et donc on a un couplage effectif ferromagnétique entre les sites 0 et 1. Lorsque l'on diminue l'échelle d'énergie, ce couplage se renormalise en 0. Puisque le couplage entre les sites 0 et 1 tend vers 0, l'interaction Kondo entre le site 0 et $\vec{S}$ se renormalise en couplage fort. D'où un point fixe de couplage fort.

Dans le cas sur-écrané, $\vec{S}_{eff}$ et $\vec{S}_{el0}$ sont parallèles, le couplage effectif entre les sites 0 et 1 est antiferromagnétique et se renormalise en couplage fort. Dans ce cas, le point fixe de couplage fort Kondo n'est pas consistant et l'on a un point fixe non liquide de Fermi.

Ce point fixe est étudié dans [25].

Conclusion

Nous avons vu que la théorie conforme et la théorie des liquides de Fermi permettent d'étudier le point fixe de couplage fort du problème Kondo et son voisinage. Nous allons maintenant étudier des techniques qui permettent d'interpoler entre le point fixe de couplage fort et le point fixe de couplage faible.

2.4.4 Interpolation entre le point fixe de couplage fort et le point fixe de couplage faible

Pour interpoler entre les deux points fixes du problème Kondo, on dispose d'une méthode qui sous certaines hypothèses, permet d'avoir des résultats exacts : c'est l'Ansatz de Bethe.

Ansatz de Bethe ([27],[50],[51]) :

L'ansatz de Bethe donne une solution *exacte* du problème Kondo sous les deux conditions suivantes :

- La relation de dispersion est linéaire.
- La largeur de bande tend vers l'infini.

Les solutions sont caractérisées par deux séries de nombres quantiques, l'une caractérisant les excitations de charge et l'autre les excitations de spin.

Parmi toutes les applications possibles de l'ansatz de Bethe, intéressons-nous par exemple aux propriétés magnétiques d'une impureté magnétique dans un métal. La distribution de particules et de trous en présence d'un champ magnétique peut être déterminée par minimisation de l'énergie libre. Cela permet entre autre de retrouver que le rapport de Wilson vaut deux et on montre que c'est vrai quelle que soit la valeur du champ magnétique.

Lorsque l'Ansatz de Bethe est inutilisable, on peut considérer une approche perturbative.

Approche perturbative et développement à grand N ([27]) :

Pour des températures comprises entre T_K et δE , on peut utiliser une théorie des perturbations en prenant pour perturbation les constantes de couplage d'un hamiltonien de type (2.1) (Hamiltonien Kondo). Nous n'insisterons pas là-dessus pour l'instant car nous aurons largement l'occasion d'y revenir.

Une telle théorie des perturbations donne cependant des divergences pour $T \leq T_K$.

Pour pouvoir atteindre ce régime de température, on peut utiliser une approche perturbative d'un autre type dans laquelle la perturbation n'est plus constituée des constantes de couplage mais plutôt du paramètre $\frac{1}{N}$ où N est le nombre d'états de spin du point quantique (ou de l'impureté). En général, N prend des valeurs relativement faibles, typiquement de 2 à une dizaine. Cependant, même pour $N = 2$, on obtient des résultats qualitativement corrects. Cette approche est appelée *développement à grand N* .

On peut introduire une approche, dite approximation sans croisement, qui est un cas particulier du développement en $\frac{1}{N}$.

Approximation sans croisement NCA ([27]) :

L'approximation sans croisement (NCA) consiste comme son nom l'indique à ne garder dans le développement en $\frac{1}{N}$ que les diagrammes sans croisement. En faisant cela, il est facile de se convaincre que l'on tient compte de tous les diagrammes à l'ordre un et à l'ordre $\frac{1}{N}$; on tient aussi compte de certains diagrammes d'ordre supérieur.

Sous cette hypothèse NCA, on peut écrire un système d'équations intégrales pour les self-énergies du point quantique (ou de l'impureté).

Lorsque l'on utilise la NCA pour le calcul de la densité locale d'état d'une impureté magnétique dans un métal, on trouve un pic de charge de largeur $N\Gamma$ à l'énergie du niveau localisé et le pic de spin Kondo, quant à lui, a une largeur $\frac{T_K}{N}$.

Notons pour terminer que l'approximation NCA n'est pas valable pour des températures trop proches de 0.

Théorie de bosons esclaves en champ moyen ([27],[52]) :

La théorie de bosons esclaves en champ moyen sera utilisée dans cette thèse et nous la décrirons le moment venu.

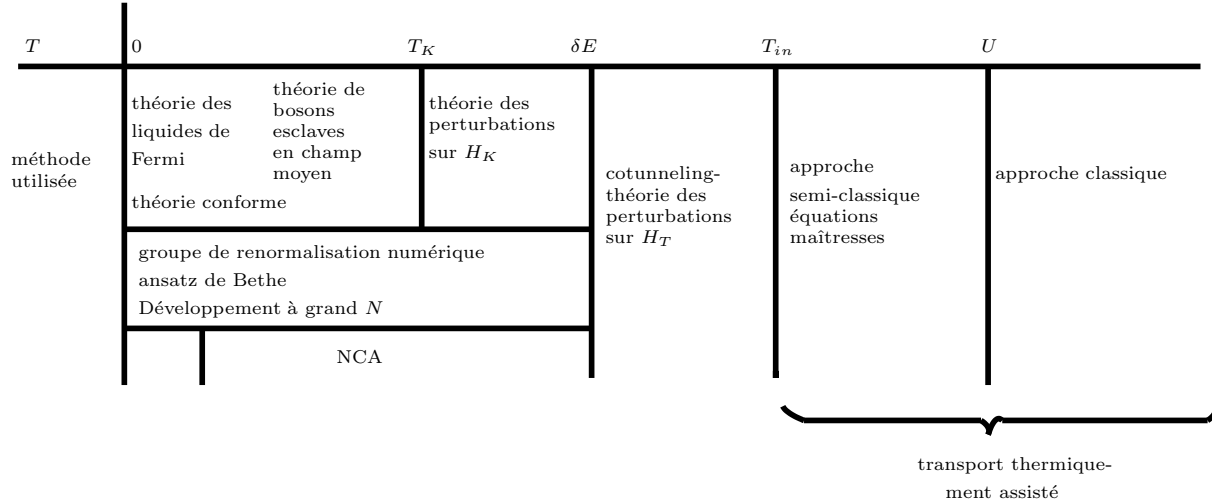


FIG. 2.3 – Techniques utilisées dans les différents régimes de température

Pour l'instant, contentons-nous de dire que cette théorie décrit le régime de température $T \leq T_K$.

Elle s'applique donc dans le régime de couplage fort, bien qu'elle permette d'aller au-delà du point fixe liquide de Fermi.

2.4.5 Résumé des techniques utilisées pour l'étude du problème Kondo

On suppose ici que $\delta E \ll U$. Le tableau de la figure 2.3 résume les méthodes utilisées pour traiter les différents régimes de température.

2.4.6 Résonance Kondo

Comme nous l'avons vu, l'effet Kondo se caractérise par l'apparition d'un pic dans la densité locale d'état du point quantique, situé à l'énergie de Fermi et de largeur T_K .

Cette résonance est montrée sur la figure 2.4.

En plus du pic Kondo, on voit apparaître dans la densité locale d'état du point quantique un pic de largeur Γ . Ce pic est le dernier niveau d'énergie occupé du point quantique, dont la largeur est contrôlée par le couplage aux terminaux.

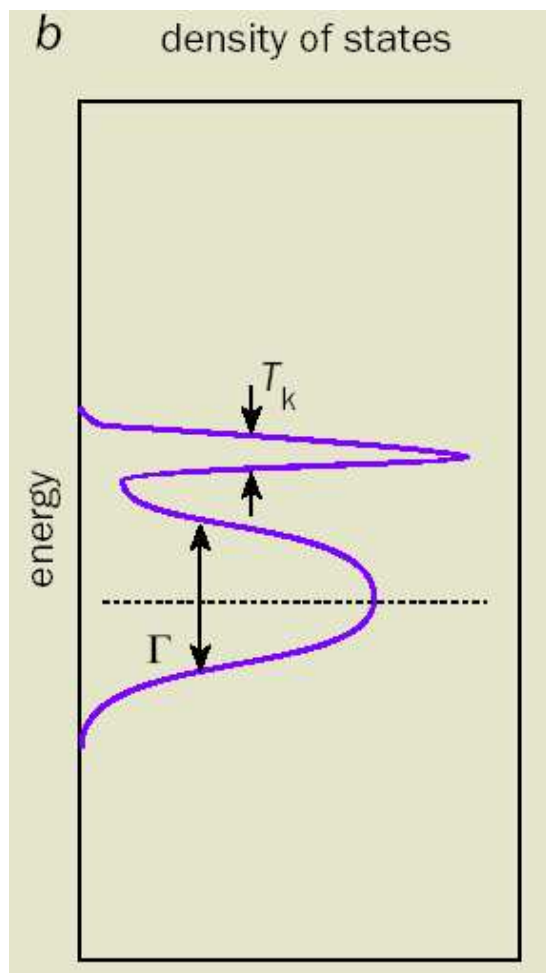


FIG. 2.4 – Densité locale d'état du point quantique dans le régime Kondo. Figure tirée de [71]

2.5 Effet Kondo en présence d'effets de taille finie

Le nuage Kondo n'a pas été observé directement jusqu'à aujourd'hui. Pour palier à ce problème, on peut chercher à connaître l'effet sur le nuage Kondo d'un confinement du système. Ainsi, lorsque la taille du nuage Kondo devient supérieure à la taille du réservoir, le nuage Kondo est altéré et on peut espérer mesurer les effets de cette altération.

Nous allons donc nous intéresser à l'influence sur l'effet Kondo de la taille finie du système. Pour commencer, nous allons étudier l'effet Kondo dans une boîte métallique de petite taille contenant des impuretés magnétiques. Ensuite, nous nous intéresserons à un point quantique inséré dans un système de taille finie, qu'il s'agisse d'un fil ou d'un anneau.

2.5.1 Effet Kondo dans une boîte de petite taille contenant des impuretés magnétiques ([55],[57])

Considérons une boîte métallique contenant des impuretés magnétiques et dont les électrons ont des niveaux d'énergie de Hartree-Fock ayant un espacement typique Δ .

Lorsque $\Delta \ll T$, les effets dus à la taille finie de la boîte ne sont pas distinguables.

Lorsque $\Delta \gg T$ en revanche, la méthode NCA permet de montrer que le pic Kondo se scinde en de multiples pics qui deviennent de moins en moins large sans saturation lorsque T diminue ([55]).

L'espacement entre les pics vaut Δ et l'essentiel du poids spectral est contenu dans un intervalle de largeur T_K .

Les effets de taille finie introduisent une forte dépendance des propriétés du système en la parité du nombre total d'électrons n : si n est pair, on a un pic Kondo centré en 0 alors que si n est impair, on a deux pics de hauteur maximale qui sont situés de part et d'autre de 0 (rappelons que l'on prend l'origine des énergies au niveau de Fermi). De plus, la hauteur moyenne des pics est plus petite pour n impair que pour n pair. Cela peut se comprendre de la manière suivante : lorsque n est pair, le spin de l'impureté est susceptible de s'échanger avec le spin de l'électron de conduction d'énergie maximale, formant ainsi un singulet Kondo, alors que lorsque n est impair, pour que l'un des deux électrons de conduction d'énergie maximale puisse échanger son spin avec l'impureté, il faut que l'un de ces deux électrons passe sur un niveau d'énergie supérieur, ce qui nécessite au moins une énergie Δ .

En fait, dans l'article [57], on montre que dans le cas n pair, l'état fondamental du système est un singulet alors que c'est un doublet dans le cas n impair. Cet article, qui se fonde sur le groupe de renormalisation numérique, va plus loin que l'article [55] au sens où il étudie aussi le cas où la boîte étudiée est faiblement couplée à un réservoir macroscopique. Lorsque n est pair, la température Kondo du système est supérieure à la température Kondo calculée pour une taille du système tendant vers l'infini alors que c'est l'inverse dans le cas où n est impair. Dans ce dernier cas, les électrons du réservoir complètent l'écrantage du spin de l'impureté qui mène à l'effet Kondo.

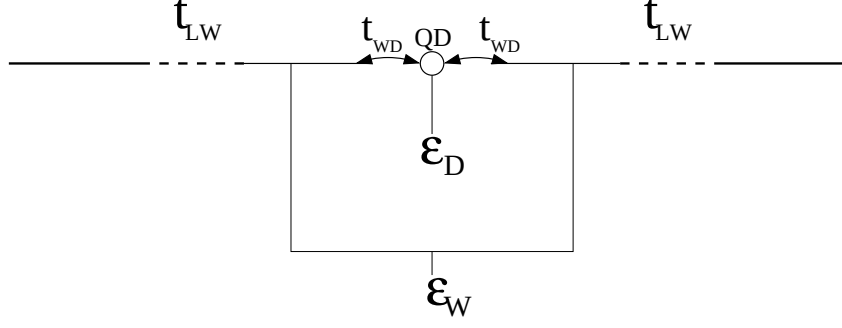


FIG. 2.5 – Point quantique inséré dans un fil quantique de taille finie ; figure tirée de [16]

Pour terminer, signalons qu'il a été montré ([56]) que lorsque l'on place une impureté magnétique dans un réseau d'orbitales avec couplage spin-orbite, il apparaît une anisotropie magnétique se manifestant par un gain d'énergie de la forme $H = K(\vec{n} \cdot \vec{S})^2$ où $\vec{n}$ est la normale à la surface du réseau et $\vec{S}$ est le spin de l'impureté. La constante K est déterminée par la distance de l'impureté à la surface du réseau. Dans le cas d'une impureté de spin 2, l'effet Kondo est supprimé lorsque $K \gg T_K$.

2.5.2 Point quantique inséré dans un fil quantique de taille finie

On considère la géométrie représentée sur la figure 2.5. : un point quantique est connecté à deux fils quantiques par des couplages tunnels et chacun des fils quantiques est connecté à un terminal infini par un couplage tunnel. On peut faire varier les potentiels des fils ϵ_W et du point quantique ϵ_D .

Pour simplifier, nous nous limiterons au cas où il n'y a qu'un seul mode transverse et nous nous limiterons au régime de température décrit par l'hamiltonien Kondo (de type (2.1)).

La géométrie que l'on considère est étudiée dans [15] et [16]. Pour simplifier la discussion, nous nous limiterons au cas dit symétrique où les fils gauche et droit ont les mêmes caractéristiques (même couplages aux terminaux, etc).

Avec l'introduction des effets de taille finie, il y a deux nouvelles échelles d'énergie qui apparaissent dans le problème :

- L'espacement typique entre les niveaux d'énergie des fils quantiques Δ .
- La largeur typique des niveaux d'énergie des fils quantiques γ .

La figure 2.6. donne l'allure de la densité d'état des fils quantiques.

Soit L la longueur des fils quantiques et ξ_K la taille du nuage Kondo.

Il s'avère que le système a un comportement très différent selon que $\xi_K \gg L$ ou $\xi_K \ll L$.

On note T_{K0} la température Kondo en l'absence d'effets de taille finie, c'est-à-dire pour

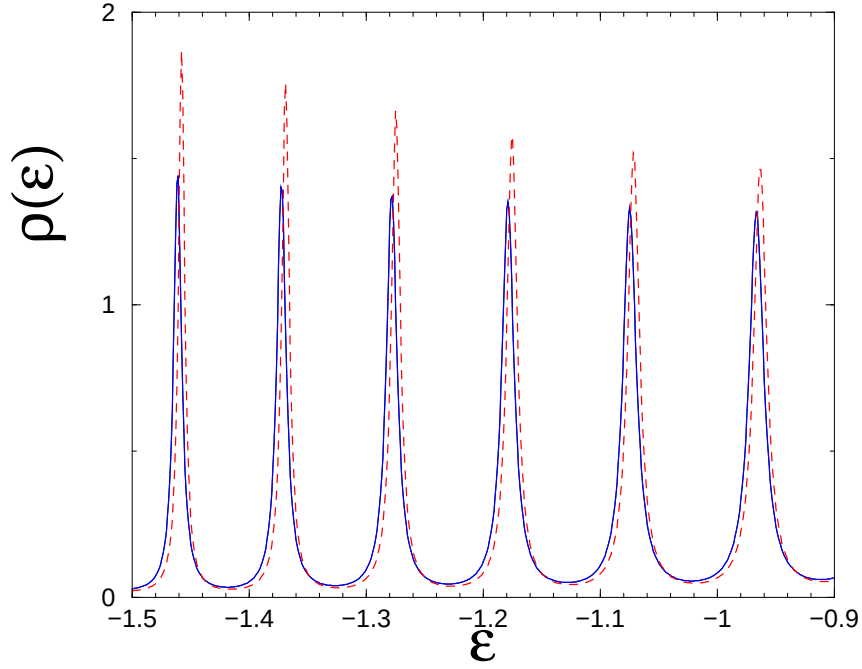


FIG. 2.6 – Allure de la densité d'état des fils quantiques (en trait plein, la densité d'état exacte et en pointillés son approximation par une somme de lorentziennes) ; on a pris des fils ayant 49 sites et tels que $\frac{t_{LW}}{t} = 0.5$ où t_{LW} est le couplage tunnel entre les fils et les terminaux et t est le couplage tunnel entre deux sites consécutifs d'un fil. Unités $t = 1$. Figure tirée de [15]

une densité d'état des fils constante égale à $\langle \rho(\epsilon) \rangle$ ($\rho(\epsilon)$ étant la densité d'état des fils en présence d'effets de taille finie).

Alors, la condition $\xi_K \ll L$ équivaut à $\frac{\hbar v_F}{\xi_K} = T_K \gg \frac{\hbar v_F}{L} = \Delta$ (où v_F est la vitesse de Fermi). Puisque $T_K \simeq T_{K0}$ pour T_K ou $T_{K0} \gg \Delta$, on voit que $\xi_K \ll L$ équivaut à $T_{K0} \gg \Delta$.

Cas $\xi_K \ll L$

Dans ce cas, les effets de taille finie n'influent pas sur la température Kondo et on a donc $T_K \simeq T_{K0}$.

Lorsque $T \gg T_{K0} (\gg \Delta)$, on a un effet de moyennage de la densité d'état des fils qui implique que la conductance dépend peu de ϵ_W . Les effets de taille finie sont alors négligeables.

En revanche, lorsque $T \ll T_{K0}$, le système a la conductance d'un fil de longueur $2L$ sans point quantique, d'où une distance entre pics $\frac{\Delta}{2}$ dans la conductance en fonction de ϵ_W . Dans ce cas, l'effet Kondo induit une transmission parfaite à travers le point quantique.

Cas $\xi_K \gg L$

Dans ce cas, les effets de taille finie influent beaucoup sur la température Kondo et les deux situations suivantes diffèrent fortement :

- Cas où le niveau de Fermi est sur une résonance de la densité d'état des fils (cas R).
- Cas où le niveau de Fermi est à mi-chemin entre deux résonances de la densité d'état des fils (cas NR).

Il s'avère que la température Kondo dans le cas R est de l'ordre de γ : $T_K^R \sim \gamma$. Quant à la température Kondo dans le cas NR, elle est très inférieure à γ si $\frac{t_{LW}}{t} \ll 1$ (t_{LW} est le couplage tunnel entre les terminaux et les fils et t est le couplage tunnel entre deux sites d'un même fil) : $T_K^{NR} \ll \gamma$.

Lorsque $\xi_K \gg L$, les pics de la conductance exprimée en fonction de ϵ_W ont un espacement Δ et non $\frac{\Delta}{2}$, du moins pour des températures supérieures à T_K^{NR} . Cela est dû au fait que les maximums de T_K en fonction de ϵ_W sont déterminés par les densités d'état des deux fils et ont donc une périodicité Δ .

Notons enfin que dans le régime perturbatif, la conductance est beaucoup plus grande dans le cas R que dans le cas NR.

La figure 2.7. représente la conductance dans la situation R pour les deux cas $\xi_K \ll L$ et $\xi_K \gg L$.

Dans le cas $\xi_K \gg L$ (soit $T_{K0} \ll \Delta$), on constate que T_K est bien de l'ordre de γ .

Dans le cas $\xi_K \ll L$ (soit $T_{K0} \gg \Delta$), on a un plateau de conductance pour $\Delta \ll T \ll T_{K0}$ et ce n'est que pour $T \ll \gamma$ que l'on s'approche de la conductance unitaire $\frac{2e^2}{h}$.

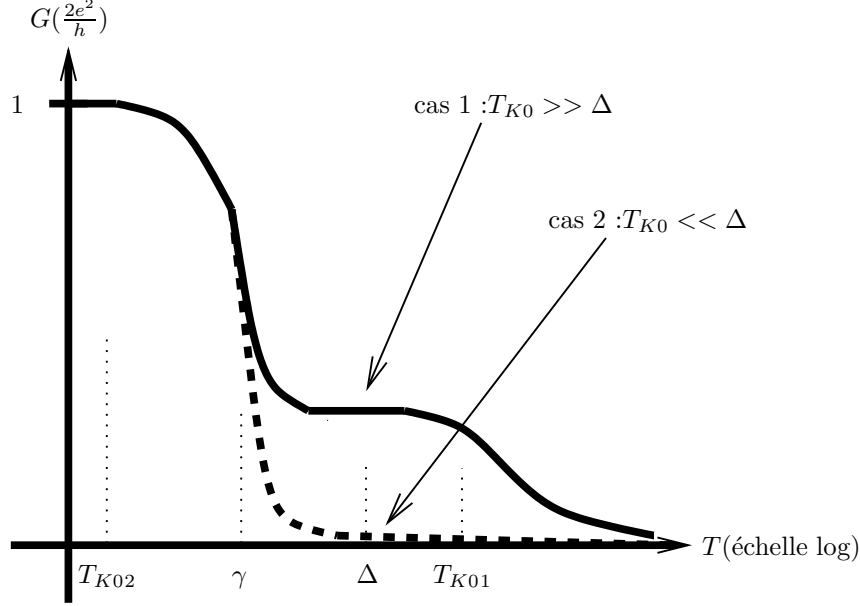


FIG. 2.7 – Allure de la conductance en fonction de la température dans le cas R pour 2 valeurs de T_{K0} . Ordre de grandeur des paramètres : $T_{K02} = 5.10^{-8}t$, $\gamma = 6.10^{-6}t$, $\Delta = 10^{-4}t$, $T_{K01} = 10^{-3}t$. Figure reproduite à partir de [15]

Etudions l'origine de ce plateau de conductance. Pour cela, on part de la formule de Meir-Wingreen :

$$G = \frac{4e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \Gamma(\epsilon) \pi \rho_d(\epsilon) \quad (2.5)$$

Dans cette équation, f est la distribution de Fermi-Dirac, $\rho_d(\epsilon)$ est la densité locale d'état du point quantique et $\Gamma(\epsilon) = \pi \rho(\epsilon) t_{WD}^2$ (voir figure 2.5).

Pour $\Delta \ll T \ll T_{K0}$, la conductance est de l'ordre de la valeur moyenne de la fonction $\frac{4e^2}{h} \Gamma(\epsilon) \pi \rho_d(\epsilon)$, prise sur un intervalle de largeur T . Or, cette fonction varie beaucoup à l'échelle Δ mais lorsqu'elle est moyennée sur cette échelle, son échelle typique de variation devient de l'ordre de T_{K0} . Donc, pour $\Delta \ll T \ll T_{K0}$, la conductance varie peu (il faut supposer que la fonction $\Gamma(\epsilon) \rho_d(\epsilon)$ varie peu avec T). Dans cet intervalle de température, on a donc un plateau de conductance.

Un ordre de grandeur de la hauteur de ce plateau, obtenu par la théorie des bosons esclaves en champ moyen, est donné dans l'annexe G.

2.5.3 Anneau contenant un point quantique

On considère la géométrie représentée sur la figure 2.8 : un point quantique est inséré dans un anneau fermé de longueur L , dans lequel passe un flux magnétique Φ .

Cette géométrie est traitée dans [17] et [18].

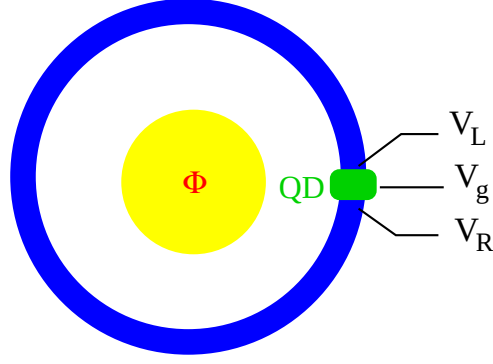


FIG. 2.8 – Anneau contenant un point quantique ; figure tirée de [8]

Commençons par donner quelques notions sur les courants permanents. En effectuant une transformation de jauge, on peut ramener l'Hamiltonien électronique de l'anneau à un Hamiltonien libre, à condition d'adopter une condition aux limites non triviale pour la fonction d'onde électronique : $\psi(x + L) = \psi(x) \exp(2i\pi \frac{\Phi}{\Phi_0})$ ($\Phi_0 = \frac{h}{|e|}$ est le quantum de flux).

L'étape suivante consiste à faire une analogie entre flux et nombre d'onde : le facteur exponentiel $\exp(2i\pi \frac{\Phi}{\Phi_0})$ est analogue au facteur habituel de la fonction d'onde $\exp(ikL)$ si on fait la correspondance $k \leftrightarrow 2\pi \frac{\Phi}{L\Phi_0}$. La vitesse de groupe associée à l'état fondamental d'énergie E , qui vaut $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$, devient $v = \frac{L}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \alpha}$ où l'on a posé $\alpha = \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}$. Dans son état fondamental, le système est donc siège d'un courant, dit permanent, dont l'expression est :

$$I = \frac{-|e|v}{L} = -\frac{|e|}{\hbar} \frac{dE}{d\alpha} \quad (2.6)$$

Dans le cas d'un anneau sans point quantique, les courants permanents dépendent de la classe pour la congruence modulo 4 du nombre d'électrons N ([58]). Voyons pourquoi.

Pour un ensemble d'électrons sans spin dans un anneau, on montre en résolvant l'équation de Schrödinger que le courant permanent a des expressions différentes I_e et I_o pour un nombre d'électrons pair ou impair.

Pour tenir compte du spin, on doit considérer les électrons de spin up et de spin down comme analogues à deux ensembles d'électrons sans spin indépendant l'un de l'autre. Par conséquent, on aura une expression *a priori* différente pour les courants permanents dans les quatre cas suivant :

- $2m$ électrons up et $2m$ électrons down soit $N \equiv 0(4)$.
- $2m + 1$ électrons up et $2m + 1$ électrons down soit $N \equiv 2(4)$.
- $2m + 1$ électrons up et $2m$ électrons down (ou l'inverse) soit $N \equiv 1(4)$.
- $2m - 1$ électrons up et $2m$ électrons down (ou l'inverse) soit $N \equiv 3(4)$.

En fait, les deux derniers cas mènent à des expressions semblables pour le courant permanent dans la limite $N \rightarrow \infty$.

Considérons maintenant le cas plus complexe où l'on insère un point quantique dans l'anneau. Notons N le nombre total d'électrons (anneau+point quantique). Là encore, il faut distinguer les cas $\xi_K \ll L$ et $\xi_K \gg L$.

Le cas $\xi_K \gg L$ peut être approché par des méthodes perturbatives.

Le cas $\xi_K \ll L$ correspond en revanche à un régime de couplage fort. Il peut néanmoins se ramener au cas de $N - 2$ électrons libres en remarquant que les deux électrons formant un singlet de spin n'influent pas sur le comportement des autres électrons. Dans ce problème simplifié, le déphasage induit par le champ magnétique n'est toutefois pas α mais plutôt un déphasage effectif $\alpha + \pi$. On se ramène alors facilement à N électrons libres avec un déphasage α .

Dans le cas $\xi_K \ll L$, la fonction $I(\alpha)$ est discontinue et formée de branches linéaires alors que dans le cas $\xi_K \gg L$, cette fonction est continue. Voir les figures 2.9 et 2.10. Dans les deux cas, et comme en l'absence d'interaction, les courants permanents dépendent fortement de la classe de N pour la congruence modulo 4 :

-La fonction $I(\alpha)$ est π -périodique si N est impair et 2π -périodique si N est pair.

Explication dans le cas sans interaction : lorsque N est pair, on a autant d'électrons de spin up que d'électrons de spin down. Donc, l'énergie du fondamental est le double de l'énergie du fondamental pour un seul spin, et elle est donc 2π -périodique. Pour N impair en revanche, le nombre d'électrons de spin up diffère d'une unité du nombre d'électrons de spin down et donc les énergies des fondamentaux associés, qui sont 2π -périodiques, sont déphasées de π ([58]) et leur somme est π -périodique.

-Le courant est paramagnétique pour N impair et N pair $N/2$ pair et il est diamagnétique pour N pair, $N/2$ impair.

Dans le cas sans interaction, cela est en partie dû au fait qu'un nombre pair d'électrons sans spin donne un courant paramagnétique alors qu'un nombre impair d'électrons sans spin donne un courant diamagnétique ([58]). Par exemple, N pair et $N/2$ pair correspond à $2m$ électrons de spin down et $2m$ électrons de spin up et donc le courant total, double d'un courant paramagnétique, est paramagnétique.

-Enfin, dans le régime perturbatif, les courants permanents sont nettement plus grands lorsque N est pair que lorsque N est impair. Cela est dû au fait que lorsque N est impair, tous les électrons hors du point quantique sont appariés et donc la formation d'un singlet avec le point est plus difficile.

Pour finir cette brève introduction aux effets de taille finie Kondo, signalons que dans l'article [59], on étudie une boîte de taille finie ayant une énergie de charge non négligeable, couplée à 2 terminaux et un spin S . En notant N le nombre d'électrons dans la boîte, un théorème établit que lorsque $S = \frac{1}{2}$, le fondamental est un singlet pour N impair et un doublet pour N pair.

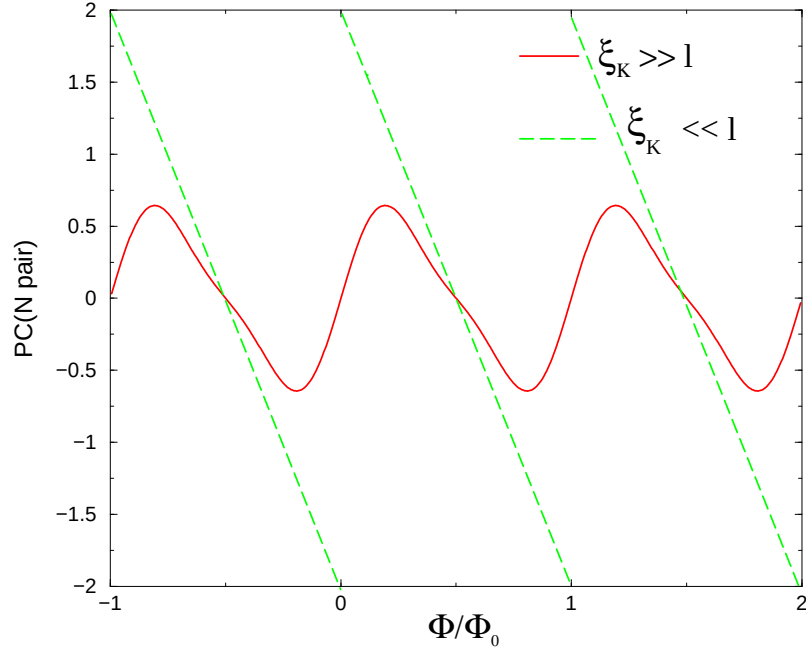


FIG. 2.9 – Courant permanent en fonction du flux pour N multiple de 4. Le courant pour N congru à 2 modulo 4 s'obtient par une translation de $1/2$. (unité $\frac{|e|v_F}{L}$). Figure tirée de [8]

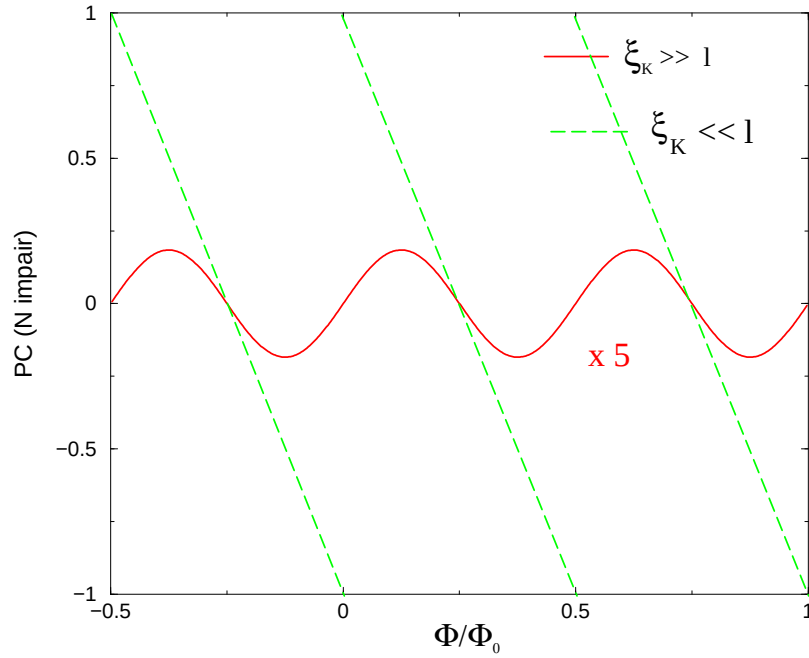


FIG. 2.10 – Courant permanent en fonction du flux pour N impair (unité $\frac{|e|v_F}{L}$). Figure tirée de [8]

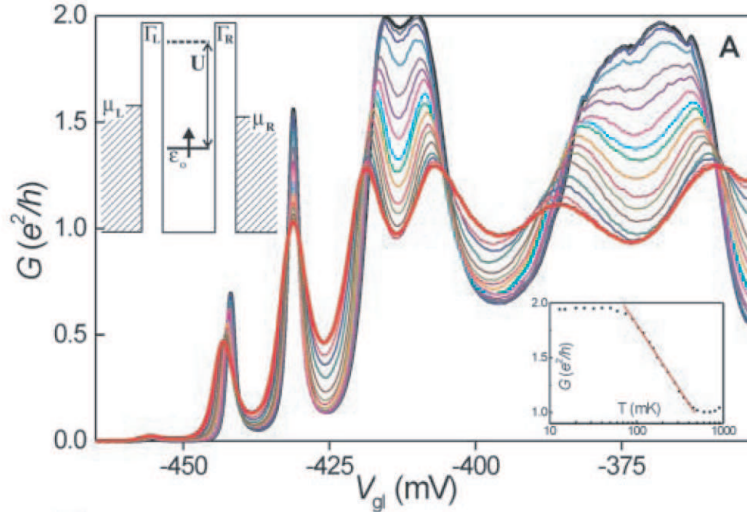


FIG. 2.11 – Conductance en fonction de V_{gl} pour T variant de $15mK$ (courbe noire) à $800mK$ (courbe rouge); dans le petit cadre en bas à droite, conductance en fonction de T pour $V_{gl} = -413mV$. Figure tirée de [19]

2.6 Approche expérimentale de l'effet Kondo ([19],[20])

On considère un point quantique D relié à deux terminaux L et R . D est supposé avoir les caractéristiques suivantes ([19]) :

- taille de l'ordre de $200nm \times 200nm$.
- contient une centaine d'électrons.
- espacement moyen δE entre les niveaux d'énergie à une particule de l'ordre de $100\mu eV$.

Notons V_{gl} le potentiel de grille qui contrôle le nombre d'électrons dans D .

Les mesures que nous allons présenter sont faites à champ magnétique $B = 0.4T$.

La figure 2.11 représente la conductance en fonction de V_{gl} pour différentes températures : la température varie de $15mK$ pour la courbe noire à $800mK$ pour la courbe rouge.

Dans une vallée de blocage de Coulomb sur deux, on constate que la conductance diminue lorsque T diminue; ces vallées correspondent donc à un nombre pair d'électrons dans D . Dans les autres vallées de blocage de Coulomb, on observe un comportement opposé et la conductance atteint même $\frac{2e^2}{h}$ lorsque T tend vers 0; ces vallées correspondent donc à un nombre impair d'électrons dans D et l'effet Kondo apparaît.

Sur la figure 2.12 est représentée la conductance en fonction de la température pour $V_{gl} = -411mV$ (losanges), $-414mV$ (ronds), $-418mV$ (triangles). A partir de ces courbes, il existe des méthodes pour extraire T_K et la conductance est retracée en bas à gauche en fonction du rapport $\frac{T}{T_K}$. Conformément à la théorie, on constate que la conductance est

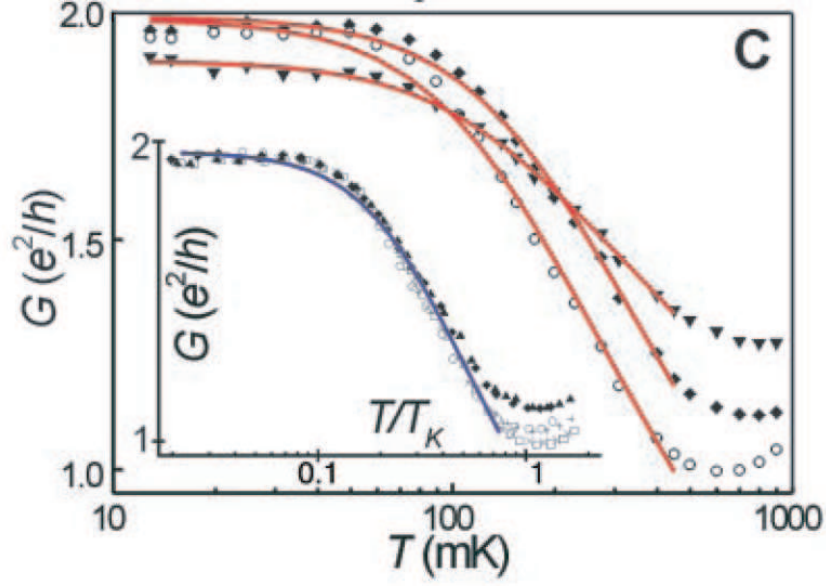


FIG. 2.12 – Conductance en fonction de la température pour $V_{gl} = -411mV$ (losanges), $V_{gl} = -414mV$ (ronds), $V_{gl} = -418mV$ (triangles); en bas à gauche, G est retracée en fonction de $\frac{T}{T_K}$. Figure tirée de [19]

une fonction universelle de $\frac{T}{T_K}$.

Sur la figure 2.13, on a tracé la conductance différentielle $\frac{dI}{dV}$ en fonction de la différence de potentiel V_{SD} entre L et R . La température varie de $15mK$ (courbe noire) à $900mK$ (courbe rouge) et on a pris $V_{gl} = -413mV$. La courbe en haut à gauche représente la largeur à mi-hauteur de la courbe $G(V_{SD})$ en fonction de T .

On constate que l'on a un pic à $V_{SD} = 0$ dont la largeur à mi-hauteur est de l'ordre de T_K . Ce pic, caractéristique de l'effet Kondo, devient moins haut lorsque T augmente puis finit par disparaître lorsque la température dépasse T_K . Notons que ce pic Kondo se scinde en deux pics distants d'environ deux fois l'énergie Zeeman lorsque l'on applique au système un champ magnétique suffisant.

On constate que de part et d'autre du pic Kondo, on a deux pics très larges; ce sont les résonances associées aux deux niveaux d'énergie de D les plus proches de l'énergie de Fermi.

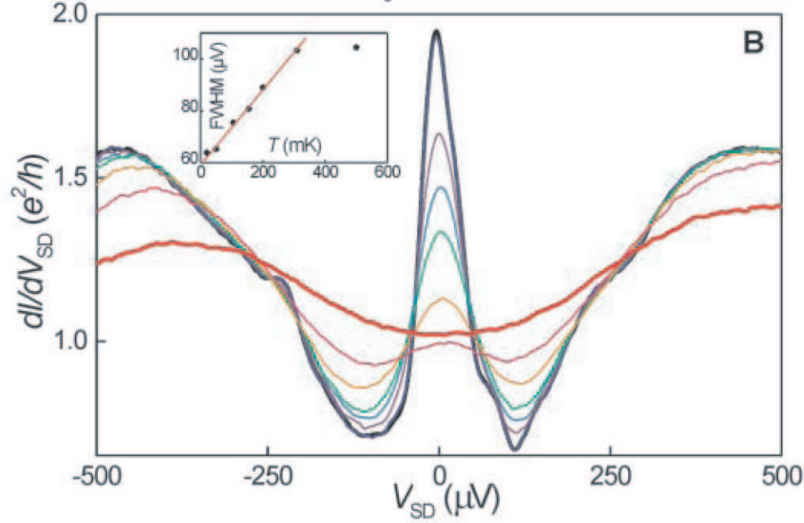


FIG. 2.13 – Conductance différentielle $\frac{dI}{dV}$ en fonction de V_{SD} . La température varie de $15mK$ (courbe noire) à $900mK$ (courbe rouge) et on a pris $V_{gl} = -413mV$. La courbe en haut à gauche représente la largeur à mi-hauteur de la courbe $G(V_{SD})$ en fonction de T . Figure tirée de [19].

2.7 Différents types d'effet Kondo

Pour terminer ce chapitre introductif, nous allons nous intéresser à l'effet Kondo dans différentes situations présentant des complications d'origines diverses.

Effet Kondo hors équilibre :

L'effet Kondo hors équilibre correspond à l'une des situations suivantes :

- 1) La différence de potentiel V entre les terminaux est plus grande que T_K ou de l'ordre de T_K .
- 2) On applique une différence de potentiel ou un couplage Kondo qui dépend du temps.

Situation 1 :

D'un point de vue théorique, il a été prédit ([60]) que l'application d'une différence de potentiel $V > T_K$ conduit à une scission du pic Kondo, les deux pics étant centrés aux deux potentiels chimiques. Lorsque l'on applique un champ magnétique dont la séparation Zeeman compense la différence de potentiel, on a un pic de conductance différentielle.

D'un point de vue expérimental, on a utilisé une géométrie où un anneau quantique est relié à trois terminaux, pour mesurer la scission du pic Kondo hors équilibre ([61]). Le principe de l'expérience est que l'effet Kondo hors équilibre se développe dans deux terminaux fortement couplés à l'anneau alors que le troisième terminal, qui est faiblement couplé à l'anneau, sert de sonde permettant de balayer le spectre Kondo hors équilibre.

La faiblesse du couplage du troisième terminal sert à avoir une sonde non destructive.

Il a été montré ([62]) que le régime $V \gg T_K$ est perturbatif sauf dans des cas qui mènent à un régime de couplage fort Kondo à deux canaux.

Enfin, dans une situation hors équilibre $V \gg T_K$, les constantes de couplage renormalisées acquièrent une dépendance en fréquence ([63]).

Situation 2 :

On a montré ([22]) que le temps caractéristique τ de retournement du spin d'une impureté magnétique ou d'un point quantique, est donné par $\frac{\hbar}{\tau} = \pi T$ (à biais nul). De plus, la réponse du courant à une constante de couplage ayant une dépendance temporelle en forme de marche est identique à la réponse à l'équilibre à une température effective dépendant du temps.

La réponse du courant à un biais rectangulaire a aussi été étudiée ([23]) ; on a entre autre un temps de montée du courant plus court que le temps de descente.

Pour conclure sur l'effet Kondo hors équilibre, signalons que certains auteurs ([65],[66]) ont étudié l'influence sur l'effet Kondo de l'irradiation d'un point quantique. L'irradiation a pour effet de moduler le dernier niveau d'énergie occupé du point quantique ; on suppose de plus qu'un biais pas forcément petit est appliqué entre les terminaux L et R .

Au delà d'une fréquence seuil de la modulation, le point quantique est ionisé, c'est-à-dire que son nombre d'électrons diminue d'une unité ; l'effet Kondo disparaît alors. Mais déjà pour une fréquence de modulation inférieure au seuil, l'effet Kondo est partiellement supprimé. Cette suppression est due à deux effets : d'une part on a une décohérence du spin de l'impureté et d'autre part, on a apparition de pics satellites dans la conductance différentielle à des fréquences multiples de $\hbar\omega$ où ω est la pulsation de la modulation. Lorsque ω tend vers 0, la suppression de conductance Kondo due à la décohérence est plus importante que sa suppression due aux pics satellites.

Enfin, le biais entre L et R supprime la conductance Kondo mais lorsque la fréquence de ce biais augmente, cette suppression de conductance diminue.

En conclusion, l'effet Kondo hors équilibre est un vaste domaine dont le développement n'en est encore qu'à ses débuts.

Effet Kondo multicanal :

Des recherches ont été menées sur la géométrie suivante : un point quantique D à un seul niveau est relié à deux terminaux L et R et à un deuxième point quantique M ayant une énergie de charge u non négligeable et dont on néglige l'espacement entre niveaux ([4],[5]). Lorsque la température est plus grande que u , les fluctuations de charge dans M sont permises et tous les processus suivant sont donc permis :

- Processus diagonaux où un électron passe de D à M (resp. L ou R) puis un électron passe de M (resp. L ou R) à D (on a aussi les processus où ces deux transitions surviennent dans l'ordre inverse).

- Processus non diagonaux où un électron passe de D à M (resp. L ou R) puis un électron

passer de L ou R (resp. M) à D (on a là aussi les processus où ces deux transitions surviennent dans l'ordre inverse).

Lorsque la température devient plus petite que u , les processus non diagonaux sont supprimés car la température ne peut plus fournir l'énergie nécessaire aux fluctuations de charge de M . Par conséquent, il se développe un effet Kondo où l'on a deux canaux indépendants : d'une part une combinaison de L et R , et d'autre part M . Contrairement à l'effet Kondo habituel où l'on n'a qu'un seul canal, cet effet Kondo à deux canaux se caractérise par un comportement non liquide de Fermi, au-delà d'une certaine température et lorsque les couplages associés aux deux canaux sont proches.

Signalons aussi que pour un petit point quantique couplé symétriquement à un grand nombre de grand points quantiques ayant une énergie de charge non négligeable, on a déduit l'existence d'un effet Kondo multicanaux avec une entropie du petit point quantique fonction *décroissante* de la température ([6]).

Effet Kondo et interaction RKKY :

On considère deux points quantiques D_1 et D_2 . On suppose que D_1 est faiblement couplé à un réservoir L , que D_2 est faiblement couplé à un réservoir R et que D_1 et D_2 sont fortement couplés à un réservoir commun C , qui est relié à un dernier réservoir S ([64]). Les réservoirs L , R et S servent simplement à mesurer les densités locales d'état des deux points quantiques.

On suppose qu'en plus de l'interaction Kondo, on a une interaction RKKY, c'est à dire un couplage de la forme $I\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ entre les spins respectifs $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ des points quantiques D_1 et D_2 .

Notons T_{K1} et T_{K2} les températures Kondo respectives des 2 points quantiques en l'absence d'interaction RKKY.

Distinguons les deux cas $I > 0$ et $I < 0$.

Cas ferromagnétique ($I < 0$) :

Pour $|I| \ll \max(T_{K1}, T_{K2})$, chaque spin est écranté indépendamment et exhibe la résonance Kondo habituelle.

En revanche, pour $|I| \gg T_{K1}, T_{K2}$, les deux spins se combinent en un état de spin $S = 1$. On a alors deux températures Kondo T_{Ke} et T_{Ko} , très inférieures à $T_K = T_{K1} = T_{K2}$ dans le cas d'un couplage symétrique. Pour $T \ll \min(T_{Ke}, T_{Ko})$, le spin $S = 1$ est complètement écranté par les électrons de C .

Cas antiferromagnétique ($I > 0$) :

Pour simplifier, restreignons-nous au cas d'un couplage symétrique.

On a une compétition entre l'effet Kondo, qui tend à mettre les spins $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ dans le même sens, et l'interaction RKKY qui tend au contraire à mettre ces spins dans le sens opposé.

On a une valeur critique $(I/T_K)_c$ du rapport I/T_K , qui sépare deux régimes :

-Pour $I/T_K > (I/T_K)_c$, les deux spins forment un état singlet.

-Pour $I/T_K < (I/T_K)_c$, chaque impureté forme un singlet Kondo avec les électrons de conduction.

Effet d'un champ magnétique dans le plan des points quantiques :

On se limite au cas d'un couplage symétrique.

Dans le cas ferromagnétique et $|I| > T_K$, si le champ B est tel que $|I| \gg g\mu_B B > \max(T_{Ke}, T_{Ko})$, on a une scission de la densité locale d'état.

Dans le cas antiferromagnétique maintenant, si I/T_K est inférieur à la valeur critique, le champ magnétique nécessaire pour avoir une scission de la densité locale d'état est beaucoup plus important qu'en l'absence d'interaction RKKY. Il y a donc une compétition entre les interactions Zeeman et RKKY ; la première tend à mettre les spins dans le même sens et la deuxième tend à les mettre dans le sens opposé ($I > 0$).

Lorsque le champ magnétique est tel que la plus basse composante de l'état triplet est dégénérée avec l'état singlet antiferromagnétique, on a apparition d'un pic Kondo correspondant à un nouveau type d'effet Kondo.

Interaction RKKY et point fixe non liquide de Fermi ([73]) :

On considère le modèle Kondo à deux impuretés.

On peut définir les températures T_{RKKY} et T_K , auxquelles les couplages adimensionnés associés à l'interaction RKKY, respectivement Kondo, deviennent de l'ordre de l'unité.

Tant que l'une des deux températures T_{RKKY} et T_K est très petite devant l'autre, le système est un liquide de Fermi.

Cependant, lorsque $T_{RKKY} \simeq T_K$, on a apparition d'un point fixe non liquide de Fermi. Ce point fixe apparaît pour $\frac{K}{T_K} = 2.2$ où K est le couplage RKKY renormalisé. Par ailleurs, ce point fixe n'apparaît qu'en présence d'une certaine symétrie particule-trou.

Notons à ce propos qu'au voisinage du point fixe, une brisure de la symétrie particule-trou est amplifiée sous le groupe de renormalisation et induit l'éloignement du point fixe.

L'article [73] étudie le système au voisinage du point fixe non liquide de Fermi.

Etude de deux qubits couplés à un fil de taille finie ([72]) :

On considère deux impuretés quantiques connectées à un fil de taille finie.

Les électrons du fil sont modélisés par un champ bosonique en dimension 1 qui se couple localement aux impuretés.

Pour que les corrélations entre les deux impuretés soient fortes, il faut que les nuages Kondo associés aux impuretés soient *tous les deux* plus grands que le fil de taille finie. Il faut aussi que les deux résonances Kondo aient la même position.

Sous certaines hypothèses, à faible couplage et lorsque les deux nuages Kondo ont la même taille, on a un enchevêtrement maximal entre les deux impuretés (état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$).

Deuxième partie

Première approche de la géométrie triterminale

Dans cette partie, je vais donner des notions préliminaires sur la géométrie triterminale sans me préoccuper de la forme de la densité d'état du troisième réservoir.

Seront abordés :

- Une introduction de cette nouvelle géométrie.
- Une étude du système à température nulle par la théorie des liquides de Fermi ; nous déduirons ainsi la conductance du système à $T = 0$.

Chapitre 3

Introduction de la géométrie triterminale

3.1 Définition de la géométrie triterminale

3.1.1 Position du problème

On considère un point quantique D connecté à trois réservoirs :

-deux terminaux notés L et R .

-Un troisième réservoir noté T_3 , qui est non nécessairement conducteur.

Nous reviendrons longuement au 3.2. sur l'intérêt de cette étude mais disons tout de suite que deux des trois terminaux, faiblement couplés, serviront à sonder de manière non destructive les effets de taille finie se développant dans le troisième terminal, fortement couplé.

On peut distinguer les deux cas extrêmes suivant :

-*Cas T_3 conducteur : T_3 est un terminal, c'est-à-dire qu'il peut être traversé par un courant.* Voir figure .1.

-*Cas T_3 non conducteur : T_3 ne peut pas être traversé par un courant.*

Ce cas est représenté sur la figure 3.2; par abus de langage, nous continuerons de parler de “géométrie triterminale” dans ce cas.

On peut passer continuellement du cas T_3 conducteur au cas T_3 non conducteur en faisant varier la résistance R et la capacité C de la jonction J qui relie T_3 à un terminal supplémentaire.

A température nulle, R peut être exprimée en fonction du couplage tunnel t' de la jonction J et des densités d'état au niveau de Fermi des deux côtés de la jonction, soient

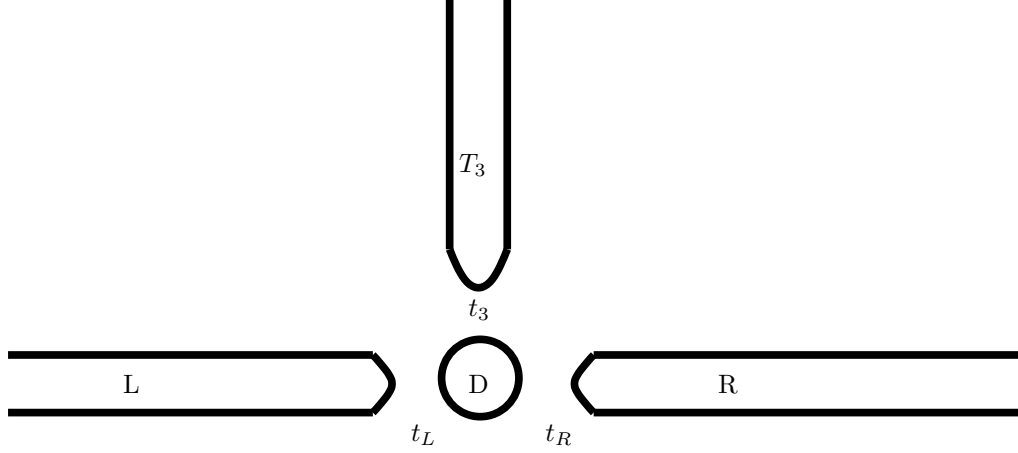


FIG. 3.1 – géométrie triterminale

ρ_1 et ρ_2 :

$$R = \frac{1}{4\pi e^2 \rho_1 \rho_2 |t'|^2} \quad (3.1)$$

Lorsque t' tend vers 0, nous verrons qu'il apparaît des effets dus à la taille finie de T_3 . *Cette limite correspond à une résistance R qui tend vers l'infini.* Ainsi, R mesure en quelque sorte l'amplitude des effets de taille finie.

La capacité C quant à elle mesure la facilité avec laquelle on peut contrôler le potentiel chimique de T_3 en faisant varier le potentiel chimique du terminal T' auquel T_3 est connecté. Ainsi, lorsque $C = \infty$, le potentiel chimique de T_3 est égal au potentiel de T' alors que lorsque $C \rightarrow 0$, on a un fort blocage de Coulomb et il devient difficile de contrôler le potentiel chimique de T_3 . Il est toutefois important de signaler que tant que C n'est pas rigoureusement nul, il est possible de choisir le potentiel chimique de T_3 en appliquant un potentiel de grille approprié.

Le cas T_3 conducteur ci-dessus correspond à $R \rightarrow 0$ et $C \rightarrow \infty$ alors que le cas T_3 non conducteur correspond à $R \rightarrow \infty$. Pour le cas T_3 non conducteur, on peut donc distinguer deux sous-cas extrêmes entre lesquels on peut passer en faisant varier C : le premier sous-cas $C = 0$ correspond à T_3 réellement isolé de T' et le deuxième sous-cas $C \rightarrow \infty$ correspond à une situation où on peut contrôler le potentiel chimique de T_3 .

3.1.2 Modélisation du système

Nous allons maintenant supposer que les conditions d'apparition de l'effet Kondo sont satisfaites (ces conditions se généralisent trivialement dans le cas à trois terminaux).

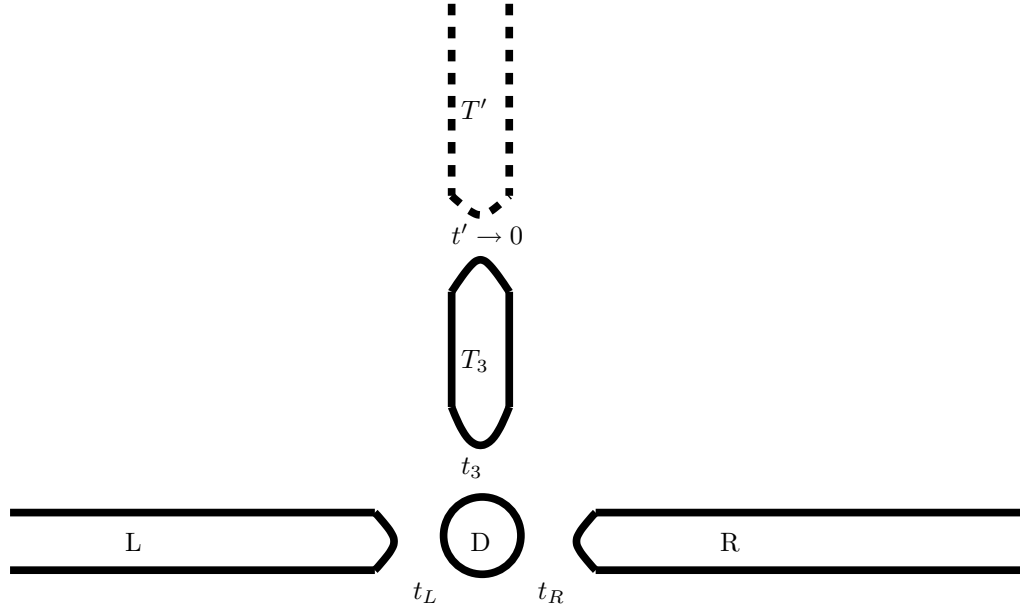


FIG. 3.2 – Point quantique couplé à 2 terminaux et un réservoir non conducteur

Le modèle d'Anderson

Les hypothèses $\Gamma, T \ll \delta E, U$ permettent de négliger les transitions du point quantique impliquant des états autres que les deux niveaux les plus proches de ϵ_F (niveau de Fermi).

Cela permet d'introduire un modèle d'un point quantique relié à trois terminaux dans lequel on ne tient compte que des deux niveaux d'énergie du point quantique qui sont les plus proches du niveau de Fermi ([11]). Dans ce modèle, dit d'Anderson, l'Hamiltonien du système revêt la forme :

$$H = \sum_{\alpha} H_{L\alpha} + \sum_{\alpha} H_{T\alpha} + H_D \quad (3.2)$$

où l'on a décidé une bonne fois pour toutes que les indices grecs prennent les valeurs $L, R, 3$ (pour désigner les terminaux L, R et T_3) et où l'on a défini les opérateurs suivant :

$$\begin{aligned} H_{L\alpha} &= \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\alpha} + \mu_{\alpha}) c_{k\sigma\alpha}^{\dagger} c_{k\sigma\alpha} \\ H_{T\alpha} &= \sum_{k\sigma} t_{k\alpha} c_{k\sigma\alpha}^{\dagger} d_{\sigma} + H.C. \\ H_D &= \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dans ces expressions, $c_{k\sigma\alpha}$ est l'opérateur d'annihilation d'un électron de nombre d'onde k et de spin σ dans le terminal α , d_{σ} est l'opérateur d'annihilation d'un électron de spin σ dans le point, μ_{α} est le potentiel chimique du terminal α et $\epsilon_{k\alpha}$ est l'énergie de l'état de

nombre d'onde k dans le terminal α . Enfin, U est l'énergie de répulsion coulombienne et n_σ est l'opérateur nombre de particules de spin σ dans le point.

Faisons maintenant quelques commentaires sur l'origine physique des différents termes du modèle d'Anderson.

Les $H_{L\alpha}$ sont les Hamiltoniens libres des trois terminaux.

Le terme $H_{T\alpha}$ décrit le couplage tunnel du terminal i avec le point quantique. L'hypothèse fondamentale qui a été faite lors de l'écriture de ce terme est qu'on a une interaction à une particule entre le terminal i et le point quantique. En d'autres termes, on néglige les interactions entre électrons lors de l'étude du passage entre un terminal et le point quantique. Les constantes de couplage tunnel $t_{k\alpha}$ seront supposées réelles.

Le premier terme de H_D est l'Hamiltonien libre du point quantique.

Quant au deuxième terme de H_D , il décrit l'interaction coulombienne entre les électrons occupant les 2 états de spin du point quantique. Voyons comment on peut déduire simplement la forme de ce terme. Nous allons pour cela partir d'une approximation de type champ moyen : on suppose que l'on peut associer une fonction d'onde ϕ à un électron du point quantique et que cette fonction d'onde est la même pour les deux spins. On peut alors évaluer la densité de charge au point $\vec{r}$ des électrons up (respectivement down) par $\rho_\uparrow(\vec{r}) = |\phi(\vec{r})|^2 n_\uparrow$ (respectivement $\rho_\downarrow(\vec{r}) = |\phi(\vec{r})|^2 n_\downarrow$). Et l'énergie d'interaction coulombienne entre les électrons up et down vaut alors :

$$E_{Coul} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \rho_\uparrow(\vec{r}_1) \rho_\downarrow(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = U n_\uparrow n_\downarrow \quad (3.4)$$

Où l'on a posé :

$$U = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\phi(\vec{r}_1)|^2 |\phi(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (3.5)$$

En négligeant l'action des électrons de coeur du point quantique sur les deux derniers niveaux, on fait bel et bien une approximation. Nous avons vu que cette approximation est pertinente si $\Gamma, T \ll U, \delta E$ mais il peut y avoir des cas pathologiques : si les deux niveaux les plus proches de ϵ_F sont accidentellement proches, il se peut que l'interaction d'échange rende énergétiquement favorable d'avoir un spin total de l'impureté strictement supérieur à 1/2. Dans ce cas, le modèle d'Anderson ne sera plus valable.

Toute la suite de cet exposé est fondée sur le modèle d'Anderson.

Transformation de Schrieffer-Wolff

Sous certaines approximations que nous évoquerons tout à l'heure et après avoir fait subir une transformation unitaire à l'Hamiltonien d'Anderson, on obtient le nouvel Hamiltonien suivant :

$$H^{S-W} = \sum_{\alpha} H_{L\alpha} + H_K + H_V \quad (3.6)$$

où :

$$H_K = \sum_{\alpha, \beta} J_{\alpha\beta} \sum_{k s k' s'} c_{ks\alpha}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{ss'}}{2} \cdot \vec{S} c_{k's'\beta}$$

$$H_V = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{kk's} V_{\alpha\beta} c_{ks\alpha}^\dagger c_{k's\beta} \quad (3.7)$$

Dans ces expressions, $\vec{\sigma}$ est le vecteur formé des matrices de Pauli et $\vec{S}$ est un vecteur spin 1/2 représentant le spin du point quantique.

Par souci de simplicité, on a supposé que les couplages de l'Hamiltonien d'Anderson ne dépendent pas du nombre d'onde.

Les couplages $J_{\alpha\beta}$ et $V_{\alpha\beta}$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} J_{\alpha\beta} &= 2t_\alpha t_\beta \left(\frac{1}{\epsilon_d + U} - \frac{1}{\epsilon_d} \right) \equiv \frac{2t_\alpha t_\beta}{\tilde{\epsilon}_d} \\ V_{\alpha\beta} &= \frac{t_\alpha t_\beta}{2} \left(-\frac{1}{\epsilon_d} - \frac{1}{\epsilon_d + U} \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

H_K est appelé *Hamiltonien Kondo*.

Transformation particule-trou :

Examinons le comportement des Hamiltoniens H_V et H_K sous la transformation qui échange les particules et les trous.

La transformation particule-trou T s'écrit :

$$T \begin{pmatrix} c_{k\uparrow\alpha} \\ c_{k\downarrow\alpha} \end{pmatrix} = \sigma_y \begin{pmatrix} c_{-k\uparrow\alpha}^\dagger \\ c_{-k\downarrow\alpha}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Posons :

$$\Psi_{k\alpha} = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow\alpha} \\ c_{k\downarrow\alpha} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

En terme des $\Psi_{k\alpha}$, la transformation T se réécrit :

$$T\Psi_{k\alpha} = \sigma_y {}^t\Psi_{-k\alpha}^\dagger \quad (3.11)$$

Voyons maintenant comment se transforme l'Hamiltonien Kondo sous T :

$$\begin{aligned} H_K &= \sum_{\alpha,\beta} J_{\alpha\beta} \sum_{kk'} \Psi_{k\alpha}^\dagger \frac{\vec{\sigma}}{2} \Psi_{k'\beta} \cdot \vec{S} \\ &\rightarrow \sum_{\alpha,\beta} J_{\alpha\beta} \sum_{kk'} {}^t\Psi_{-k\alpha} \sigma_y \frac{\vec{\sigma}}{2} \sigma_y {}^t\Psi_{-k'\beta}^\dagger \cdot \vec{S} \\ &= - \sum_{\alpha,\beta} J_{\alpha\beta} \sum_{kk'} \Psi_{k'\beta}^\dagger \sigma_y \frac{{}^t\vec{\sigma}}{2} \sigma_y \Psi_{k\alpha} \cdot \vec{S} \\ &= H_K \end{aligned} \quad (3.12)$$

On a utilisé les relations :

$$\sigma_y \vec{\sigma} \sigma_y = \begin{pmatrix} -\sigma_x \\ \sigma_y \\ -\sigma_z \end{pmatrix}$$

$${}^t\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ -\sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

L'avant dernière égalité de (3.12) s'obtient en utilisant les relations d'anticommutation des $\Psi_{k\alpha}$ et en remarquant que la trace des matrices de Pauli est nulle.

Ainsi, l'Hamiltonien Kondo est invariant sous la transformation particule-trou.

Voyons ce qu'il advient du terme H_V :

$$\begin{aligned} H_V &= \sum_{\alpha\beta k k'} V_{\alpha\beta} \Psi_{k\alpha}^\dagger \Psi_{k'\beta} \\ &\rightarrow \sum_{\alpha\beta k k'} V_{\alpha\beta} {}^t\Psi_{-k\alpha} {}^t\Psi_{-k'\beta}^\dagger \\ &= A - \sum_{\alpha\beta k k'} V_{\alpha\beta} \Psi_{-k'\beta}^\dagger \Psi_{-k\alpha} \\ &= A - H_V \end{aligned} \quad (3.14)$$

On a introduit un opérateur A proportionnel à l'identité qui vient du terme en $\delta_{kk'}\delta_{\alpha\beta}$ des relations d'anticommutation des $\Psi_{k\alpha}$.

Ainsi, à un terme proportionnel à l'identité près, H_V change de signe sous la transformation particule-trou. Donc, lorsque l'on a symétrie particule-trou, $H_V = 0$.

Le terme H_V décrit un potentiel de diffusion. On vérifie qu'il s'annule bien lorsque $\epsilon_d = \frac{-U}{2}$, c'est-à-dire lorsque l'on a symétrie particule-trou.

Si l'on n'a pas la symétrie particule-trou mais que les couplages adimensionnés associés à $V_{\alpha\beta}$ sont très petits devant 1, le terme H_V devient négligeable devant H_K à basse énergie ; en effet, nous verrons que contrairement à H_V , H_K est renormalisé à couplage fort à basse énergie. Dans ce qui suit, nous négligerons le terme H_V .

Le nouvel Hamiltonien H^{S-W} résulte de ce que l'on appelle transformation de Schrieffer-Wolff. Le détail de cette transformation se trouve dans l'article [12] et est repris dans l'annexe B. Citons maintenant les conditions d'application de cette transformation :

-Il faut que $\epsilon_- < \epsilon_F$ et $\epsilon_+ = \epsilon_- + U > \epsilon_F$ où ϵ_- (respectivement ϵ_+) est l'énergie de l'état du point quantique à un électron (respectivement 2 électrons).

-Il faut aussi que $\frac{\Gamma_{+/-}}{|\epsilon_{+/-} - \epsilon_f|} \ll 1$ où $\Gamma_{+/-}$ est la largeur du niveau $\epsilon_{+/-}$. C'est cette condition qui permet de faire un développement perturbatif.

Physiquement, ces conditions signifient que le niveau ϵ_+ (respectivement ϵ_-) est complètement au-dessus (respectivement au-dessous) du niveau de Fermi. Elles sont satisfaites sous nos hypothèses que l'on est dans un régime de blocage de Coulomb et que $\delta E, U \gg \Gamma$.

Sous ces approximations, à température nulle, seul le niveau ϵ_- est occupé et le nombre d'électrons dans le point quantique vaut donc 1 (sans compter bien entendu les électrons de coeur qui n'apparaissent même pas dans le modèle d'Anderson).

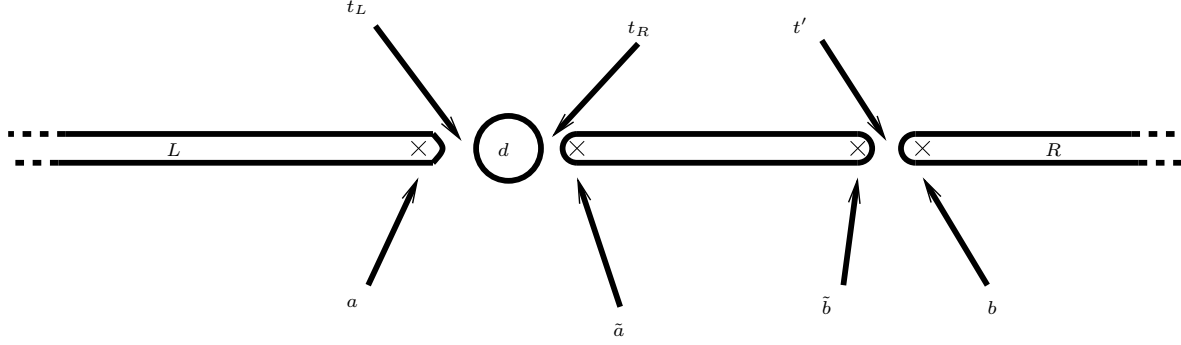


FIG. 3.3 – Une géométrie où un point quantique suivi d’un fil de taille finie sont insérés entre deux terminaux

3.2 Motivation de l’étude

3.2.1 Calcul de la conductance pour les géométries biterminale et triterminale

Cas biterminal

Considérons le circuit de la figure 3.3. : un système constitué d’un point quantique d suivi d’un fil de taille finie, est inséré entre deux terminaux L et R .

On suppose qu’on a un coefficient tunnel t_L entre le terminal gauche et le point quantique, un coefficient tunnel t_R entre le point et le fil et un coefficient tunnel t' entre le fil et le terminal R . On suppose de plus que le fil est porté à un potentiel e_w et qu’il y a une énergie d’interaction coulombienne U sur le point quantique.

Nous noterons f_α la distribution de Fermi-Dirac du terminal α .

Posons $\Gamma_L = \pi\rho_L t_L^2$, $\Gamma_R(\epsilon) = \pi\rho_R(\epsilon)t_R^2$ et $\Gamma' = \pi\rho't'^2$ où ρ_L , $\rho_R(\epsilon)$ et ρ' sont la densité d’état du terminal L , du fil, et du terminal R respectivement. Notons que l’on a supposé $\rho_L(\epsilon)$ et $\rho'(\epsilon)$ constants alors que $\rho_R(\epsilon)$ est non constant à cause de la taille finie du fil.

Nous allons appliquer la formule de Meir-Wingreen avec pour système central l’ensemble constitué du point et du fil. Notons G_{mn}^r et $G_{mn}^<$ les fonctions de Green respectivement retardées et inférieures du système central (les indices m et n indexent les éléments d’une base $\mathcal{B}$ d’états à une particule du système central). Si l’on note t_{Ln} le coefficient de couplage tunnel entre le terminal L et l’état n du système central, le courant est donné par :

$$I = \frac{2ie}{\hbar} \sum_{mn} \int d\epsilon \rho_L t_{Ln} t_{Lm} (f_L(\epsilon) 2i \text{Im}(G_{mn}^r(\epsilon)) + G_{mn}^<(\epsilon)) \quad (3.15)$$

Supposons que les deux états $d \uparrow$ et $d \downarrow$ (localisés sur le point quantique) fassent partie de la base $\mathcal{B}$ et supposons aussi que $t_{Ln} = t_L$ pour $n = d \uparrow$ ou $n = d \downarrow$ alors que $t_{Ln} = 0$

sinon. Alors :

$$I = \frac{4ie}{h} \int d\epsilon \Gamma_L(f_L(\epsilon)) 2i \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) + G_{dd}^<(\epsilon) \quad (3.16)$$

On ne peut pas éliminer $G_{dd}^<(\epsilon)$ de cette expression en utilisant la conservation du courant car la relation de Meir-Wingreen donnant le courant dans le terminal R ne fait pas intervenir les fonctions de Green du point.

En revanche, si $\Gamma_L \ll \Gamma_R(\epsilon), \Gamma'$, on peut supposer que les fonctions de Green du système central dépendent peu du potentiel chimique μ_L du terminal L . Dans ces conditions, dérivons la relation (3.16) par rapport à μ_L :

$$\frac{\partial I}{\partial \mu_L} = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon \left(\frac{-\partial f_L}{\partial \epsilon} \right) \Gamma_L \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.17)$$

Ainsi, la conductance différentielle $\frac{\partial I}{\partial \mu_L}$ est la densité locale d'état du point élargie par la température. En faisant varier μ_L , on peut faire la spectroscopie de cette densité d'état.

Notons que si l'on intègre (3.17) avec la condition initiale $I(\mu_L = \mu_R) = 0$, on trouve une formule de type Meir-Wingreen sans fonction de Green inférieure :

$$I = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon (f_L - f^{(')}) \Gamma_L \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.18)$$

Où l'on a introduit la distribution de Fermi-Dirac du terminal R $f^{(')}$.

Contrairement à la spectroscopie par STM, la spectroscopie que nous étudions ici n'étudie pas la dépendance spatiale de la densité locale d'état mais plutôt sa dépendance en fréquence. La même remarque s'applique au cas triterminal.

Cas triterminal

On suppose qu'on a un coefficient tunnel t_L (respectivement t_R) entre le point quantique et le terminal L (respectivement R). On suppose également que l'on a un coefficient tunnel t_3 entre le point quantique et le réservoir T_3 . Notons ρ_L et ρ_R les densités d'état des terminaux L et R , supposées constantes, et notons $\rho_3(\epsilon)$ la densité d'état du réservoir T_3 , dont la dépendance en énergie traduit les effets de taille finie de ce réservoir. On peut supposer de plus que l'on a un potentiel de grille e_w pour le réservoir T_3 et une énergie d'interaction coulombienne U sur le point quantique.

On définit les trois fonctions :

$$\Gamma_\alpha(\epsilon) = \pi \rho_\alpha(\epsilon) t_\alpha^2 \quad (3.19)$$

où ρ_α est la densité d'état du réservoir α .

Nous allons distinguer les cas T_3 conducteur ou non définis au 3.1.1.. Notons que dans le cas T_3 conducteur, les potentiels chimiques μ_L , μ_R et μ_3 sont des variables indépendantes. Dans le cas T_3 non conducteur en revanche, la condition de nullité du courant traversant T_3 impose une contrainte sur le potentiel chimique μ_3 ; μ_3 est donc une fonction bien déterminée de μ_L et μ_R .

Cas T_3 conducteur : On part de la formule suivante pour le courant sortant du terminal α :

$$I_\alpha = \frac{4ie}{h} \int d\epsilon \Gamma_\alpha(\epsilon) (f_\alpha(\epsilon) 2i \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) + G_{dd}^<(\epsilon)) \quad (3.20)$$

Faisons l'hypothèse que $\Gamma_L, \Gamma_R \ll \Gamma_3(\epsilon)$. On peut alors supposer que la fonction de Green du point dépend peu de μ_L et μ_R et donc en dérivant la relation précédente par rapport à $\mu_{L/R}$, on trouve :

$$\frac{\partial I_\alpha}{\partial \mu_{L/R}} = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon \left(\frac{-\partial f_\alpha}{\partial \epsilon} \right) \Gamma_\alpha(\epsilon) \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \delta_{\alpha, L/R} \quad (3.21)$$

Cette relation permet de faire la spectroscopie de la densité locale d'état du point. En vertu de l'hypothèse $\Gamma_L, \Gamma_R \ll \Gamma_3(\epsilon)$, le nuage Kondo se forme préférentiellement dans le terminal 3 alors que les terminaux L et R servent de "sonde" du système Kondo.

Essayons de retrouver à partir de (3.21) une formule de type Meir-Wingreen donnant non pas la conductance différentielle mais le courant lui-même.

Pour cela, remarquons que pour $\alpha = L$, (3.21) implique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_L}{\partial \mu_L} &= \frac{-8e}{h} \int d\epsilon \left(\frac{\partial f_L}{\partial \mu_L} \right) \Gamma_L(\epsilon) \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \\ &= \frac{\partial}{\partial \mu_L} \left(\frac{-8e}{h} \int d\epsilon f_L \Gamma_L(\epsilon) \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Dans la dernière égalité, on a utilisé que la fonction de Green retardée du point quantique dépend peu de μ_L .

De plus, la relation (3.21) avec $\alpha = L$ implique :

$$\frac{\partial I_R}{\partial \mu_L} = 0 \quad (3.23)$$

Intégrons (3.22) et (3.23) par rapport à μ_L en fixant μ_R et μ_3 :

$$\begin{aligned} I_L &= \frac{-8e}{h} \int d\epsilon f_L(\epsilon) \Gamma_L \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) + F(\mu_3, \mu_R) \\ I_R &= G(\mu_3, \mu_R) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Où F et G sont des fonctions de 2 variables.

En appliquant (3.21) avec $\alpha = L$, on déduit :

$$\frac{\partial I_L}{\partial \mu_R} = 0 \quad (3.25)$$

En utilisant l'expression de I_L donnée par (3.24), il en résulte :

$$\frac{\partial}{\partial \mu_R} \left(\frac{-8e}{h} \int d\epsilon f_L(\epsilon) \Gamma_L \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \right) + \frac{\partial F(\mu_3, \mu_R)}{\partial \mu_R} = 0 \quad (3.26)$$

Le premier terme est proche de 0 car la fonction de Green retardée du point quantique dépend peu de μ_R .

Il reste donc $\frac{\partial F(\mu_3, \mu_R)}{\partial \mu_R} = 0$ ce qui implique que F ne dépend pas de μ_R .

En utilisant la condition initiale $\mu_L = \mu_3 = \mu_R \Rightarrow I_L = 0$, on trouve :

$$F(\mu_3) = \frac{8e}{h} \int d\epsilon f_3(\epsilon) \Gamma_L \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.27)$$

Il ne reste plus qu'à reporter cette relation dans (3.24) :

$$I_L = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon (f_L(\epsilon) - f_3(\epsilon)) \Gamma_L \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.28)$$

De la même manière, on obtient :

$$I_R = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon (f_R(\epsilon) - f_3(\epsilon)) \Gamma_R \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.29)$$

Le courant I_3 quant à lui est donné par la conservation du courant :

$$I_3 = -(I_L + I_R) \quad (3.30)$$

Les relations (3.28), (3.29) et (3.30) déterminent la matrice de conductance (la matrice de conductance $G_{\alpha\beta}$ est définie pour des faibles différences de potentiels, par la relation suivante liant les intensités I_α et les potentiels V_α : $I_\alpha = \sum_\beta G_{\alpha\beta}(V_\alpha - V_\beta)$).

Cas T_3 non conducteur :

Dans ce cas, on a un système à deux terminaux L et R et on a donc la formule de Meir-Wingreen classique :

$$I = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon (f_L(\epsilon) - f_R(\epsilon)) \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.31)$$

Insistons sur le fait que cette relation reste vraie pour Γ_L et Γ_R quelconques. Mais puisque la fonction de Green retardée du point dépend a priori de μ_R et μ_L , nous ne pouvons pas faire de spectroscopie de la densité d'état du point sans hypothèse supplémentaire.

Supposons maintenant que $\Gamma_L \ll \Gamma_3(\epsilon)$ et $\frac{\partial \mu_3}{\partial \mu_L} \simeq 0$. Alors, on peut supposer que G_{dd}^r dépend peu de μ_L et il vient donc en dérivant (3.31) par rapport à μ_L :

$$\frac{\partial I}{\partial \mu_L} = \frac{-8e}{h} \int d\epsilon \frac{-\partial f_L}{\partial \epsilon} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) \quad (3.32)$$

Et donc, comme dans le cas biterminal, on peut faire de la spectroscopie de la densité locale d'état.

A présent, revenons sur les hypothèses que nous avons faites pour parvenir à ce résultat : $\Gamma_L \ll \Gamma_3$ et $\frac{\partial \mu_3}{\partial \mu_L} \simeq 0$. Pour satisfaire ces hypothèses, il suffit d'être dans l'une des deux situations suivantes :

1) $\Gamma_L \ll \Gamma_R, \Gamma_3(\epsilon)$. Dans ce cas, en effet, $\mu_3 \simeq \mu_R$ et la fonction de Green retardée du

point dépendent peu de μ_L .

2) $\mu_L = -\mu_R$ (en prenant une origine des énergies fixée) et $\Gamma_L = \Gamma_R \ll \Gamma_3$. Dans cette situation, on a par symétrie $\mu_3 = 0$ et donc la deuxième hypothèse implique que la fonction de Green retardée du point dépend peu de μ_L et μ_R .

3.2.2 Comparaison des géométries biterminale et triterminale

Quel est l'avantage d'une géométrie triterminale ?

Une réponse possible est que si $\Gamma_3(\epsilon) \ll \Gamma_L(\epsilon), \Gamma_R(\epsilon)$, le terminal T_3 permet de sonder les propriétés *hors équilibre* du nuage Kondo qui se développe dans L et R . C'est ce qui a été montré par Lebanon et Schiller d'une part ([3]) et par Sun et Guo d'autre part ([2]).

Le courant sortant du terminal α est donné par la formule de Meir-Wingreen :

$$I_\alpha = \frac{4ie}{h} \int d\epsilon \Gamma_\alpha(\epsilon) (f_\alpha(\epsilon) 2i \text{Im}(G_{dd}^r(\epsilon)) + G_{dd}^<(\epsilon)) \quad (3.33)$$

où G_{dd}^r et $G_{dd}^<$ sont respectivement les fonctions de Green retardée et inférieure du point quantique.

Dans le cas où les $\Gamma_\alpha(\epsilon)$ sont constants, la conservation du courant permet de déduire que :

$$\begin{aligned} I_3 &= -(I_L + I_R) = \frac{I_3(\Gamma_L + \Gamma_R) - (I_L + I_R)\Gamma_3}{\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3} \\ &= \frac{4e\Gamma_3}{\hbar(\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3)} \int d\epsilon \rho_d(\epsilon) [(\Gamma_L + \Gamma_R)f_3(\epsilon) - \Gamma_L f_L(\epsilon) - \Gamma_R f_R(\epsilon)] \end{aligned} \quad (3.34)$$

où $\rho_d(\epsilon)$ est la densité locale d'état du point quantique.

Lorsque $\Gamma_3 \ll \Gamma_L, \Gamma_R$, $\rho_d(\epsilon)$ dépend peu de μ_3 et on a donc en faisant un développement limité à l'ordre 1 en $\frac{\Gamma_3}{\Gamma_L + \Gamma_R}$:

$$\frac{dI_3}{d\mu_3} \simeq -\frac{4e^2\Gamma_3}{\hbar} \int d\epsilon \rho_d(\epsilon + \mu_3) \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \quad (3.35)$$

Donc, la conductance différentielle est proportionnelle à la densité locale d'état du point quantique élargie par la température.

Ainsi, on peut faire la spectroscopie de la densité locale d'état du point quantique en faisant varier μ_3 . De plus, comme le terminal T_3 est faiblement couplé au point quantique, cette mesure ne perturbe pas le système.

Le gros avantage de cette spectroscopie est de pouvoir sonder l'effet Kondo hors équilibre car μ_L et μ_R sont fixés à des valeurs quelconques.

Cas où les trois couplages sont du même ordre :

Dans l'article [3], les auteurs ont aussi étudié le cas où Γ_3 est du même ordre que Γ_L et Γ_R . Ainsi, ils ont tracé la conductance différentielle $\frac{dI_3}{d\mu_3}$ pour différents rapports $\frac{\Gamma_3}{\Gamma_L}$, en posant $\Gamma_L = \Gamma_R$ et en gardant constante la somme $\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3$ afin de ne pas modifier la température Kondo.

Le résultat est que la conductance différentielle $\frac{dI_3}{d\mu_3}$ est peu modifiée par un changement de Γ_3 , même quand Γ_3 devient de l'ordre de Γ_L . En d'autres termes, même quand les trois couplages sont du même ordre, la conductance différentielle reproduit fidèlement la densité d'état hors équilibre *en l'absence de T_3* .

Notons que si la conductance différentielle $\frac{dI_3}{d\mu_3}$ est peu affectée par Γ_3 , la densité locale d'état du point quantique est en revanche fortement affectée par Γ_3 . Ainsi, lorsque les trois couplages sont du même ordre, la densité locale d'état du point quantique exhibe trois pics, un à chacun des trois potentiels chimiques.

La prise en compte des effets de taille finie dans l'étude du cas où $\Gamma_L \sim \Gamma_R \sim \Gamma_3$ est un problème non encore totalement résolu.

Nous avons vu dans le chapitre 2 une expérience permettant de tester ces idées de mesure de la densité d'état hors équilibre par l'ajout d'un troisième terminal ([61]).

Contrairement à l'approche que nous venons d'esquisser, *nous allons supposer que pour tout ϵ , $\Gamma_3(\epsilon) \gg \Gamma_L(\epsilon), \Gamma_R(\epsilon)$. Dans ce cas, le nuage Kondo se développe essentiellement dans T_3 et les terminaux L et R servent à sonder de manière non destructive les propriétés de ce nuage.*

Au 3.2.1, nous avons fait des calculs de conductance dans ce régime.

Mais nous avons vu que l'on peut faire de la spectroscopie de la densité d'état du point quantique tant dans le cas biterminal que dans le cas triterminal.

Mais alors, cela présente-t-il un avantage spectroscopique d'avoir trois terminaux plutôt que deux ?

-Premièrement, une géométrie triterminale permet de découpler la partie transport de la partie écrantage : le transport aura lieu uniquement dans deux des trois terminaux alors que l'écrantage aura lieu uniquement dans le troisième.

-Deuxièmement, dans le cas où T_3 est non conducteur, ses niveaux d'énergie sont (quasi) discrets. En effet, dans le cas biterminal, les niveaux d'énergie du fil sont élargis par le couplage avec le terminal R , qui s'ajoute au couplage avec le point quantique, alors que dans le cas "triterminal" avec T_3 non conducteur, les niveaux d'énergie de T_3 ne sont élargis que par le couplage avec le point quantique. Bien sûr, ce couplage tient compte indirectement de l'influence des terminaux L et R mais il n'y a pas de couplage direct entre T_3 et un terminal. Ainsi, la géométrie triterminale a pour avantage de permettre l'étude de l'effet Kondo lorsque le nuage Kondo se développe dans un grain ayant des niveaux d'énergie (quasi) discrets.

-Troisièmement, la géométrie triterminale permet de sonder le nuage Kondo par des mesures de transport tout en bloquant le courant de T_3 par l'adjonction d'une énergie de charge. L'étude de notre géométrie en présence d'une énergie de charge de T_3 sera

brèvement évoquée dans la conclusion de la thèse.

3.3 Bilan

Nous avons introduit une géométrie triterminale dans laquelle le troisième terminal est fortement couplé à un point quantique alors que les deux autres terminaux, qui jouent le rôle de sonde, y sont faiblement couplés. Une telle géométrie permet de découpler transport et écrantage Kondo, elle permet aussi d'étudier l'influence sur l'effet Kondo de forts effets de taille finie dans le réservoir T_3 , et elle permet enfin d'étudier l'effet Kondo en présence d'une énergie de charge de T_3 .

Nous avons introduit le modèle d'Anderson puis déduit le modèle Kondo à partir de la transformation de Schrieffer-Wolff.

L'Hamiltonien obtenu par cette transformation fait apparaître un terme Kondo possédant la symétrie particule-trou et un potentiel de diffusion ne possédant pas cette symétrie, qui sera négligé par la suite.

Chapitre 4

Etude du système à température nulle par la théorie des liquides de Fermi

Dans ce chapitre, nous allons étudier notre géométrie triterminale à température nulle grâce à la théorie des liquides de Fermi.

Cette approche est valide au point fixe de couplage fort du problème Kondo, lorsque le spin du point quantique est totalement écranté.

4.1 Modèle de liaisons fortes

4.1.1 Hamiltonien du système

On suppose ici que T_3 est couplé à un terminal T' . On va modéliser chacun des réservoirs L, R, T_3 et T' par un ensemble de sites spatialement localisés équidistants. Notons $c_{j sm}$ l'opérateur d'annihilation d'un électron de spin s situé sur le site j du réservoir m ($m = L, R, 3, T'$). Et notons $n_{j sm} = c_{j sm}^\dagger c_{j sm}$.

Supposons que l'Hamiltonien ait la forme suivante :

$$\begin{aligned} H &= \sum_m H_m + H_D + H_{TD} + H_{TT'} \\ H_{m \neq 3} &= \sum_s \sum_{j=1}^{\infty} \left((-t c_{j sm}^\dagger c_{j+1, sm} + H.C.) + \mu_m n_{j sm} \right) \\ H_3 &= \sum_s \sum_{j=1}^{l-1} \left((-t c_{j s 3}^\dagger c_{j+1, s 3} + H.C.) \right) + \sum_s \sum_{j=1}^l n_{j s 3} (\mu_3 + e_W) \\ H_{TD} &= \sum_s \sum_{\alpha \in \{L, R, 3\}} -t_\alpha c_{1 s \alpha}^\dagger d_s + H.C. \\ H_{TT'} &= \sum_s -t' c_{l s 3}^\dagger c_{1 s T'} + H.C. \end{aligned} \tag{4.1}$$

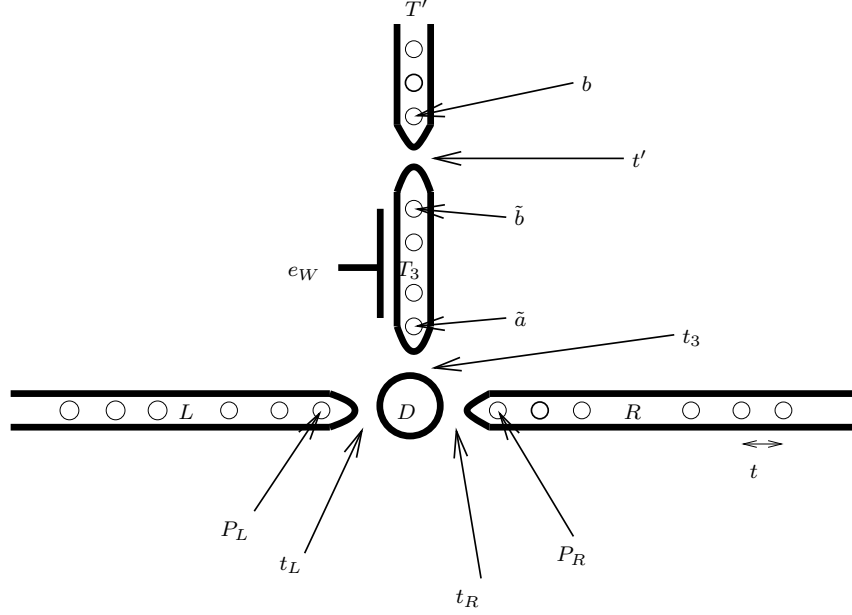


FIG. 4.1 – Modèle de liaisons fortes

H_D a la même expression que dans le chapitre précédent (d_s a la même définition qu'au chapitre précédent).

e_W est un potentiel dû à la présence d'une grille, qui nécessite l'adjonction d'une énergie de charge (la capacité de la jonction avec la grille a une valeur finie). Cette addition d'une énergie de charge sera discutée dans la conclusion et dans l'annexe C.

L'Hamiltonien que nous venons de définir est dit de *liaisons fortes*. Voir la figure 4.1.

4.1.2 Formule de Landauer et Büttiker

Les points b , $\tilde{a}$, $\tilde{b}$, P_L et P_R sont définis sur la figure 4.1. On définit de plus pour $m \in \{L, R, 3, T'\}$ les Γ_m par :

$$\Gamma_m(\epsilon) = \pi \rho_m(\epsilon) t_m^2 \quad (4.2)$$

Dans cette formule, ρ_L (resp. ρ_R resp. ρ_3 resp. $\rho_{T'}$) est la densité locale d'état au point P_L (resp. P_R resp. $\tilde{a}$ resp. b).

La généralisation à trois terminaux de la formule de Meir-Wingreen n'est en principe pas applicable ici car les $\Gamma_\alpha(\epsilon)$ ne sont pas proportionnels.

Nous allons montrer cependant que dans le cas $U = 0$, que nous appellerons *cas sans interaction*, on a bien la formule suivante pour la matrice de conductance :

$$G_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \frac{4\Gamma_\alpha(\epsilon)\Gamma_\beta(\epsilon)}{\Gamma_L(\epsilon) + \Gamma_R(\epsilon) + \Gamma_3(\epsilon)} (-Im(G_{dd}(\epsilon))) \quad (4.3)$$

Dans cette expression, f est la distribution de Fermi-Dirac.

Pour démontrer cette formule, nous allons partir de la formule de Landauer et Büttiker et de l'expression suivante pour les probabilités de transmission (voir [27]) :

$$\begin{aligned} T_{LR} &= \Gamma_L G_{dd}^r G_{dd}^a \Gamma_R \\ T_{L3} &= \Gamma_L G_{db}^r G_{db}^a \Gamma_{T'} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dans ces expressions, l'indice r (respectivement a) désigne les fonctions de Green retardées (respectivement avancées). Notons que la matrice de l'Hamiltonien de liaisons fortes est symétrique dans la base position. Donc, il en va de même de la matrice des fonctions de Green. Donc $G_{db}^r G_{db}^a = |G_{db}^r|^2$.

L'équation de Dyson s'écrit :

$$G^r = G^0 + G^r V G^0 \quad (4.5)$$

Où V est une perturbation et G^0 est la fonction de Green retardée non perturbée.

Nous allons prendre pour perturbation l'ensemble des trois couplages t_L, t_R et t_3 .

En prenant les composante dd , dP_L , dP_R et $d\tilde{a}$ de l'équation de Dyson, on trouve :

$$\begin{aligned} G_{dd}^r &= G_{dd}^0 (1 + G_{dP_L}^r t_L + G_{dP_R}^r t_R + G_{d\tilde{a}}^r t_3) \\ &= G_{dd}^0 (1 + G_{dd}^0 (t_L^2 G_{P_L P_L}^0 + t_R^2 G_{P_R P_R}^0 + t_3^2 G_{\tilde{a}\tilde{a}}^0)) \end{aligned} \quad (4.6)$$

On a donc :

$$G_{dd}^r = \frac{1}{(G_{dd}^0)^{-1} - (t_L^2 G_{P_L P_L}^0 + t_R^2 G_{P_R P_R}^0 + t_3^2 G_{\tilde{a}\tilde{a}}^0)} \quad (4.7)$$

En faisant intervenir les densités locales d'état, cette relation implique que :

$$Im(G_{dd}^r) = -|G_{dd}^r|^2 (\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3) \quad (4.8)$$

On obtient donc :

$$T_{LR} = \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3} (-Im(G_{dd})) \quad (4.9)$$

Ce qui démontre (4.3) pour $\alpha = L$ et $\beta = R$, compte tenu de la formule de Landauer et Buttiker.

Reste à montrer (4.3) pour $\alpha = L$ et $\beta = 3$ (le cas $\alpha = R$ et $\beta = 3$ est identique).

La composante $d\tilde{b}$ de l'équation de Dyson est :

$$G_{d\tilde{b}}^r = t_3 G_{dd}^r G_{\tilde{a}\tilde{b}}^0 \quad (4.10)$$

On a donc :

$$T_{L3} = 4\Gamma_L \Gamma_{T'} |G_{d\tilde{b}}^r|^2 = 4\Gamma_L \Gamma_{T'} t_3^2 |G_{dd}^r|^2 |G_{\tilde{a}\tilde{b}}^0|^2 \quad (4.11)$$

Par conséquent, la composante $L3$ de (4.3) est vérifiée si :

$$\frac{4\Gamma_L \Gamma_3}{\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3} (-Im(G_{dd}^r)) = 4\Gamma_L \Gamma_{T'} t_3^2 |G_{dd}^r|^2 |G_{\tilde{a}\tilde{b}}^0|^2 \quad (4.12)$$

Or, la formule donnant la densité d'état pour un fil semi-infini implique que :

$$\pi\rho_L(\epsilon) = \pi\rho_{T'}(\epsilon) = \frac{1}{t} \left(1 - \frac{\epsilon^2}{4t^2}\right)^{1/2} \quad (4.13)$$

Après quelques manipulations algébriques et en utilisant (4.8), on en déduit que l'on a le résultat cherché si :

$$-Im(G_{\bar{a}\bar{a}}^0) = \frac{t'^2}{t} \left(1 - \frac{\epsilon^2}{4t^2}\right)^{1/2} |G_{\bar{a}\bar{b}}^0|^2 \quad (4.14)$$

On peut vérifier analytiquement cette relation, en calculant explicitement les fonctions de Green mises en jeu à l'aide de l'équation de Dyson.

Ainsi, on a démontré la relation fondamentale (4.3). Bien qu'ayant été démontrée dans le cas sans interactions, cette formule s'applique aussi à toute méthode où l'on utilise des fonctions de Green renormalisées ayant la même forme que des fonctions de Green sans interaction (théorie des liquides de Fermi, bosons esclaves en champ moyen).

4.2 Expression de la conductance à $T = 0$ grâce à un formalisme de diffusion et à la formule de Landauer et Büttiker

Par définition de la matrice S , on a la relation suivante entre amplitude entrante et amplitude sortante du système :

$$\begin{pmatrix} e_R \\ e_L \\ e_3 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} s_R \\ s_L \\ s_3 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

En généralisant à trois terminaux le raisonnement de Ng et Lee ([24]), on trouve l'expression suivante pour la matrice S :

$$\begin{pmatrix} 1 - 2i\pi t_R^2 \rho_R(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) & -2i\pi t_R t_L \sqrt{\rho_R \rho_L}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) & -2i\pi t_R t_3 \sqrt{\rho_R \rho_3}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) \\ -2i\pi t_R t_L \sqrt{\rho_R \rho_L}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) & 1 - 2i\pi t_L^2 \rho_L(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) & -2i\pi t_L t_3 \sqrt{\rho_L \rho_3}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) \\ -2i\pi t_R t_3 \sqrt{\rho_R \rho_3}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) & -2i\pi t_L t_3 \sqrt{\rho_L \rho_3}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) & 1 - 2i\pi t_3^2 \rho_3(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon + i\eta) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Dans cette expression, G_{dd}^r représente la fonction de Green retardée du point quantique et η est un infiniment petit positif.

La transmittance entre α et $\beta \neq \alpha$ vaut :

$$T_{\alpha\beta}(\epsilon) = |2i\pi t_\alpha t_\beta \sqrt{\rho_\alpha \rho_\beta}(\epsilon) G_{dd}^r(\epsilon)|^2 \quad (4.17)$$

Or, lorsque les trois potentiels chimiques sont quasi égaux, on prend l'origine des énergies au potentiel chimique et on a par un raisonnement analogue à celui de Ng et Lee :

$$\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0) = -Im(\Sigma(0)) \quad (4.18)$$

où Σ est la self-énergie.

On a donc :

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}(0) &= 4 \frac{\Gamma_{\alpha}(0)\Gamma_{\beta}(0)}{(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))^2} |Im(\Sigma(0))G_{dd}^r(i\eta)|^2 \\ &= 4 \frac{\Gamma_{\alpha}(0)\Gamma_{\beta}(0)}{(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))^2} \sin^2(\delta) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Où le déphasage δ est lié au nombre d'occupation des états du point quantique par la relation de Friedel :

$$\delta = \pi < n_{d\sigma} > \quad (4.20)$$

($< n_{d\sigma} >$ ne dépend pas du spin en vertu de nos hypothèses selon lesquelles il n'y a pas de champ magnétique ni de matériaux ferromagnétiques).

Dans le régime Kondo, $< n_{d\sigma} > = \frac{\pi}{2}$ et donc :

$$T_{\alpha\beta}(0) = 4 \frac{\Gamma_{\alpha}(0)\Gamma_{\beta}(0)}{(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))^2} \quad (4.21)$$

Matrice de conductance à $T = 0$:

La matrice de conductance à $T = 0$ est donnée par la relation de Landauer et Büttiker :

$$G_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} 4 \frac{\Gamma_{\alpha}(0)\Gamma_{\beta}(0)}{(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))^2} \quad (4.22)$$

Remarque :

Dans le cas sans interaction ($U = 0$), on peut déterminer directement la transmittance du système grâce à l'équation de Schrödinger. Ceci est explicité dans l'annexe D.

4.3 Expression de la conductance à $T = 0$ en utilisant la théorie des liquides de Fermi

On se propose de retrouver les résultats de la section précédente en utilisant la formule (4.3) et l'expression de G_{dd}^r déduite de la théorie des liquides de Fermi ([27]) :

$$G_{dd}^r(\epsilon) = \frac{z}{\epsilon - \tilde{\epsilon}_d + iz(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))} \quad (4.23)$$

où z et $\tilde{\epsilon}_d$ sont des constantes.

En reportant cette expression de G_{dd}^r dans la formule (4.3), on trouve à $T = 0$:

$$G_{\alpha\beta} = \frac{8e^2}{h} \frac{\Gamma_{\alpha}(0)\Gamma_{\beta}(0)z^2}{\tilde{\epsilon}_d^2 + z^2(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))^2} \quad (4.24)$$

Lorsque $U = \infty$, la méthode des bosons esclaves en champ moyen montre que $\tilde{\epsilon}_d \simeq 0$. Par ailleurs, lorsque l'on a la symétrie particule-trou, on a exactement $\tilde{\epsilon}_d = 0$ (en effet, dans ce cas, la densité locale d'état du point quantique doit être symétrique par rapport au niveau de Fermi). Dans les deux cas, on retrouve donc bien le résultat de la section précédente.

4.4 Cas T_3 non conducteur

Je rappelle que les intensités I_α et les potentiels V_α sont liés en régime linéaire par la relation :

$$I_\alpha = \sum_{\beta} G_{\alpha\beta}(V_\alpha - V_\beta) \quad (4.25)$$

Dans le cas où $I_3 = 0$, on a donc :

$$G_{3L}(V_3 - V_L) + G_{3R}(V_3 - V_R) = 0 \quad (4.26)$$

soit :

$$V_3 = \frac{G_{3L}V_L + G_{3R}V_R}{G_{3L} + G_{3R}} \quad (4.27)$$

On a donc :

$$I_3 = \frac{G_{LR}G_{3L} + G_{LR}G_{3R} + G_{L3}G_{3R}}{G_{3L} + G_{3R}}(V_L - V_R) \quad (4.28)$$

D'où la conductance biterminale entre L et R :

$$G = \frac{G_{LR}G_{3L} + G_{LR}G_{3R} + G_{L3}G_{3R}}{G_{3L} + G_{3R}} \quad (4.29)$$

En reportant dans cette expression la matrice de conductance (4.22), on trouve :

$$G = \frac{8e^2}{h} \frac{\Gamma_L(0)\Gamma_R(0)}{(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0))(\Gamma_L(0) + \Gamma_R(0) + \Gamma_3(0))} \quad (4.30)$$

On peut vérifier facilement que si l'on injecte la fonction de Green (4.23) dans la formule de Meir-Wingreen à deux terminaux L et R , on retrouve bien (4.30) lorsque $\tilde{\epsilon}_d = 0$.

4.5 Au-delà du régime liquide de Fermi

Pour terminer ce chapitre, nous allons voir que l'ajout d'une énergie de charge à T_3 permet dans certaines conditions de sortir du régime liquide de Fermi.

Suivant [4], considérons un point quantique D couplé à M points quantiques D_a ($a = 1, \dots, M$). A l'Hamiltonien d'Anderson habituel, on ajoute le terme d'énergie de charge :

$$H_c = \sum_a u_a (n_a - \mathcal{N}_a)^2 \quad (4.31)$$

Dans cette expression, les u_a sont des scalaires, n_a est le nombre d'électrons dans le point quantique D_a et $\mathcal{N}_a$ est un scalaire contrôlé par une grille connectée à D_a .

Après transformation de Schrieffer-Wolff, le terme Kondo de l'Hamiltonien du système s'écrit ([4]) :

$$H_K = \sum_{ab,kq} J_{ab}^{kq} \left(S^+ s_{ab}^{-kq} + S^- s_{ab}^{+kq} + 2S^z s_{ab}^{zkq} \right) + H.C. \quad (4.32)$$

Dans cette expression, on a posé :

$$\begin{aligned} S^{+/-} &= d_{\uparrow/\downarrow}^\dagger d_{\downarrow/\uparrow} \\ 2S^z &= d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} \\ s_{ab}^{+/-kq} &= c_{ak\uparrow/\downarrow}^\dagger c_{bq\downarrow/\uparrow} \\ 2s_{ab}^{zkq} &= c_{ak\uparrow}^\dagger c_{bq\uparrow} - c_{ak\downarrow}^\dagger c_{bq\downarrow} \end{aligned} \quad (4.33)$$

où d_σ est l'opérateur d'annihilation d'un électron de spin σ dans le point quantique D et $c_{ak\sigma}$ est l'opérateur d'annihilation d'un électron de spin σ et de vecteur d'onde k dans le point quantique D_a .

Les couplages J_{ab}^{kq} sont donnés par :

$$J_{ab}^{kq} = J_{ab} = |t|^2 \frac{U + u_b^- + u_a^+}{(U + \epsilon_d + u_b^-)(u_a^+ - \epsilon_d)} \quad (4.34)$$

Où t est le couplage tunnel entre D et les D_a , supposé constant, et où l'on a posé $u_p^\pm = u_p(1 \pm 2(n_p - \mathcal{N}_p)) \pm \epsilon_{pF}$, ϵ_{aF} (respectivement ϵ_{bF}) étant l'énergie du dernier état vide (respectivement occupé) dans le point quantique a (respectivement b).

On définit $u_{ab} = (u_a^+ + u_b^-)(1 - \delta_{ab})$. Lorsque la température est supérieure à $\max\{u_{ab}\}$, les couplages évoluent sous le groupe de renormalisation selon un effet Kondo à un seul canal. Lorsque en revanche la température devient inférieure à $\min\{u_{ab}, a \neq b\}$, les couplages non diagonaux J_{ab} avec $a \neq b$ sont exponentiellement supprimés. Cette suppression exponentielle de J_{ab} pour $a \neq b$ est physiquement due à un blocage de Coulomb des transferts de charge entre a et b .

La suppression des couplages non diagonaux a pour conséquence l'apparition d'un effet Kondo à M canaux, du moins si les couplages diagonaux sont égaux. Dans un tel régime, on a un comportement non liquide de Fermi.

Pour simplifier l'étude d'un tel effet, nous allons considérer le cas particulier d'un point quantique D connecté à deux terminaux L et R et à un deuxième point quantique D_m . L'énergie de charge est donnée par :

$$U(n_d - \mathcal{N}_d)^2 + u_m(n_d + \alpha n_m - \mathcal{N})^2 \quad (4.35)$$

où U , u_m , α , $\mathcal{N}_d$ et $\mathcal{N}$ sont des constantes scalaires et n_d (respectivement n_m) est le nombre d'électrons dans le point quantique D (respectivement D_m).

Soit l la combinaison linéaire des opérateurs d'annihilation de L et R qui se couple à D ([14]).

Sur la figure 4.2. est représenté en fonction des potentiels de grille v_m et v_d appliqués aux points quantiques D_m et D , les domaines de stabilité de la charge de D_m et D ainsi que la courbe sur laquelle $J_{ll} = J_{mm}$ et où on a donc un effet Kondo à deux canaux lorsque les couplages non diagonaux sont supprimés.

Dans le cas $\Gamma_m/\Gamma_l = 1.08$, dans les régions à gauche de la ligne pointillé de gauche et à droite de la ligne pointillé de droite, l'interaction Kondo avec le point quantique D_m domine et on a un effet Kondo à un canal. Dans l'autre région, c'est l'interaction Kondo avec l qui domine et on a encore un effet Kondo à un seul canal.

Dans le cas où $\Gamma_m/\Gamma_l = 1.25$, il n'y a plus qu'une seule région où l'interaction Kondo avec D_m domine : c'est la région comprise entre les deux courbes d'égalité des couplages diagonaux.

Pour terminer, disons un mot de la conductance différentielle $G(T, V_{LR}) = \frac{dI}{dV_{LR}}$ où I est l'intensité et V_{LR} le biais entre L et R . Lorsque l'on est dans un régime Kondo à deux canaux, contrairement à ce qui se passe dans un liquide de Fermi, on a ([5]) :

$$G(T, V_{LR}) = \frac{e^2}{h} \left(1 - \sqrt{\frac{\pi T}{T_K}} \mathcal{F} \left(\frac{|eV_{LR}|}{\pi T} \right) \right) \quad (4.36)$$

où la fonction $\mathcal{F}$ est universelle et a le comportement asymptotique suivant :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(x) &= 1 + cx^2 \text{ si } x \ll 1 \\ \mathcal{F}(x) &= \frac{3}{\sqrt{\pi}} \sqrt{x} \text{ si } x \gg 1 \end{aligned} \quad (4.37)$$

c est un coefficient numérique de l'ordre de 1.

Ainsi, la conductance à $T = 0$ est la moitié de la conductance unitaire $\frac{2e^2}{h}$ et l'écart à la conductance à $T = 0$ est approximativement proportionnel à la racine carré de $\max(|eV_{LR}|, T)$ au lieu du carré comme dans le cas liquide de Fermi. Lorsque les couplages J_{ll} et J_{mm} sont très différents, on retrouve le comportement de la conductance propre aux liquides de Fermi.

4.6 Bilan

En conclusion, pour calculer la conductance de notre système à température nulle, il suffit de connaître la densité locale d'état du point quantique au niveau de Fermi. Celle-ci se calcule à l'aide de la théorie des liquides de Fermi, qui donne une expression pour la fonction de Green retardée du point quantique. On obtient ainsi une expression simple pour la matrice de conductance à température nulle, et cette expression ne fait intervenir

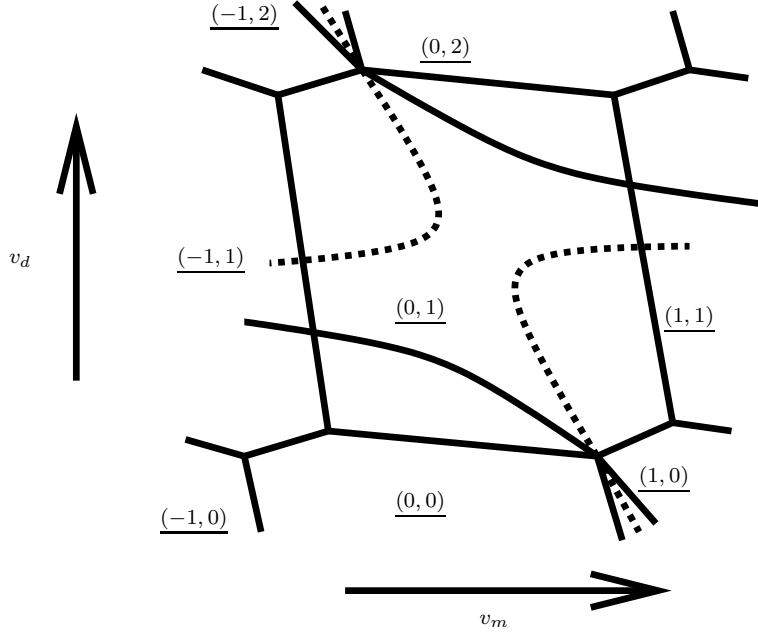


FIG. 4.2 – Diagramme de stabilité des états de charge du double point quantique. Chaque hexagone correspond à une valeur déterminée de (n_m, n_d) (couple souligné). La courbe sur laquelle $J_{ll} = J_{mm}$ est dessinée, en trait plein pour $\Gamma_m/\Gamma_l = 1.25$ et en pointillé pour $\Gamma_m/\Gamma_l = 1.08$ ($\Gamma_{l/m}$ sont définis par (4.2) et sont supposés constants). Figure tirée de [4].

que les couplages pris en l'énergie de Fermi. On vérifie que lorsqu'il n'y a pas de courant dans le troisième terminal, on obtient bien la même expression pour la conductance lorsque l'on considère le système comme ayant deux terminaux L et R et lorsque l'on considère un système à trois terminaux avec la contrainte $I_3 = 0$.

Dans le cas T_3 non conducteur et lorsque $\Gamma_3(0) \gg \Gamma_L(0), \Gamma_R(0)$, la conductance à température nulle est très inférieure à $\frac{2e^2}{h}$. Cela est dû au fait que dans ce cas, le nuage Kondo se forme essentiellement dans T_3 et donc contribue peu à augmenter la conductance entre L et R .

Pour terminer ce chapitre, nous avons évoqué le régime non liquide de Fermi et l'effet Kondo multicanal qui peuvent apparaître lorsque l'on tient compte de l'énergie de charge des réservoirs.

Troisième partie

Effets de taille finie dans une géométrie triterminale

Après une première approche de la géométrie triterminale dans la partie 2, nous allons dans cette partie nous intéresser aux effets liés à la taille finie de T_3 .

Tout d'abord, nous aborderons le groupe de renormalisation perturbatif et le calcul de la température Kondo. Puis, nous étudierons le système à haute température par la théorie des perturbations. Nous nous intéresserons ensuite au comportement du système à des températures très inférieures à T_K , par une approche de type théorie des liquides de Fermi. Enfin, nous étudierons le régime des températures inférieures à T_K mais de l'ordre de T_K grâce à une théorie de bosons esclaves en champ moyen.

Chapitre 5

Groupe de renormalisation et calcul de la température Kondo

Nous allons maintenant aborder la notion de groupe de renormalisation perturbatif ([13], [14] et [27]).

L'idée est que l'on peut réduire la bande d'énergie sur laquelle est défini l'Hamiltonien Kondo, à condition de modifier les constantes de couplages en conséquence. Ainsi, on obtient des constantes de couplage effectives qui dépendent de l'échelle d'énergie ; nous déterminerons quelle est cette dépendance en énergie.

5.1 Introduction du groupe de renormalisation

Les calculs étant un peu lourds, nous ne les mènerons à terme que pour un point quantique relié à un seul réservoir.

Nous écrirons alors la généralisation triterminale des résultats, qui est assez immédiate.

On s'intéresse au problème Kondo dont l'action est donnée en euclidien par :

$$S = \int d\tau (-\bar{\psi} \frac{d\psi}{d\tau} - H(\bar{\psi}(\tau), \psi(\tau), \vec{S}(\tau))) \quad (5.1)$$

où H est l'Hamiltonien Kondo :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int} \\ H_0 &= \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \bar{\psi}(\vec{k}, \tau) \psi(\vec{k}, \tau) \\ H_{int} &= J \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \bar{\psi}(\vec{k}, \tau) \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi(\vec{k}', \tau) \cdot \vec{S} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Dans cette expression, on a introduit l'opérateur champ en représentation $\vec{k}$, $\psi(\vec{k}, \tau)$; il faut considérer cet opérateur comme un spineur à deux composantes.

La fonction de partition s'écrit sous la forme d'une intégrale de chemin :

$$Z = \text{tr}_{\vec{S}} \int [d\bar{\psi}d\psi] T e^{\int_0^\beta d\tau (-\bar{\psi} \frac{d\psi}{d\tau} - H(\bar{\psi}(\tau), \psi(\tau), \vec{S}(\tau)))} \quad (5.3)$$

Où $\beta = \frac{1}{T}$.

Nous supposons que $\vec{k}$ varie dans la zone $|k - k_f|v_f \leq D_0$ où k_f et v_f sont respectivement le nombre d'onde et la vitesse de Fermi, où $k = |\vec{k}|$ et où D_0 est une constante appelée seuil ultraviolet.

Soit $\Lambda \leq D_0$. L'idée du groupe de renormalisation est d'intégrer l'exponentielle de l'action sur tous les modes $\vec{k}$ tels que $\Lambda \leq |k - k_f|v_f \leq D_0$. Le résultat de cette intégration au deuxième ordre en J sera l'exponentielle d'une action définie pour les modes $|k - k_f|v_f \leq \Lambda$ et ayant la même forme que l'action initiale avec cependant une nouvelle constante de couplage : cette nouvelle constante caractérise le couplage à l'échelle d'énergie Λ et s'appelle *constante de couplage renormalisée*. Notons que cette possibilité de retrouver en réduisant la bande un Hamiltonien ayant la même forme que l'Hamiltonien initial avec toutefois un couplage renormalisé, existe pour l'Hamiltonien Kondo mais n'existe pas forcément pour un Hamiltonien quelconque.

Notons $k_>$ l'ensemble des $\vec{k}$ tels que $\Lambda \leq |k - k_f|v_f \leq D_0$ et $k_<$ l'ensemble des $\vec{k}$ tels que $|k - k_f|v_f \leq \Lambda$. Notons de plus $S_{0>}$ (respectivement $S_{0<}$) la partie de l'action libre correspondant aux modes de $k_>$ (respectivement $k_<$).

Dans ces conditions, l'intégration de l'exponentielle de l'action sur les modes de $k_>$ (que nous appellerons *modes rapides*) donne au premier ordre en J :

$$e^{S_{0<}} \int [d\bar{\psi}_{k_>} d\psi_{k_>}] \left(e^{S_{0>}} - J \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{S_{0>}} \int_0^\beta d\tau \bar{\psi}(\vec{k}, \tau) \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi(\vec{k}', \tau) \cdot \vec{S} \right) \quad (5.4)$$

La somme sur $\vec{k}$ et $\vec{k}'$ se décompose en quatre sommes :

- 1) : Une somme pour $\vec{k}$ et $\vec{k}'$ dans $k_>$. Après intégration sur les modes rapides, cette somme donne une constante.
- 2) et 3) : Une somme pour $\vec{k}$ (respectivement $\vec{k}'$) dans $k_>$ et $\vec{k}'$ (respectivement $\vec{k}$) dans $k_<$. L'intégrale sur les modes rapides d'une telle somme donne 0 car elle se décompose en une somme d'intégrales grassmanniennes de monômes dans lesquels apparaissent un nombre différent de facteurs $\psi_{k_>\sigma}$ et $\bar{\psi}_{k_>\sigma}$ (où l'indice σ représente le spin).
- 4) : Une somme pour $\vec{k}$ et $\vec{k}'$ dans $k_<$.

Ainsi, au premier ordre en J , l'intégration de l'exponentielle de l'action sur les modes rapides vaut :

$$C_{ste} e^{S_{0<} - J \sum_{\vec{k}, \vec{k}' \in k_<} \int_0^\beta d\tau \bar{\psi}(\vec{k}, \tau) \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi(\vec{k}', \tau) \cdot \vec{S}} \quad (5.5)$$

Ainsi, au premier ordre en J , l'action est invariante lorsque l'on passe de l'échelle d'énergie D_0 à l'échelle d'énergie Λ .

Au deuxième ordre en J , il apparaît le terme suivant dans l'intégrale sur les modes rapides de l'exponentielle de l'action :

$$\frac{1}{2} e^{S_{0<}} \int [d\bar{\psi}_{k_>} d\psi_{k_>}] e^{S_{0>}} J^2 \times$$

$$\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1} \sum_{\vec{k}_2, \vec{k}'_2} \left(\bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi(\vec{k}'_1, \tau_1) \cdot \vec{S}(\tau_1) \right) \left(\bar{\psi}(\vec{k}_2, \tau_2) \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi(\vec{k}'_2, \tau_2) \cdot \vec{S}(\tau_2) \right) \quad (5.6)$$

Ceci se réécrit (dorénavant, nous adopterons la convention de sommation d'Einstein pour les indices de spin) :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} e^{S_0 <} \int [d\bar{\psi}_{k>} d\psi_{k>}] J^2 \times \\ & \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T (S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}'_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_2} e^{S_0 >} \left(\bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\sigma^a}{2} \psi(\vec{k}'_1, \tau_1) \right) \times \\ & \left(\bar{\psi}(\vec{k}_2, \tau_2) \frac{\sigma^b}{2} \psi(\vec{k}'_2, \tau_2) \right) \end{aligned} \quad (5.7)$$

La somme sur $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2$ se décompose en seize sommes :

1) : Une somme pour $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2$ dans $k_>$. Après intégration sur les modes rapides, cette somme donne une constante.

2), 3), 4) et 5) : Des sommes pour trois des quatre vecteurs $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2$ appartenant à $k_>$. L'intégrale d'une telle somme sur les modes rapides est nulle car elle se décompose en une somme d'intégrales grassmanniennes de monômes dans lesquels apparaissent un nombre différent de facteurs $\bar{\psi}_{k>\sigma}$ et $\psi_{k>\sigma}$.

6), 7), 8) et 9) : Des sommes pour trois des quatre vecteurs $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2$ appartenant à $k_<$. L'intégrale d'une telle somme sur les modes rapides s'annule pour la même raison que dans le cas précédent.

10) et 11) : Une somme pour $\vec{k}_1, \vec{k}_2$ (respectivement $\vec{k}'_1, \vec{k}'_2$) dans $k_>$. Pour la même raison que précédemment, l'intégrale d'une telle somme sur les modes rapides est nulle.

12) : Une somme pour $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2$ dans $k_<$. Cette somme est simplement la contribution d'ordre deux à l'action $S_<$ non renormalisée (c'est-à-dire dans laquelle figure la constante de couplage J).

13), 14) : Une somme pour $\vec{k}_1, \vec{k}'_1$ (respectivement $\vec{k}_2, \vec{k}'_2$) dans $k_>$. Ceci est une somme de valeurs moyennes de la forme $\langle \bar{\psi}(\vec{k}, \tau) \sigma^a \psi(\vec{k}', \tau') \rangle$, qui sont nulles à cause de la symétrie spin up/spin down.

15), 16) : Enfin, on a une somme pour $\vec{k}_1$ et $\vec{k}'_2$ (respectivement $\vec{k}_2$ et $\vec{k}'_1$) dans $k_>$. Cette somme, notée T_{12} (respectivement T_{21}) ne s'annule pas et nous allons maintenant la calculer.

On a :

$$\begin{aligned} T_{12} &= \frac{1}{2} e^{S_0 <} \int [d\bar{\psi}_{k>} d\psi_{k>}] J^2 \times \\ & \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T (S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}'_2 \in k_< \\ \vec{k}_2, \vec{k}'_1 \in k_>}} e^{S_0 >} \left(\bar{\psi}_s(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\sigma_{ss'}^a}{2} \psi_{s'}(\vec{k}'_2, \tau_1) \right) \times \\ & \left(\bar{\psi}_{s''}(\vec{k}_2, \tau_2) \frac{\sigma_{s''s'''}^b}{2} \psi_{s'''}(\vec{k}'_1, \tau_2) \right) \end{aligned} \quad (5.8)$$

Or,

$$\begin{aligned} \int [d\bar{\psi}_{k>} d\psi_{k>}] e^{S_{0>}} \psi_s(\vec{k}_1', \tau_1) \bar{\psi}_{s'}(\vec{k}_2, \tau_2) = < \psi_s(\vec{k}_1', \tau_1) \bar{\psi}_{s'}(\vec{k}_2, \tau_2) > \\ = -\delta_{ss'} \delta_{\vec{k}_1', \vec{k}_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega(\tau_2 - \tau_1)}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}_2}} \end{aligned} \quad (5.9)$$

Donc :

$$\begin{aligned} T_{12} = -\frac{1}{2} e^{S_{0<}} J^2 \times \\ \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T(S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2' \in k_{<}} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\sigma^a \sigma^b}{4} \psi(\vec{k}_2', \tau_2) \times \\ \sum_{\vec{k} \in k_{>}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega(\tau_2 - \tau_1)}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} \end{aligned} \quad (5.10)$$

A présent, nous n'allons garder dans cette expression (et dans celle de T_{21}) que le premier terme du développement de Taylor :

$$\psi(\tau_2) = \psi(\tau_1) + (\tau_2 - \tau_1) \left. \frac{d\psi}{d\tau} \right|_{\tau_1} + \dots \quad (5.11)$$

Cette procédure sera justifiée plus loin.

On a ainsi :

$$\begin{aligned} T_{12} = -\frac{1}{2} e^{S_{0<}} J^2 \times \\ \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T(S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2' \in k_{<}} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\sigma^a \sigma^b}{4} \psi(\vec{k}_2', \tau_1) \times \\ \sum_{\vec{k} \in k_{>}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega(\tau_2 - \tau_1)}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Nous allons maintenant utiliser la formule :

$$T(S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) = \frac{1}{4} \delta^{ab} I + \epsilon(\tau_1 - \tau_2) \frac{i}{2} \epsilon^{abc} S^c \quad (5.13)$$

où $\epsilon(x)$ est la fonction signe et ϵ^{abc} est le tenseur totalement antisymétrique tel que $\epsilon^{123} = 1$. Notons que l'on a $T(S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) = S^a S^b$ si $\tau_1 > \tau_2$ et $T(S^a(\tau_1) S^b(\tau_2)) = S^b S^a$ si $\tau_2 > \tau_1$.

Termes de T_{12} et T_{21} en $\frac{1}{4} \delta^{ab} I$:

Faisant le changement de variable $\tau' = \tau_2 - \tau_1$, on obtient pour le terme en $\frac{1}{4} \delta^{ab} I$ de T_{12} :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} e^{S_{0<}} J^2 \left(\frac{1}{4} I \right) \times \\ \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2' \in k_{<}} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\vec{\sigma}^2}{4} \psi(\vec{k}_2', \tau_1) \times \end{aligned}$$

$$\sum_{\vec{k} \in k_{>}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{i\omega\tau'}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} \quad (5.14)$$

Où l'on a fait l'approximation que les bornes de l'intégrale sur τ' sont moins et plus l'infini.

On a :

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k} \in k_{>}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{i\omega\tau'}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} \\ &= \sum_{\vec{k} \in k_{>}} \frac{1}{-\epsilon_{\vec{k}}} = - \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho(\epsilon)}{\epsilon} d\epsilon - \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho(\epsilon)}{\epsilon} d\epsilon \end{aligned} \quad (5.15)$$

où $\rho(\epsilon)$ est la densité d'état. Si celle-ci est une fonction paire, les deux intégrales se compensent et il n'y a donc pas de terme en $\frac{1}{4}\delta^{ab}I$ dans T_{12} . Sous la même hypothèse, on trouve qu'il n'y a pas non plus de terme en $\frac{1}{4}\delta^{ab}I$ dans T_{21} .

Termes de T_{12} et T_{21} en $\epsilon(\tau_1 - \tau_2)\frac{i}{2}\epsilon^{abc}S^c$:

Nous allons commencer par montrer que le terme en $\epsilon(\tau_1 - \tau_2)\frac{i}{2}\epsilon^{abc}S^c$ de T_{12} est égal au terme en $\epsilon(\tau_1 - \tau_2)\frac{i}{2}\epsilon^{abc}S^c$ de T_{21} . Pour passer de (5.12) à l'expression analogue de T_{21} , il faut faire les deux transformations suivantes :

$$\begin{aligned} \sigma^a \sigma^b &\rightarrow \sigma^b \sigma^a \\ e^{i\omega(\tau_2 - \tau_1)} &\rightarrow e^{i\omega(\tau_1 - \tau_2)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Dans le terme de T_{12} en $\epsilon(\tau_1 - \tau_2)\frac{i}{2}\epsilon^{abc}S^c$, lors de la première transformation, $\epsilon^{abc}\sigma^a\sigma^b$ se transforme en $\epsilon^{abc}\sigma^b\sigma^a = -\epsilon^{abc}\sigma^a\sigma^b$, c'est-à-dire que l'on a un changement de signe.

Dans ce même terme, lors de la deuxième transformation, $\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{i\omega\tau'} \epsilon(\tau')$ se transforme en $\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-i\omega\tau'} \epsilon(\tau')$. Or :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-i\omega\tau'} \epsilon(\tau') = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{i\omega\tau'} \epsilon(-\tau') = - \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{i\omega\tau'} \epsilon(\tau') \quad (5.17)$$

C'est-à-dire que l'on a un deuxième changement de signe. Les deux changements de signes se compensent et on en déduit comme annoncé que le terme en $\epsilon(\tau_1 - \tau_2)\frac{i}{2}\epsilon^{abc}S^c$ de T_{12} est égal au terme en $\epsilon(\tau_1 - \tau_2)\frac{i}{2}\epsilon^{abc}S^c$ de T_{21} .

En conclusion, on a $T_{12} = T_{21}$.

Donc :

$$\begin{aligned} T_{12} + T_{21} &= e^{S_0} J^2 \frac{i}{2} \epsilon^{abc} S^c \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \in k_{<}} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\sigma^a \sigma^b}{4} \psi(\vec{k}_2, \tau_1) \times \\ & \sum_{\vec{k} \in k_{>}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\epsilon(\tau') e^{i\omega\tau'}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} \end{aligned} \quad (5.18)$$

Il nous faut maintenant calculer l'intégrale dans le plan complexe :

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega\tau'}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2i\pi} \frac{e^{i\omega\tau'}}{\omega + i\epsilon_{\vec{k}}} \quad (5.19)$$

L'intégrande a un unique pôle dans le plan complexe qui est $\omega = -i\epsilon_{\vec{k}}$.

Premier cas : $\epsilon_{\vec{k}} > 0$.

1) Si $\tau' > 0$, l'intégrale de $\frac{1}{2i\pi} \frac{e^{i\omega\tau'}}{\omega + i\epsilon_{\vec{k}}}$ sur le demi-cercle $C(R) = \{Re^{i\theta}, 0 \leq \theta \leq \pi\}$ tend vers 0 lorsque R tend vers l'infini. Or, selon le théorème des résidus, l'intégrale de $\frac{1}{2i\pi} \frac{e^{i\omega\tau'}}{\omega + i\epsilon_{\vec{k}}}$ sur le contour $[-R, R]UC(R)$ est nulle. Donc $I=0$.

2) Si $\tau' < 0$, l'intégrale de $\frac{1}{2i\pi} \frac{e^{i\omega\tau'}}{\omega + i\epsilon_{\vec{k}}}$ sur le demi-cercle $C'(R) = \{Re^{i\theta}, -\pi \leq \theta \leq 0\}$ tend vers 0 lorsque R tend vers l'infini. Donc, I est égale à la limite lorsque R tend vers l'infini de l'intégrale de $\frac{1}{2i\pi} \frac{e^{i\omega\tau'}}{\omega + i\epsilon_{\vec{k}}}$ sur le contour $[-R, R]UC'(R)$. Donc, selon le théorème des résidus :

$$I = -2i\pi \frac{1}{2i\pi} e^{i(-i\epsilon_{\vec{k}})\tau'} = -e^{\epsilon_{\vec{k}}\tau'} \quad (5.20)$$

Deuxième cas : $\epsilon_{\vec{k}} < 0$

Par un raisonnement analogue, on trouve :

1) Si $\tau' > 0$,

$$I = e^{\epsilon_{\vec{k}}\tau'} \quad (5.21)$$

2) Si $\tau' < 0$, $I = 0$.

On a alors :

Si $\epsilon_{\vec{k}} > 0$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\epsilon(\tau') e^{i\omega\tau'}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} = \int_{-\infty}^0 d\tau' e^{\epsilon_{\vec{k}}\tau'} = \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}}} = \frac{1}{|\epsilon_{\vec{k}}|} \quad (5.22)$$

Si $\epsilon_{\vec{k}} < 0$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\epsilon(\tau') e^{i\omega\tau'}}{i\omega - \epsilon_{\vec{k}}} = \int_0^{\infty} d\tau' e^{\epsilon_{\vec{k}}\tau'} = -\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}}} = \frac{1}{|\epsilon_{\vec{k}}|} \quad (5.23)$$

Donc :

$$T_{12} + T_{21} = e^{S_0} J^2 \frac{i}{2} \epsilon^{abc} S^c \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \in k_{<}} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\sigma^a \sigma^b}{4} \psi(\vec{k}_2, \tau_1) \times \sum_{\vec{k} \in k_{>}} \frac{1}{|\epsilon_{\vec{k}}|} \quad (5.24)$$

On a :

$$\sum_{\vec{k} \in k_{>}} \frac{1}{|\epsilon_{\vec{k}}|} = \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho(\epsilon)}{|\epsilon|} d\epsilon + \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho(\epsilon)}{|\epsilon|} d\epsilon \quad (5.25)$$

Comme plus haut, utilisons l'hypothèse selon laquelle $\rho(\epsilon)$ est une fonction paire :

$$\sum_{\vec{k} \in k_{>}} \frac{1}{|\epsilon_{\vec{k}}|} = 2 \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \rho(\epsilon) \quad (5.26)$$

Utilisons de plus la relation :

$$\frac{\sigma^a \sigma^b}{4} = \frac{1}{4} \delta^{ab} I + i \epsilon^{abc} \frac{\sigma^c}{4} \quad (5.27)$$

(5.24) se réécrit alors :

$$T_{12} + T_{21} = e^{S_0 <} J^2 \frac{i}{2} \epsilon^{abc} S^c \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2' \in k <} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) i \epsilon^{abd} \frac{\sigma^d}{4} \psi(\vec{k}_2', \tau_1) \times \\ 2 \int_\Lambda^{D_0} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \rho(\epsilon) \quad (5.28)$$

Sachant que $\epsilon^{abc} \epsilon^{abd} = 2 \delta^{cd}$, on trouve donc :

$$T_{12} + T_{21} = -e^{S_0 <} J^2 \vec{S} \cdot \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2' \in k <} \bar{\psi}(\vec{k}_1, \tau_1) \frac{\vec{\sigma}}{2} \psi(\vec{k}_2', \tau_1) \times \\ \int_\Lambda^{D_0} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \rho(\epsilon) \quad (5.29)$$

Ainsi, $T_{12} + T_{21}$ donne la contribution suivante à la constante de couplage renormalisée J' :

$$J^2 \int_\Lambda^{D_0} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \rho(\epsilon) \quad (5.30)$$

On obtient donc finalement le résultat cherché :

$$J' = J + J^2 \int_\Lambda^{D_0} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \rho(\epsilon) \quad (5.31)$$

Dans le cas où la densité d'état est constante, ceci se réécrit :

$$J' = J + J^2 \rho \ln \left(\frac{D_0}{\Lambda} \right) \quad (5.32)$$

Nous allons maintenant écrire l'équation différentielle à laquelle satisfait $\lambda = J\rho$, toujours dans le cas où ρ est constant. Pour cela, nous allons appliquer (5.32) à une transformation *infinitésimale* $\Lambda \rightarrow \Lambda' = \Lambda + d\Lambda$:

$$\lambda(\Lambda') = \lambda(\Lambda) - \lambda(\Lambda)^2 \frac{d\Lambda}{\Lambda} \quad (5.33)$$

On a $-\frac{d\Lambda}{\Lambda} = d \ln \left(\frac{D_0}{\Lambda} \right)$. On obtient donc l'équation différentielle cherchée :

$$\frac{d\lambda}{d \ln \left(\frac{D_0}{\Lambda} \right)} = \lambda^2 \quad (5.34)$$

Cette équation est vérifiée à des termes d'ordre λ^3 près.

Elle s'intègre en :

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{1 - \lambda_0 \ln\left(\frac{D_0}{\Lambda}\right)} \quad (5.35)$$

où $\lambda_0 = \lambda(D_0)$.

Si le couplage est ferromagnétique, i.e. $J < 0$, λ tend vers 0 lorsque Λ tend vers zéro ; on a alors un point fixe de couplage nul. Si au contraire le couplage est antiferromagnétique, i.e. $J > 0$, λ tend vers l'infini pour une valeur finie de Λ . On passe alors en régime de couplage fort ; l'approche perturbative n'est plus valable et l'effet Kondo apparaît.

Pour terminer, nous allons justifier que l'on peut négliger les termes d'ordre supérieur à un dans le développement (5.11). Après intégration sur $\tau' = \tau_2 - \tau_1$, ces termes vont donner des contributions à l'action de la forme :

$$-K_n \int d\vec{r} \int_0^\beta d\tau \bar{\psi}(\vec{r}, \tau) \frac{\vec{\sigma}}{2} \frac{\partial^n \psi(\vec{r}, \tau)}{\partial \tau^n} \cdot \vec{S} \delta^3(\vec{r}) \quad (5.36)$$

On peut réécrire cette action en fonction de champs ψ_L et ψ_R définis sur une demi-droite à l'origine de laquelle se trouve l'impureté Kondo (voir [25]). Dans cette expression apparaît une nouvelle constante de couplage K'_n dont la dimension en unités énergie avec $\hbar = c = 1$ est égale à $-n$. Selon la théorie générale du groupe de renormalisation, au plus bas ordre en les constantes de couplage, K'_n satisfait à l'équation différentielle :

$$\frac{dK'_n}{d \ln\left(\frac{D_0}{\Lambda}\right)} = -nK'_n \quad (5.37)$$

Nous avons vu qu'il y a également une contribution d'ordre J^2 à (5.37) mais on peut la négliger à l'ordre le plus bas en les constantes de couplage.

Ainsi, K'_n décroît exponentiellement dans l'infrarouge, ce qui justifie que les termes de l'action de la forme (5.36) soient négligeables dans l'infrarouge.

5.2 Cas triterminal

5.2.1 Equations du groupe de renormalisation

Dans le cas triterminal, on peut montrer par un raisonnement analogue à celui que nous venons de faire, que les équations du groupe de renormalisation à l'ordre deux s'écrivent :

$$J_{\alpha\beta eff}(\Lambda) = J_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma} J_{\alpha\gamma} J_{\beta\gamma} \left\{ \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho_{\gamma}(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} + \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho_{\gamma}(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} \right\} \quad (5.38)$$

Où D_0 est la largeur bande (plus précisément, D_0 est une énergie telle que les densités d'états $\rho^{\gamma}(\epsilon)$ s'annulent pour $|\epsilon| \geq D_0$). $J_{\alpha\beta eff}(\Lambda)$ représentent les couplages renormalisés à l'échelle d'énergie Λ .

5.2.2 Evaluation de la densité d'état de T_3

Nous allons prendre pour T_3 la modélisation qui en a été faite dans le chapitre 4 : T_3 est un fil de taille finie relié à un terminal T' . *Nous gardons les mêmes notations qu'au chapitre 4.*

Nous cherchons à calculer la densité locale d'état au point $\tilde{a}$, $\rho_3(\epsilon)$.

Pour cela, on considère une onde plane d'énergie ϵ se propageant dans T' vers T_3 . Cette onde plane donne lieu à une onde réfléchie dans T' et une onde transmise dans T_3 . Les fonctions d'onde respectives dans T_3 et dans T' sont données par :

$$\begin{aligned}\psi_3(j) &= -A \sin(k_3 j) \\ \psi_{T'}(j) &= -B \sin(k(l+j)) + C \cos(k(l+j))\end{aligned}\tag{5.39}$$

Les vecteurs d'onde k et k_3 sont déterminés en fonction de l'énergie par :

$$\epsilon = -2t \cos(k) + \mu_3 = -2t \cos(k_3) + e_W + \mu_3\tag{5.40}$$

Les coefficients B et C sont déterminés en projetant l'équation de Schrödinger sur le site l de T_3 et le site 1 de T' . On trouve :

$$\begin{aligned}B &= \frac{At \cos(kl) \sin(k_3(l+1)) - \left(\frac{t'}{t}\right)^2 \cos(k(l+1)) \sin(k_3 l)}{t' \sin(k)} \\ C &= \frac{At - \sin(kl) \sin(k_3(l+1)) + \left(\frac{t'}{t}\right)^2 \sin(k(l+1)) \sin(k_3 l)}{t' \sin(k)}\end{aligned}\tag{5.41}$$

En supposant que le système est contenu dans une grande boîte de taille $L \gg l$, on a la relation de normalisation $B^2 + C^2 = \frac{2}{L}$ et donc :

$$A^2 = \frac{2}{L} \frac{\left(\frac{t'}{t}\right)^2 \sin^2(k)}{\sin^2(k_3(l+1)) - 2 \left(\frac{t'}{t}\right)^2 \cos(k) \sin(k_3 l) \sin(k_3(l+1)) + \left(\frac{t'}{t}\right)^4 \sin^2(k_3 l)}\tag{5.42}$$

La densité d'état de T_3 est alors simplement donnée par $\rho_3(\epsilon) = \rho_{T'}(\epsilon) |\psi_3(1)|^2$ où $\rho_{T'}$ est la densité d'état de T' :

$$\rho_3(\epsilon) = \frac{1}{\pi t} \frac{\left(\frac{t'}{t}\right)^2 \sin^2(k_3) \sin(k)}{\sin^2(k_3(l+1)) - 2 \left(\frac{t'}{t}\right)^2 \cos(k) \sin(k_3 l) \sin(k_3(l+1)) + \left(\frac{t'}{t}\right)^4 \sin^2(k_3 l)}\tag{5.43}$$

La densité d'état (4.31) peut être approximée par une somme de lorentziennes :

$$\pi \rho_3(\epsilon) \simeq \frac{2}{l} \sum_{n=1}^l \sin^2(k_{3n}) \frac{\gamma_n}{(\epsilon - \epsilon_n)^2 + \gamma_n^2}\tag{5.44}$$

Où :

$$\begin{aligned}
k_{3n} &= \frac{\pi n}{l+1} + O\left(\frac{\left(\frac{t'}{t}\right)^2}{l}\right) \\
\epsilon_n &= -2t\cos(k_{3n}) + \mu_3 + e_3 = -2t\cos(k_n) + \mu_3 \\
\gamma_n &= \frac{2t'^2 \sin^2(k_{3n}) \sin(k_n)}{t(l+1)}
\end{aligned} \tag{5.45}$$

Notons que la séparation entre deux niveaux d'énergie successifs est de l'ordre de $\Delta_n \simeq 2\pi t \sin(k_{3n})/l$ pour $t' \ll t$.

5.2.3 Calcul de la température Kondo

Je rappelle qu'on va s'intéresser au cas où pour tout ϵ , $\Gamma_3(\epsilon) \gg \Gamma_L(\epsilon), \Gamma_R(\epsilon)$. Dans ces conditions, les couplages de l'hamiltonien Kondo satisfont aux conditions :

$$J_{33} \gg J_{R3}, J_{L3} \gg J_{LR}, J_{LL}, J_{RR} \tag{5.46}$$

(En fait, pour pouvoir déduire ces inégalités des inégalités sur les Γ_α , il faut une hypothèse supplémentaire ; par exemple que les trois densités d'état ont une valeur moyenne du même ordre.)

Cas où ρ_3 est constant au voisinage du niveau de Fermi

Les inégalités que je viens d'écrire impliquent que la somme qui apparaît dans (5.38) avec $\alpha = L$, $\beta = R$, est dominée par le terme :

$$\rho_3 J_{L3} J_{R3} \ln\left(\frac{D_0}{\Lambda}\right) \tag{5.47}$$

La température Kondo est l'échelle d'énergie à laquelle la constante de couplage nue J_{LR} est égale au terme correctif qui apparaît dans la constante de couplage renormalisée :

$$J_{LR} \sim \rho_3 J_{L3} J_{R3} \ln\left(\frac{D_0}{T_K}\right) \tag{5.48}$$

Utilisons l'expression des constantes de couplage en termes des paramètres qui apparaissent dans l'Hamiltonien d'Anderson :

$$J_{\alpha\beta} = 2t_\alpha t_\beta / \tilde{\epsilon}_d \tag{5.49}$$

On a donc :

$$\ln\left(\frac{T_K}{D_0}\right) = -\frac{\tilde{\epsilon}_d}{2t_3^2 \rho_3} \tag{5.50}$$

Soit :

$$T_K = D_0 \exp\left(\frac{-\pi \tilde{\epsilon}_d}{2\Gamma_3}\right) \tag{5.51}$$

Prise en compte des effets de taille finie dans le calcul de la température Kondo

Rappelons que l'on note T_{K0} la température Kondo en l'absence d'effets de taille finie, c'est-à-dire pour une densité d'état de T_3 égale à la valeur moyenne de $\rho_3(\epsilon)$.

Si T_{K0} est très grand devant l'écart typique entre les niveaux d'énergie de T_3 , la densité d'état de T_3 se moyenne dans les équations du groupe de renormalisation et on a donc $T_K \simeq T_{K0}$.

Dans le cas où au contraire T_{K0} est très petit devant l'écart typique entre les niveaux d'énergie de T_3 , T_K est fortement influencé par les effets de taille finie. C'est ce cas-là que nous allons maintenant considérer.

Supposons pour commencer qu'il existe n tel que $\epsilon_F = \epsilon_n$ (nous serons alors par définition dans le cas à la résonance) et notons $\Delta \equiv \Delta_n$. L'origine des énergies étant choisie au niveau de Fermi, on a alors au voisinage de 0 :

$$\rho_3(\epsilon) = \frac{K}{\epsilon^2 + \gamma^2} \quad (5.52)$$

où K est constante. Donc :

$$\left(\int_{-\Delta}^{-\Lambda} + \int_{\Lambda}^{\Delta} \right) \frac{d\epsilon \rho_3(\epsilon)}{|\epsilon|} \simeq 2K \int_{\Lambda}^{\Delta} \frac{d\epsilon}{\epsilon(\epsilon^2 + \gamma^2)} \quad (5.53)$$

Cette intégrale se calcule en décomposant l'intégrande en éléments simples. On trouve :

$$\left(\int_{-\Delta}^{-\Lambda} + \int_{\Lambda}^{\Delta} \right) \frac{d\epsilon \rho_3(\epsilon)}{|\epsilon|} \simeq 2K \left\{ \frac{1}{\gamma^2} \ln \left(\frac{\Delta}{\Lambda} \right) - \frac{1}{2\gamma^2} \ln \left(\frac{\Delta^2 + \gamma^2}{\Lambda^2 + \gamma^2} \right) \right\} \quad (5.54)$$

Or, les équations du groupe de renormalisation prises entre Δ et Λ s'écrivent :

$$J_{\alpha\beta eff}(\Lambda) = J_{\alpha\beta eff}(\Delta) + \frac{1}{2} \sum_{\gamma} J_{\alpha\gamma eff}(\Delta) J_{\beta\gamma eff}(\Delta) \left(\int_{-\Delta}^{-\Lambda} + \int_{\Lambda}^{\Delta} \right) \frac{d\epsilon \rho^{\gamma}(\epsilon)}{|\epsilon|} \quad (5.55)$$

En supposant que $J_{\alpha\beta eff}(\Delta) \simeq J_{\alpha\beta}$ et en vertu des inégalités (5.46), la température Kondo satisfait donc à :

$$J_{\alpha\beta} \sim J_{\alpha 3} J_{\beta 3} K \left\{ \frac{1}{\gamma^2} \ln \left(\frac{\Delta}{T_K} \right) - \frac{1}{2\gamma^2} \ln \left(\frac{\Delta^2 + \gamma^2}{T_K^2 + \gamma^2} \right) \right\} \quad (5.56)$$

En utilisant les relations entre les t_{α} et les $J_{\alpha\beta}$, on trouve après quelques manipulations algébriques simples :

$$T_K = \frac{\gamma \Delta}{\sqrt{(\Delta^2 + \gamma^2) \exp \left(\frac{\gamma^2 \tilde{\epsilon}_d}{K t_3^2} \right) - \Delta^2}} \quad (5.57)$$

Si $\frac{\gamma^2 \tilde{\epsilon}_d}{K t_3^2} \gg 1$, cela se réécrit :

$$T_K = \gamma \exp \left(-\frac{\gamma^2 \tilde{\epsilon}_d}{2K t_3^2} \right) \quad (5.58)$$

Or, la densité d'état moyennée à l'échelle Δ vaut :

$$\rho_{03} \simeq \frac{\int_{-\frac{\Delta}{2}}^{\frac{\Delta}{2}} \frac{K}{\epsilon^2 + \gamma^2} d\epsilon}{\Delta} \simeq \frac{K\pi}{\gamma\Delta} \quad (5.59)$$

(5.58) se réécrit alors :

$$T_K = \gamma \exp \left(-\frac{\pi^2 \gamma \tilde{\epsilon}_d}{2\Delta < \Gamma_3 >} \right) \quad (5.60)$$

où l'on a posé :

$$< \Gamma_3 > = \pi t_3^2 \rho_{03} \quad (5.61)$$

Supposons maintenant que le niveau de Fermi soit à mi-chemin entre deux pics consécutifs de la densité d'état (cas dit *hors résonance*). Dans ces conditions, au voisinage du niveau de Fermi, $\rho_3(\epsilon)$ peut être approximé par une constante :

$$\rho_3(\epsilon) \simeq \frac{2K}{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2} = \frac{8K}{\Delta^2} \quad (5.62)$$

En reportant cette expression dans les équations du groupe de renormalisation prises entre Δ et Λ , on trouve :

$$J_{\alpha\beta eff}(\Lambda) = J_{\alpha\beta eff}(\Delta) + \frac{1}{2} J_{\alpha 3 eff}(\Delta) J_{\beta 3 eff}(\Delta) \frac{16K}{\Delta^2} \ln \left(\frac{\Delta}{\Lambda} \right) \quad (5.63)$$

En supposant que $J_{\alpha\beta eff}(\Delta) \simeq J_{\alpha\beta}$, la température Kondo est donc déterminée par la relation :

$$J_{\alpha\beta} \sim \frac{1}{2} J_{\alpha 3} J_{\beta 3} \frac{16K}{\Delta^2} \ln \left(\frac{\Delta}{T_K} \right) \quad (5.64)$$

En utilisant les relations entre les t_α et les $J_{\alpha\beta}$, on en déduit après quelques manipulations algébriques :

$$T_K = \Delta \exp \left(\frac{-\pi^2 \tilde{\epsilon}_d \Delta}{16 < \Gamma_3 > \gamma} \right) \quad (5.65)$$

Interprétation physique des expressions donnant la température Kondo à la résonance et hors résonance :

Il est facile de se convaincre que la température Kondo à la résonance vaut $T_K^R = \gamma \exp(-\frac{\tilde{\epsilon}_d}{2t_3^2 \rho_3(0)})$ alors que dans le cas hors résonance, elle vaut $T_K^{NR} = \Delta \exp(-\frac{\tilde{\epsilon}_d}{2t_3^2 \rho_3(0)})$. Ainsi, le facteur exponentiel de la température Kondo est le même que dans le cas d'une densité d'état constante à ceci près que c'est maintenant la densité d'état en 0 qui remplace la densité d'état constante.

On peut alors comprendre les expressions de T_K^R et T_K^{NR} de la manière suivante. A la résonance, tout se passe comme si on avait une densité d'état constante $\rho_3(0)$ avec une

largeur de bande effective γ . De même, hors résonance, tout se passe comme si on avait une densité d'état constante $\rho_3(0)$ avec une largeur de bande effective Δ .

5.3 Bilan

En conclusion, nous avons vu que l'Hamiltonien Kondo peut être renormalisé perturbativement.

Cette propriété, qui permet que l'Hamiltonien garde la même forme lorsque l'on change d'échelle d'énergie, n'est pas valable pour un Hamiltonien quelconque.

Les effets de taille finie de T_3 se manifestent dans sa densité d'état, qui peut être calculée dans le cadre d'un modèle de liaisons fortes en utilisant l'équation de Schrödinger.

On peut définir une échelle d'énergie de transition entre couplage faible et couplage fort : c'est la température Kondo, qui est l'échelle d'énergie à laquelle la correction au couplage nu devient du même ordre que le couplage nu.

En présence d'effets de taille finie dans le réservoir T_3 , cette température Kondo se comporte comme si l'on avait une largeur de bande effective égale à γ dans le cas à la résonance et Δ dans le cas hors résonance.

Chapitre 6

Influence des effets de taille finie sur la conductance

Dans ce dernier long chapitre, nous allons calculer la conductance de notre système triterminal dans trois situations différentes :

- Hautes températures : théorie des perturbations.
- Basses températures : théorie de type liquide de Fermi.
- Températures intermédiaires : théorie des bosons esclaves en champ moyen.

6.1 Etude perturbative du système à haute température

A présent, nous allons nous intéresser au régime de température $T_K \ll T \ll \delta E, U$.

Dans ce régime, le système peut être étudié en considérant l'Hamiltonien Kondo comme une perturbation.

Nous mènerons le calcul de la conductance jusqu'au deuxième ordre et même jusqu'au troisième ordre en annexe.

Puis nous expliciterons la conductance au troisième ordre si l'on approxime la densité d'état de T_3 au voisinage du niveau de Fermi par une constante ou une lorentzienne centrée en 0.

Dans les articles [15] et [16], on a des calculs analogues à ceux de ce chapitre mais pour une autre géométrie (vue au chapitre 2) où un point quantique est inséré entre deux fils de taille finie.

6.1.1 Principe du calcul perturbatif

On se fonde sur l'Hamiltonien Kondo du chapitre 3.

L'opérateur associé à l'intensité sortante du terminal γ s'écrit :

$$I_\gamma = -e \frac{dN_\gamma}{dt} = -e \frac{i}{\hbar} [H, N_\gamma] \quad (6.1)$$

où N_γ est l'opérateur nombre de particules dans le terminal γ :

$$N_\gamma = \sum_{ks} c_{ks\gamma}^\dagger c_{ks\gamma} \quad (6.2)$$

Le calcul du commutateur $[H, N_\gamma]$ mène à l'expression suivante pour l'opérateur intensité :

$$I_\gamma = A_\gamma + A_\gamma^\dagger$$

$$A_\gamma = \frac{ei}{\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{ksk's'} J_{\gamma\alpha} c_{ks\gamma}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{ss'}}{2} \cdot \vec{S}_{ck's'\alpha} \quad (6.3)$$

La valeur moyenne du courant est donnée par :

$$\langle I_\gamma \rangle = \langle 0 | S(-\infty, 0) I_\gamma(0) S(0, -\infty) | 0 \rangle \quad (6.4)$$

où $S(t_2, t_1)$ est l'opérateur d'évolution entre t_1 et t_2 en représentation d'interaction, $I_\gamma(0)$ est l'opérateur intensité au temps $t = 0$ en représentation d'interaction et $|0\rangle$ est l'état fondamental à $t = -\infty$ en représentation d'interaction.

On a :

$$S(0, -\infty) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 H_{int}(t) dt} \quad (6.5)$$

où $H_{int}(t)$ est l'hamiltonien d'interaction en représentation d'interaction.

6.1.2 Calcul perturbatif de la matrice de conductance au deuxième ordre

Au deuxième ordre en $J_{\alpha\beta}$, on a ainsi :

$$\langle I_\gamma \rangle = \langle 0 | I_\gamma(0) | 0 \rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt \langle 0 | [H_{int}(t), I_\gamma(0)] | 0 \rangle \quad (6.6)$$

Le calcul du commutateur donne :

$$[H_{int}(t), I_\gamma(0)] = [H_{int}(t), A] - H.C.$$

$$= \sum_{\alpha\beta\alpha_1} \sum_{\substack{ks \\ k's' \\ k_1s_1 \\ k'_1s'_1}} \frac{ei}{\hbar} \left(\frac{\vec{\sigma}_{ss'}}{2} \cdot \vec{S} \right) J_{\alpha\beta} \left(\frac{\vec{\sigma}_{s_1s'_1}}{2} \cdot \vec{S} \right) J_{\gamma\alpha_1} \times$$

$$[c_{ks\alpha}^\dagger(t)c_{k's'\beta}(t), c_{k_1s_1\gamma}^\dagger(0)c_{k'_1s'_1\alpha_1}(0)] - H.C. \quad (6.7)$$

En prenant la valeur moyenne dans le vide de ce commutateur et en utilisant le théorème de Wick, il vient :

$$\begin{aligned} < 0|[H_{int}(t), I_\gamma(0)]|0 > = \frac{ei}{4\hbar} \sum_{a,b} tr(\sigma^a \sigma^b) < 0|S^a(t)S^b(0)|0 > \times \\ & \sum_{\beta} J_{\gamma\beta} J_{\beta\gamma} \sum_{kk'} \left(G_{ks\beta}^<(-t)G_{k's'\gamma}^>(t) - G_{k's'\gamma}^<(t)G_{ks\beta}^>(-t) \right) - H.C. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Où l'on a défini comme au chapitre 1 les fonctions de Green libres :

$$\begin{aligned} G_{ks\alpha}^<(t) &= i < 0|c_{ks\alpha}^\dagger(0)c_{ks\alpha}(t)|0 > \\ G_{ks\alpha}^>(t) &= -i < 0|c_{ks\alpha}(t)c_{ks\alpha}^\dagger(0)|0 > \end{aligned} \quad (6.9)$$

On utilise les relations :

$$\begin{aligned} tr(\sigma^a \sigma^b) &= tr(\delta^{ab} I) = 2\delta^{ab} \\ < 0|S^a(t)S^b(0)|0 > = \frac{1}{4}\delta^{ab} \end{aligned} \quad (6.10)$$

Et on trouve finalement :

$$\begin{aligned} < 0|[H_{int}(t), I_\gamma(0)]|0 > = \frac{ei}{\hbar} \frac{3}{4} \times \\ & \sum_{\beta} J_{\gamma\beta}^2 \sum_{kk'} Re \left(G_{k\beta}^<(-t)G_{k'\gamma}^>(t) - G_{k'\gamma}^<(t)G_{k\beta}^>(-t) \right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

Ensuite, on reporte cette valeur moyenne dans l'expression du courant au deuxième ordre et on remplace les fonctions de Green par leurs valeurs en fonction des distributions de Fermi-Dirac. Enfin, on fait la substitution :

$$\sum_{k \in \alpha} \dots \rightarrow \int d\epsilon \rho_\alpha(\epsilon) \dots \quad (6.12)$$

Dans ces conditions, on trouve pour la contribution d'ordre deux à l'intensité :

$$< I_\gamma >^{(2)} = \frac{e}{\hbar} \frac{3\pi}{4} \sum_{\beta} J_{\gamma\beta}^2 \int d\epsilon \rho_\beta(\epsilon) \rho_\gamma(\epsilon) (f_\gamma(\epsilon) - f_\beta(\epsilon)) \quad (6.13)$$

Où je rappelle que f_α est la distribution de Fermi-Dirac du terminal α .

Pour de petites différences de potentiel entre les différents terminaux, on peut linéariser la différence des distributions de Fermi-Dirac :

$$f_\gamma(\epsilon) - f_\beta(\epsilon) \simeq \frac{df}{d\epsilon}(\mu_\beta - \mu_\gamma) \quad (6.14)$$

Où f est la distribution de Fermi-Dirac pour un potentiel chimique $\mu_L \simeq \mu_R \simeq \mu_3$.

Sachant de plus que $\mu_\alpha = Cste + eV_\alpha$ où V_α est le potentiel électrostatique du terminal α , on obtient finalement :

$$\langle I_\gamma \rangle^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} \sum_\beta J_{\gamma\beta}^2 \int d\epsilon \rho_\beta(\epsilon) \rho_\gamma(\epsilon) \left(-\frac{dn}{d\epsilon} \right) (V_\gamma - V_\beta) \quad (6.15)$$

On trouve donc l'expression suivante pour la matrice de conductance au deuxième ordre :

$$G_{\gamma\beta}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} J_{\gamma\beta}^2 \int d\epsilon \rho_\beta(\epsilon) \rho_\gamma(\epsilon) \left(-\frac{df}{d\epsilon} \right) \quad (6.16)$$

6.1.3 Matrice de conductance à l'ordre 3

Résultat du calcul

Dans l'annexe E se trouve le calcul perturbatif de la matrice de conductance à l'ordre trois. Je donnerais ici simplement le résultat :

$$G_{\gamma\beta}^{(3)} = \frac{3\pi e^2}{4\hbar} \sum_\alpha J_{\beta\alpha} J_{\alpha\gamma} J_{\gamma\beta} \int d\epsilon \rho_\gamma(\epsilon) \rho_\beta(\epsilon) \left(-\frac{df}{d\epsilon} \right) I^\alpha(\epsilon) \quad (6.17)$$

où l'on a défini :

$$I^\alpha(\epsilon) = \int d\epsilon' v.p. \frac{\rho_\alpha(\epsilon')}{\epsilon' - \epsilon} (1 - 2f(\epsilon')) \quad (6.18)$$

$v.p.$ désignant la valeur principale.

Comparaison avec les résultats obtenus par la méthode du groupe de renormalisation

Je me propose de montrer que moyennant certaines approximations, il y a équivalence entre matrice de conductance à l'ordre trois avec couplages nus et matrice de conductance à l'ordre deux avec couplages renormalisés.

Supposons que $|\epsilon - \mu|$ est de l'ordre ou très inférieur à kT et que le cut-off infrarouge Λ qui apparaît dans l'expression de I_α est très grand devant kT . On a alors :

$$I^{\alpha_2}(\epsilon) = \int d\epsilon' v.p. \frac{\rho_{\alpha_2}(\epsilon')}{\epsilon' - \epsilon} (1 - 2f(\epsilon')) \simeq \left\{ \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho_{\alpha_2}(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} + \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho_{\alpha_2}(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} \right\} \quad (6.19)$$

Où D_0 est la largeur de bande introduite au chapitre 5.

En reportant cette expression dans la conductance à l'ordre trois, on obtient :

$$G_{\gamma\beta}^{(3)} = \frac{3\pi e^2}{4\hbar} \sum_\alpha J_{\beta\alpha} J_{\alpha\gamma} J_{\gamma\beta} \int d\epsilon \rho_\gamma(\epsilon) \rho_\beta(\epsilon) \left(-\frac{df}{d\epsilon} \right) \times$$

$$\left\{ \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho_\alpha(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} + \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho_\alpha(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} \right\} \quad (6.20)$$

Partons maintenant des équations du groupe de renormalisation prises entre D_0 et Λ :

$$J_{\alpha\beta eff}(\Lambda) = J_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma} J_{\alpha\gamma} J_{\beta\gamma} \left\{ \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho_\gamma(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} + \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho_\gamma(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} \right\} \quad (6.21)$$

Et reportons $J_{\alpha\beta eff}(\Lambda)$ dans l'expression de la conductance au deuxième ordre. La contribution d'ordre trois vaut :

$$G_{\gamma\beta}^{(3)'} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} J_{\gamma\beta} \int d\epsilon \rho_\beta(\epsilon) \rho_\gamma(\epsilon) \left(-\frac{df}{d\epsilon} \right) \times \sum_{\alpha} J_{\gamma\alpha} J_{\beta\alpha} \left\{ \int_{-D_0}^{-\Lambda} \frac{\rho_\alpha(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} + \int_{\Lambda}^{D_0} \frac{\rho_\alpha(\epsilon') d\epsilon'}{|\epsilon'|} \right\} \quad (6.22)$$

Ce qui est bien égal à $G_{\gamma\beta}^{(3)}$.

Approximation de la conductance à l'ordre trois lorsque le niveau de Fermi est un maximum ou un minimum de la densité d'état de T_3

Nous allons supposer que $\rho_3(\epsilon)$ est une somme de lorentziennes de largeur γ et espacées de Δ . Quant à $\rho_L(\epsilon)$ et $\rho_R(\epsilon)$, nous les supposons constants.

Enfin, nous allons faire l'hypothèse que $\gamma \ll T \ll \Delta$ (puisque $T \gg T_K$, cela implique que l'on est dans le cas non trivial $T_{K0} \ll \Delta$).

Cas à la résonance Supposons pour commencer que l'on est à la résonance, c'est-à-dire que le potentiel chimique est situé à un maximum de ρ_3 .

La condition $T \ll \Delta$ permet de remplacer ρ_3 dans l'expression de $G_{3\alpha}^{(2)}$ par une unique lorentzienne centrée en 0 et la condition $\gamma \ll T$ permet de remplacer $-\frac{df}{d\epsilon}$ dans cette même expression par sa valeur en 0, c'est-à-dire $\frac{1}{4T}$.

On peut ainsi approximer $\rho_3(\epsilon)$ par

$$\rho_3(\epsilon) = \frac{K}{\epsilon^2 + \gamma^2} \quad (6.23)$$

dans la relation donnant $G_{3\alpha}^{(2)}$:

$$G_{3\alpha}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} J_{3\alpha}^2 \frac{1}{4T} \rho_\alpha \int d\epsilon \frac{K}{\epsilon^2 + \gamma^2} \quad (6.24)$$

($\alpha \neq 3$). Le calcul de l'intégrale aboutit à :

$$G_{3\alpha}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi^2}{16} J_{3\alpha}^2 \frac{1}{T} \rho_\alpha \frac{K}{\gamma} \quad (6.25)$$

Quant à $G_{\alpha\beta}^{(2)}$ où $\alpha \neq 3$ et $\beta \neq 3$, il vaut :

$$G_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} J_{\alpha\beta}^2 \rho_\alpha \rho_\beta \quad (6.26)$$

A présent, nous allons remplacer dans (6.25) et (6.26) les constantes de couplage $J_{\alpha\beta}$ par leur valeur déduite des équations du groupe de renormalisation.

Pour cela, on fait encore l'hypothèse $J_{33} \gg J_{3\alpha} \gg J_{\beta\gamma}$ pour $\alpha, \beta, \gamma \neq 3$ et écrivons l'équation d'évolution de $J_{\alpha\beta}$ entre Δ et T :

$$J_{\alpha\beta}(T) \simeq J_{\alpha\beta}(\Delta) + \frac{1}{2} J_{\alpha 3}(\Delta) J_{3\beta}(\Delta) \left(\int_{-\Delta}^{-T} + \int_T^{\Delta} \right) d\epsilon \frac{\rho_3(\epsilon)}{|\epsilon|} \quad (6.27)$$

Pour alléger l'écriture, j'ai omis l'indice *eff* des couplages effectifs.

En supposant que $J_{\alpha\beta}(\Delta) \simeq J_{\alpha\beta}$, et en faisant pour ρ_3 la même approximation que ci-dessus, il vient donc :

$$\begin{aligned} J_{\alpha\beta}(T) &\simeq J_{\alpha\beta} + J_{\alpha 3} J_{3\beta} K \left(\frac{1}{\gamma^2} \ln \left(\frac{\Delta}{T} \right) - \frac{1}{2\gamma^2} \ln \left(\frac{\Delta^2 + \gamma^2}{T^2 + \gamma^2} \right) \right) \\ &\simeq J_{\alpha\beta} + \frac{J_{\alpha 3} J_{3\beta} K}{2\gamma^2} \ln \left(1 + \frac{\gamma^2}{T^2} \right) \end{aligned} \quad (6.28)$$

Pour obtenir la dernière égalité, on a utilisé $\gamma \ll T \ll \Delta$.

Les constantes de couplage $J_{\alpha\beta}$ satisfont à :

$$J_{\alpha 3} J_{3\beta} = J_{\alpha\beta} J_{33} \quad (6.29)$$

Donc :

$$J_{\alpha\beta}(T) \simeq J_{\alpha\beta} \left(1 + \frac{J_{33} K}{2\gamma^2} \ln \left(1 + \frac{\gamma^2}{T^2} \right) \right) \quad (6.30)$$

Or, la température Kondo est donnée par :

$$\begin{aligned} T_K &= \frac{\gamma \Delta}{\sqrt{(\Delta^2 + \gamma^2) \exp \left(\frac{2}{J_{33} \rho_3(0)} \right) - \Delta^2}} \\ &\simeq \frac{\gamma}{\sqrt{\exp \left(\frac{2}{J_{33} \rho_3(0)} \right) - 1}} \end{aligned} \quad (6.31)$$

Dans la dernière égalité, on a utilisé $\gamma \ll \Delta$. Donc :

$$J_{33} \simeq \frac{2\gamma_K^2}{\ln \left(1 + \frac{\gamma_K^2}{T_K^2} \right)} \quad (6.32)$$

On obtient donc finalement :

$$J_{\alpha\beta}(T) = J_{\alpha\beta}s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) \quad (6.33)$$

Où l'on a posé :

$$s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) = 1 + \frac{\ln\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)}{\ln\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)} \quad (6.34)$$

La conductance revêt la forme suivante ($\alpha \neq 3$) :

$$G_{3\alpha}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi^2}{16} \frac{K}{\gamma} \rho_\alpha J_{3\alpha}^2 \frac{s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2}{T} \quad (6.35)$$

Et pour $\alpha, \beta \neq 3$:

$$G_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} \rho_\alpha \rho_\beta J_{\alpha\beta}^2 s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2 \quad (6.36)$$

Ainsi, la conductance est le produit d'un facteur indépendant de la température par une fonction des deux paramètres $\frac{T}{T_K}$ et $\frac{\gamma}{T_K}$.

On peut alors exprimer le préfacteur apparaissant dans l'expression de la conductance en fonction de grandeurs connues, à l'aide de la formule $J_{\alpha\beta} = J_{33} \frac{t_\alpha t_\beta}{t_3^2}$ et en utilisant (6.32). On obtient les résultats suivant :

$$G_{3\alpha}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi^2}{4} \frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_3(0)} \frac{1}{\ln^2\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)} \frac{\gamma}{T} s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2 \quad (6.37)$$

pour $\alpha \neq 3$. Et :

$$G_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{e^2}{\hbar} 3\pi \frac{\Gamma_\alpha \Gamma_\beta}{\Gamma_3(0)^2} \frac{1}{\ln^2\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)} s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2 \quad (6.38)$$

pour $\alpha, \beta \neq 3$.

On peut réécrire les deux dernières égalités en mettant en facteur la conductance à $T = 0$, $G_{\alpha\beta}^U = \frac{e^2}{\hbar} \frac{8\Gamma_\alpha \Gamma_\beta}{\Gamma_3(0)^2}$:

$$G_{3\alpha}^{(2)} = G_{3\alpha}^U f\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) \quad (6.39)$$

($\alpha \neq 3$)

$$G_{\alpha\beta}^{(2)} = G_{\alpha\beta}^U g\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) \quad (6.40)$$

($\alpha, \beta \neq 3$)

Les fonctions f et g valent :

$$f\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) = \frac{3\pi^3}{16} \frac{1}{\ln^2\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)} \frac{\gamma}{T} s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2$$

$$g\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) = \frac{3\pi^2}{4} \frac{1}{\ln^2\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)} s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2 \quad (6.41)$$

Rappelons que ces équations sont valables si $\gamma \ll T \ll \Delta$ et si $\rho_L(\epsilon)$ et $\rho_R(\epsilon)$ sont des constantes.

Cas T_3 non conducteur :

Dans ce cas, on sait que la conductance du système à deux terminaux L et R est donnée par :

$$G \simeq \frac{G_{L3}^{(2)} G_{R3}^{(2)}}{G_{L3}^{(2)} + G_{R3}^{(2)}} \quad (6.42)$$

On a donc :

$$G = \frac{G_{3L}^U G_{3R}^U}{G_{3R}^U + G_{3L}^U} f\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) = G^U f\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) \quad (6.43)$$

Où l'on a introduit la conductance à $T = 0$, $G^U = \frac{8e^2}{h} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_3(0)(\Gamma_L + \Gamma_R)}$.

Comparaison du cas où ρ_3 est constant avec le cas où ρ_3 est lorentzien :

Dans le cas où ρ_3 est constant, on sait que les constantes de couplage sont données par :

$$J_{\alpha\beta}(T) = \frac{d_{\alpha\beta}}{\ln\left(\frac{T}{T_K}\right)} \quad (6.44)$$

où les $d_{\alpha\beta}$ sont constants.

Par un raisonnement analogue au cas où ρ_3 est lorentzien, on trouve alors :

$$G_{\alpha\beta}^{(2)} = G_{\alpha\beta}^U \frac{\frac{3\pi^2}{16}}{\ln^2\left(\frac{T}{T_K}\right)} \quad (6.45)$$

Cas hors résonance Supposons maintenant que le potentiel chimique est situé à mi-distance entre deux pics de la densité d'état du terminal T_3 . En vertu de la condition $T \ll \Delta$, il existe une énergie Λ très grande devant T mais suffisamment inférieure à $\frac{\Delta}{2}$ pour que $\rho_3(\epsilon)$ puisse être considéré comme une constante ρ_3 dans l'intervalle $-\Lambda \leq \epsilon \leq \Lambda$. Faisons alors l'hypothèse que :

$$J_{\alpha\beta}(\Lambda) \simeq J_{\alpha\beta} \quad (6.46)$$

Dans ces conditions, les équations du groupe de renormalisation donnent :

$$1 \simeq J_{33} \rho_3 \ln\left(\frac{\Lambda}{T_K}\right) \quad (6.47)$$

Et pour $T_K \ll T \leq \Lambda$:

$$J_{\alpha\beta}(T) = \frac{d_{\alpha\beta}}{\ln\left(\frac{T}{T_K}\right)} \quad (6.48)$$

Où les $d_{\alpha\beta}$ sont des constantes.

On a en utilisant les trois dernières équations :

$$d_{\alpha\beta} = J_{\alpha\beta}(\Lambda) \ln \left(\frac{\Lambda}{T_K} \right) \simeq \frac{t_i t_j}{t_3^2} J_{33} \ln \left(\frac{\Lambda}{T_K} \right) \simeq \frac{t_i t_j}{\rho_3 t_3^2} \quad (6.49)$$

En reportant cette expression dans (6.48) puis dans (6.16), on retrouve le résultat (6.45).

Cas T_3 non conducteur :

En utilisant à nouveau la formule (6.42), on trouve :

$$G = G^U \frac{\frac{3\pi^2}{16}}{\ln^2 \left(\frac{T}{T_K} \right)} \quad (6.50)$$

6.1.4 Bilan

Nous avons vu qu'à haute température $T_K \ll T \ll \delta E, U$, la conductance de notre système peut être étudiée par la théorie des perturbations. Nous avons mené le calcul à terme aux deuxième et troisième ordres en les constantes de couplage Kondo, en utilisant le formalisme de Keldysh.

Nous avons vérifié que le calcul au troisième ordre avec des constantes de couplage nues était équivalent au calcul au deuxième ordre avec des constantes de couplage renormalisées.

Enfin, nous avons explicité l'expression de la conductance en approximant la densité d'état de T_3 au voisinage du niveau de Fermi par une lorentzienne ou une constante selon que l'on est à la résonance ou hors résonance. Dans ce dernier cas, on obtient la même conductance qu'en l'absence d'effets de taille finie à ceci près que T_{K0} est maintenant remplacée par la température Kondo hors résonance.

Dans le cas à la résonance et dans la limite $\gamma \ll \Delta$, la conductance est une fonction universelle de $\frac{T}{T_K}$ et $\frac{\gamma}{T_K}$.

Ceci est résumé sur la figure 6.1.

6.2 Comportement de la conductance à température finie très inférieure à T_K

Dans cette section, nous allons voir que l'on peut à partir d'un formalisme de théorie de la diffusion calculer le comportement de la conductance Kondo à des températures très inférieures à T_K . Nous nous intéresserons en particulier à la signature des effets de taille finie.

Je vais commencer par résumer brièvement l'article de Nozières [26] car nous aurons besoin de généraliser cet article pour une densité d'état de T_3 non constante.

Dans cette section, nous choisirons les unités de sorte que $\hbar = V = 1$ où V est le volume du système.

	Résonance	Hors résonance
ordre 2 en les couplages nus	$G_{3\alpha}^{(2n)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi^2}{4} \frac{\Gamma_\alpha}{\Gamma_3(0)} \frac{1}{\ln^2\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)} \frac{\gamma}{T}$ pour $\alpha \neq 3$ $G_{\alpha\beta}^{(2n)} = \frac{e^2}{\hbar} 3\pi \frac{\Gamma_\alpha \Gamma_\beta}{\Gamma_3(0)^2} \frac{1}{\ln^2\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)}$ pour $\alpha, \beta \neq 3$	$G_{\alpha\beta}^{(2n)} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\pi}{4} J_{\alpha\beta}^2 \rho_\alpha \rho_\beta$ avec $\rho_3(0) \leftrightarrow \rho_3$
ordre 2 en les couplages renormalisés	$G_{3\alpha}^{(2)} = G_{3\alpha}^{(2n)} s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2$ pour $\alpha \neq 3$ $G_{\alpha\beta}^{(2)} = G_{3\alpha}^{(2n)} s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right)^2$ pour $\alpha, \beta \neq 3$	$G_{\alpha\beta}^{(2)} = G_{\alpha\beta}^U \frac{\frac{3\pi^2}{16}}{\ln^2\left(\frac{T}{T_K}\right)}$

$$s\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\gamma}{T_K}\right) = 1 + \frac{\ln\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)}{\ln\left(1 + \frac{\gamma^2}{T_K^2}\right)}$$

FIG. 6.1 –résumé des résultats pour $\gamma \ll T \ll \Delta$

6.2.1 Résumé de l'article de Nozières [26]

Nozières s'intéresse à l'effet Kondo dans un métal et ne prend en compte que la diffusion des ondes s , qui restaure l'équilibre angulaire à chaque collision. Il adopte une approche du type théorie des liquides de Fermi et développe le déphasage δ_σ au voisinage du niveau de Fermi. A l'ordre un en l'énergie ϵ et la température T , on a dans le régime Kondo :

$$\delta_\sigma(\epsilon, f) = \frac{\pi}{2} + \alpha\epsilon + \sum_{\epsilon'\sigma'} \phi_{\sigma\sigma'} \delta f_{\sigma'}(\epsilon') \quad (6.51)$$

Dans cette expression, α et les $\phi_{\sigma\sigma'}$ sont des constantes et $\delta f_{\sigma'}(\epsilon')$ est la variation de la fonction de distribution f par rapport à la distribution de Fermi-Dirac f_0 , pour le spin σ' et l'énergie ϵ' .

Définissons ϕ^s et ϕ^a par :

$$\phi_{\sigma,\pm\sigma} = \phi^s \pm \phi^a \quad (6.52)$$

Notons qu'en l'absence de spin et de matériaux ferromagnétiques, le terme du déphasage en δf s'annule.

Nozières admet la relation :

$$\alpha + 2\nu_0\phi^s = 0 \quad (6.53)$$

Où ν_0 est la densité d'état, supposée constante. Cette relation peut s'obtenir en imposant que le déphasage reste invariant quand on ajoute la même quantité à l'énergie et au potentiel chimique (la résonance Kondo est liée au niveau de Fermi).

Nozières admet également la relation :

$$\phi^s + \phi^a = 0 \quad (6.54)$$

Cette relation est due au fait que l'interaction Kondo couple uniquement des électrons de spin opposés.

Pour calculer la conductivité, il nous faut dire un mot de l'équation de Boltzmann. Nous allons écrire cette équation en tenant compte d'une éventuelle dépendance de la fonction de distribution en le vecteur d'onde $\vec{k}$ (alors que dans (6.51), on suppose que f ne dépend que de l'énergie, en d'autres termes que le système est isotrope). L'équation de Boltzmann postule que la dérivée particulière de la fonction de distribution $\frac{df}{dt}(\vec{k})$ est donnée par ([27]) :

$$\frac{df}{dt}(\vec{k}) = -(f(\vec{k}) - f_0(\epsilon))W(\vec{k}) \quad (6.55)$$

Où $W(\vec{k})$ est le taux de relaxation.

Pour calculer la conductivité, supposons que l'on applique un champ électrique uniforme $\vec{E}$ au système ([27]). La dérivée particulière de la fonction de distribution s'écrit alors en régime stationnaire :

$$\frac{df}{dt} = \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = e\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f \quad (6.56)$$

En effet, la force moyenne s'appliquant aux électrons est la force électrique générée par le champ $\vec{E}$.

Or, le vecteur densité de courant s'écrit :

$$\vec{j} = e \langle \vec{v} \rangle = 2e \int f(\vec{k}) \frac{\vec{k}}{m} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \quad (6.57)$$

(le facteur 2 est dû au spin).

En utilisant (6.55) et (6.56), on peut exprimer f au premier ordre en $\vec{E}$ en fonction de f_0 et W . En reportant alors l'expression obtenue pour f dans (6.57), on obtient finalement :

$$\sigma = -\frac{2\nu_0 e^2 v_F^2}{3} \int d\epsilon \frac{df_0/d\epsilon}{W(\epsilon)} \quad (6.58)$$

où v_F est la vitesse de Fermi. On a supposé que le taux de relaxation W ne dépend que de l'énergie.

Pour calculer le taux de relaxation W , on part de l'expression de la matrice S en fonction de la matrice T de diffusion :

$$S_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}(1 - 2i\pi\nu_0 T_{\alpha\alpha}) - 2i\pi T_{\alpha\beta}^{in} \delta(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) \quad (6.59)$$

($T_{\alpha\beta}^{in}$ représente la contribution inélastique à la matrice T .)

En exprimant que la matrice S est unitaire, on obtient :

$$1 - 2i\pi\nu_0 T_{\alpha\alpha} = (1 - 2i\pi\nu_0 U_{\alpha\alpha}^{in})^{1/2} e^{-2i\delta} \quad (6.60)$$

où l'on a défini la matrice de transition inélastique :

$$U_{\alpha\alpha}^{in} = \sum_{\beta} 2\pi |T_{\alpha\beta}^{in}|^2 \delta(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) \quad (6.61)$$

δ est un réel identifié au déphasage en présence de collisions inélastiques (dans le cas particulier où il n'y a pas de collisions inélastiques, on retrouve la définition habituelle du déphasage).

La taux de relaxation total (élastique et inélastique) est alors donné par le théorème optique :

$$W(\epsilon) = -2n_i \text{Im}(T_{\alpha\alpha}) = \frac{2\sin^2(\delta(\epsilon))}{\pi\nu_0} + W^{in}(\epsilon) \cos(2\delta(\epsilon)) \quad (6.62)$$

où l'on a introduit la densité d'impuretés n_i .

Cherchons à calculer le taux de relaxation inélastique $W^{in}(\epsilon)$.

La contribution des collisions inélastiques à la dérivée particulière de la fonction de distribution s'écrit alors :

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{in}(\epsilon) = 2\pi n_i \nu_0^3 (|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \{ (1 - f(\epsilon)) I_1(\epsilon, T) - f(\epsilon) I_2(\epsilon, T) \} \quad (6.63)$$

où l'on a introduit les intégrales :

$$\begin{aligned}
I_1(\epsilon, T) &= \int d\epsilon_1 d\epsilon_2 \frac{e^{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)/T}}{1 + e^{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)/T}} \frac{1}{e^{\epsilon_1/T} + 1} \frac{1}{e^{\epsilon_2/T} + 1} \\
I_2(\epsilon, T) &= \int d\epsilon_1 d\epsilon_2 \frac{1}{1 + e^{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)/T}} \frac{e^{\epsilon_1/T}}{e^{\epsilon_1/T} + 1} \frac{e^{\epsilon_2/T}}{e^{\epsilon_2/T} + 1}
\end{aligned} \tag{6.64}$$

Dans (6.63), $A_{\sigma\sigma'}$ est l'amplitude de diffusion d'un électron d'énergie ϵ et de spin σ vers un état d'énergie ϵ_1 et de spin σ avec création d'une paire électron-trou (dans des états d'énergie et de spin $\epsilon_2\sigma'$ et $\epsilon_3\sigma'$). Nous supposons qu'à l'ordre 2, $A_{\sigma\sigma'}$ ne dépend ni de la température ni des énergies ϵ , ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 .

Donnons la justification de la relation (6.63).

Cette relation exprime que la dérivée particulaire de la fonction de distribution à l'énergie ϵ est due à deux contributions :

-La contribution I^+ des électrons qui partent d'un état d'énergie ϵ_1 et qui *arrivent* dans un état d'énergie ϵ avec création d'un trou d'énergie ϵ_2 et d'un électron d'énergie $\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon$. C'est le terme en $(1 - f(\epsilon))I_1(\epsilon, T)$.

-La contribution I^- des électrons qui *partent* d'un état d'énergie ϵ et qui arrivent dans un état d'énergie ϵ_1 avec création d'un trou d'énergie $\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon$ et d'un électron d'énergie ϵ_2 . C'est le terme en $-f(\epsilon)I_2(\epsilon, T)$; le signe moins de ce terme traduit que les électrons qui partent d'un état d'énergie ϵ contribuent négativement à la dérivée particulaire de la fonction de distribution en ϵ .

On vérifie que dans les termes I^+ et I^- , la création d'un électron d'énergie E est associée à un facteur $1 - f_{(0)}(E)$ qui est la probabilité de partir d'un état vide, alors que la création d'un trou d'énergie E est associée à un facteur $f_{(0)}(E)$ qui est la probabilité de partir d'un état plein.

Enfin, le facteur $(|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2)$ est la probabilité de transition, supposée indépendante des énergies mises en jeu. Le facteur $\frac{1}{2}$ devant $|A_{\uparrow\uparrow}|^2$ est dû au fait qu'à cause de l'indiscernabilité des particules, par exemple dans le terme I^+ , il ne faut compter qu'une seule fois les deux processus suivant :

-processus 1 : $(\epsilon_1, \uparrow) \rightarrow (\epsilon, \uparrow), (\epsilon_2, \uparrow) \rightarrow (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon, \uparrow)$.

-indiscernable du processus 2 : $(\epsilon_1, \uparrow) \rightarrow (\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon, \uparrow), (\epsilon_2, \uparrow) \rightarrow (\epsilon, \uparrow)$.

Une fois que l'on admet la relation (6.63), le taux de relaxation inélastique se déduit à l'aide de l'équation de Boltzmann (6.55) :

$$\begin{aligned}
W^{in}(\epsilon, T) &= \frac{-\frac{df}{dt}_{in}(\epsilon, T)}{f(\epsilon, T) - f_0(\epsilon, T)} \\
&= \frac{-2\pi n_i \nu_0^3}{f(\epsilon, T) - f_0(\epsilon, T)} (|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \{ (1 - f(\epsilon, T))I_1(\epsilon, T) - f(\epsilon, T)I_2(\epsilon, T) \}
\end{aligned} \tag{6.65}$$

Il est aisé de vérifier que :

$$f_0(\epsilon, T)(I_1(\epsilon, T) + I_2(\epsilon, T)) = I_1(\epsilon, T) \tag{6.66}$$

Par conséquent le dénominateur $f - f_0$ se simplifie et l'on obtient une expression du taux de relaxation inélastique qui ne dépend pas de f :

$$W^{in}(\epsilon, T) = 2\pi n_i \nu_0^3 (|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \{I_1(\epsilon, T) + I_2(\epsilon, T)\} \quad (6.67)$$

Le calcul des intégrales I_1 et I_2 donne :

$$W^{in}(\epsilon) = \pi \nu_0^3 n_i (\pi^2 T^2 + \epsilon^2) (|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \quad (6.68)$$

La théorie des liquides de Fermi donne la relation :

$$A_{\sigma\sigma'} = -\frac{\phi_{\sigma\sigma'}}{\pi \nu_0} \quad (6.69)$$

En injectant W dans (6.58) et en utilisant les différentes relations, on trouve finalement pour la conductivité :

$$\frac{\sigma(T)}{\sigma_0} = 1 + \pi^2 T^2 \alpha^2 \quad (6.70)$$

Où σ_0 est une constante.

En comparant ce résultat avec la courbe de conductivité obtenue par d'autres méthodes, on trouve $\alpha \simeq \frac{1}{T_K}$.

Lorsque l'on considère l'effet Kondo non pas dans un métal mais dans un point quantique connecté à deux terminaux, il faut remplacer le $+$ du deuxième membre de (6.70) par un $-$. Ceci est un simple effet de géométrie : lorsque la résonance est dans le canal de conduction, on a une conductance maximum à $T = 0$ alors que dans le cas contraire, on a une conductance minimum à $T = 0$ (ce dernier cas est aussi celui d'un point quantique couplé latéralement à un terminal).

6.2.2 Position du problème et hypothèses

Nous allons chercher à généraliser le raisonnement de Nozières au modèle d'Anderson triterminal présenté au chapitre 3.

Nous ferons les hypothèses suivantes :

- 1) Au voisinage du niveau de Fermi, ρ_L et ρ_R sont constants.
- 2) Au voisinage du niveau de Fermi, ρ_3 peut être approché par une lorentzienne (on prend comme d'habitude l'origine des énergies au niveau de Fermi) :

$$\begin{aligned} \rho_3(\epsilon) &= \frac{K}{\epsilon^2 + \gamma^2} \\ \Gamma_3(\epsilon) &= \frac{K'}{\epsilon^2 + \gamma^2} \end{aligned} \quad (6.71)$$

- 3) $\Gamma_3(\epsilon) \gg \Gamma_L, \Gamma_R$ pour tout ϵ .

On va s'intéresser au cas limite $\frac{\gamma}{T} \gg 1$; c'est le cas où les effets de taille finie sont

petits et où on est donc proche de la situation considérée par Nozières. Le cas $\frac{\gamma}{T} \ll 1$ sera traité dans l'annexe F.

Nous allons considérer les deux cas définis au 3.1.1. La composante LR de la matrice de conductance est donnée dans les cas T_3 conducteur ou non par la formule :

$$G_{LR}^{(1)/(2)} = -\frac{e^2}{\pi} \int d\epsilon \left(-\frac{df_0}{d\epsilon}\right) \Gamma^{(1)/(2)}(\epsilon) \text{Im}(G_{dd}^r)(\epsilon) \quad (6.72)$$

Dans cette expression, (1) (respectivement (2)) désigne le cas T_3 conducteur (respectivement non conducteur).

f_0 est la distribution de Fermi-Dirac, $\Gamma^{(1)}(\epsilon) = \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{\Gamma_L+\Gamma_R+\Gamma_3(\epsilon)} \simeq \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{\Gamma_3(\epsilon)}$, $\Gamma^{(2)}(\epsilon) = \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{\Gamma_L+\Gamma_R}$ et $G_{dd}^r(\epsilon)$ est la fonction de Green retardée du point quantique. Notons que dans le cas T_3 non conducteur, la formule (6.72) n'est autre que la formule de Meir-Wingreen alors que dans le cas T_3 conducteur, c'est la formule (4.3) qui n'est valide que dans le cas sans interaction ou dans le cas où l'on a des fonctions de Green renormalisées ayant la même forme qu'en l'absence d'interaction.

A présent, utilisons la relation entre la fonction de Green du point quantique et la matrice T de diffusion ([27]) :

$$T(\epsilon) = t_3^2 G_{dd}^r(\epsilon) \quad (6.73)$$

En reportant cette relation dans la formule (6.72), on trouve :

$$G_{LR}^{(1)/(2)} = \frac{e^2}{\pi} \int d\epsilon \left(-\frac{df_0}{d\epsilon}\right) \frac{\Gamma^{(1)/(2)}(\epsilon)}{\Gamma_3(\epsilon)} (-\pi\rho_3(\epsilon) \text{Im}(T(\epsilon))) \quad (6.74)$$

6.2.3 Calcul de $\text{Im}(T(\epsilon))$

Calcul du taux de relaxation associé aux collisions inélastiques

Pour calculer $-\pi\rho_3(\epsilon)\text{Im}(T(\epsilon))$, il faut calculer le taux de relaxation associé aux collisions inélastiques. Pour faire ce calcul, nous allons être amené à faire les hypothèses suivantes, qui sont des généralisations des hypothèses adoptées par Nozières :

- 1) $\alpha = 2\rho_3(0)\phi^s$.
- 2) $A_{\sigma\sigma'} = -\frac{\phi_{\sigma\sigma'}}{\pi\rho_3(0)}$. Comme Nozières, nous supposons qu'à l'ordre 2, $A_{\sigma\sigma'}$ ne dépend ni de la température ni des énergies $\epsilon, \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$.
- 3) Enfin, nous supposons que la relation $\phi^s = -\phi^a$ se généralise aussi.

Discussion de la validité des approximations utilisées dans le cas $\gamma \ll T$:

L'hypothèse 1) est basée sur l'exigence que le déphasage reste invariant lorsque l'on ajoute une même quantité à l'énergie et au potentiel chimique. En présence d'effets de taille finie, une telle exigence ne peut plus être imposée car lorsque l'on ajoute une même quantité au potentiel chimique et à l'énergie, la densité d'état varie. Il n'est donc pas du tout évident que l'hypothèse 1) soit encore valable.

L'hypothèse 2) n'est pas non plus évidente en présence d'effets de taille finie car on a alors une nouvelle échelle d'énergie γ et il est plausible (mais pas certain) que les $A_{\sigma\sigma'}$

varient sensiblement à cette échelle. Si c'est le cas, notre calcul est complètement faux car on a besoin du développement du déphasage jusqu'à des énergies très grandes devant γ .

L'hypothèse 3) en revanche semble raisonnable car même en présence d'effets de taille finie, l'interaction Kondo ne couple que des électrons de spin opposé.

En conclusion, la validité des résultats que nous allons dériver dans le régime $\gamma \ll T$ est discutable.

Idées pour surmonter ces difficultés :

L'hypothèse 1) peut être déduite de la théorie de Wilson du groupe de renormalisation. Pour savoir comment se généralise cette hypothèse pour une densité d'état non constante, il paraît donc raisonnable d'utiliser l'approche de Wilson.

Quant à l'hypothèse 2), elle se déduit de l'expression des fonctions de Green issue de la théorie des liquides de Fermi. Cette expression s'obtient en développant la self-énergie au premier ordre au voisinage de l'énergie de Fermi. Pour tenir compte des effets de taille finie, on pourrait développer cette self-énergie à un ordre supérieur.

De même, l'existence de deux échelles d'énergie dans le problème, γ et T_K , incite à développer le déphasage $\delta(\epsilon)$ au moins jusqu'à l'ordre 2.

La limite de cette idée qui consiste à développer à un ordre supérieur pour prendre en compte les effets de taille finie, est qu'il y aura plus de paramètres libres dans l'approche liquide de Fermi et que cette approche perdra donc en prédictivité.

Nous allons maintenant chercher l'expression du taux de relaxation associé aux collisions inélastiques.

Comme le système que l'on considère est unidimensionnel, les grandeurs f et W qui apparaissent dans l'équation de Boltzmann (6.55) ne dépendent que de l'énergie. La contribution des collisions inélastiques à la dérivée particulière de la fonction de distribution s'écrit alors :

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_{in}(\epsilon) = 2\pi\rho_3(0)^3(|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \{ (1 - f(\epsilon))I_1(\epsilon, T) - f(\epsilon)I_2(\epsilon, T) \} \quad (6.75)$$

où les intégrales I_1 et I_2 s'écrivent maintenant :

$$\begin{aligned} I_1(\epsilon, T) &= \int d\epsilon_1 d\epsilon_2 \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{\epsilon_1}{\gamma}\right)^2\right) \left(1 + \left(\frac{\epsilon_2}{\gamma}\right)^2\right) \left(1 + \left(\frac{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)}{\gamma}\right)^2\right)} \times \\ &\quad \times \frac{e^{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)/T}}{1 + e^{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)/T}} \frac{1}{e^{\epsilon_1/T} + 1} \frac{1}{e^{\epsilon_2/T} + 1} \\ I_2(\epsilon, T) &= \int d\epsilon_1 d\epsilon_2 \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{\epsilon_1}{\gamma}\right)^2\right) \left(1 + \left(\frac{\epsilon_2}{\gamma}\right)^2\right) \left(1 + \left(\frac{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)}{\gamma}\right)^2\right)} \times \\ &\quad \times \frac{1}{1 + e^{(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon)/T}} \frac{e^{\epsilon_1/T}}{e^{\epsilon_1/T} + 1} \frac{e^{\epsilon_2/T}}{e^{\epsilon_2/T} + 1} \end{aligned} \quad (6.76)$$

La relation (6.75) se démontre de la même manière que dans le cas d'une densité d'état constante, à ceci près que la densité d'état lorentzienne apparaît maintenant dans les

intégrales I_1 et I_2 .

Comme dans le cas d'une densité d'état constante, on a la relation :

$$f_0(\epsilon, T)(I_1(\epsilon, T) + I_2(\epsilon, T)) = I_1(\epsilon, T) \quad (6.77)$$

Et on obtient donc :

$$W^{in}(\epsilon, T) = 2\pi\rho_3(0)^3(|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \{I_1(\epsilon, T) + I_2(\epsilon, T)\} \quad (6.78)$$

Puisque l'on s'intéresse au cas $\frac{\gamma}{T} \gg 1$, on peut développer $W^{in}(\epsilon, T)$ à l'ordre deux en ϵ et T :

$$W^{in}(\epsilon, T) = A\epsilon^2 + BT^2 + C\epsilon T + D\epsilon + ET + \text{ordre } 3 \quad (6.79)$$

(on voit aisément qu'il n'y a pas de terme constant dans ce développement). Il est facile de voir que lors des transformations $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ et $T \rightarrow -T$, les intégrales I_1 et I_2 sont échangées. Par conséquent, lors de ces transformations, $W^{in}(\epsilon, T)$ reste invariant. Donc, $C = D = E = 0$.

Pour calculer A , posons $T = 0$. On a alors :

$$\rho_3(0)^3 I_1(\epsilon, 0) = \theta(-\epsilon) \int_{\epsilon}^0 d\epsilon_1 \int_{\epsilon-\epsilon_1}^0 d\epsilon_2 \frac{K^3}{(\epsilon_1^2 + \gamma^2)(\epsilon_2^2 + \gamma^2)((\epsilon - \epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + \gamma^2)} \quad (6.80)$$

A l'ordre deux en ϵ , on obtient :

$$\rho_3(0)^3 I_1(\epsilon, 0) = \theta(-\epsilon) \frac{K^3}{\gamma^6} \int_{\epsilon}^0 d\epsilon_1 \int_{\epsilon-\epsilon_1}^0 d\epsilon_2 1 = \theta(-\epsilon) \frac{K^3}{\gamma^6} \frac{\epsilon^2}{2} \quad (6.81)$$

Et on obtient une expression similaire pour $I_2(\epsilon, 0)$. Finalement :

$$A = \pi\rho_3(0)^3(|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \quad (6.82)$$

Pour calculer B , on pose $\epsilon = 0$. Dans les intégrales I_1 et I_2 , faisons le changement de variable $y_1 = \frac{\epsilon_1}{T}$, $y_2 = \frac{\epsilon_2}{T}$. On trouve alors que I_1 et I_2 valent T^2 multiplié par des intégrales qui à l'ordre zéro en T ne dépendent pas de γ . Par conséquent, à l'ordre deux en T , $W^{in}(0, T)$ et B sont les mêmes que dans le cas d'une densité d'état constante.

En conclusion, à l'ordre deux en ϵ, T et pour $\gamma \gg T$, on trouve pour $W^{in}(\epsilon, T)$ la même valeur que dans le cas d'une densité d'état constante :

$$W^{in}(\epsilon, T) = \pi\rho_3(0)^3(\pi^2 T^2 + \epsilon^2)(|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \quad (6.83)$$

Interprétation physique du terme en T^2 dans $W^{in}(\epsilon, T)$:

La collision inélastique est un processus s'accompagnant de la création d'une paire électron-trou. L'énergie de l'électron de cette paire est susceptible de varier dans un intervalle de largeur T . De même, la différence d'énergie entre l'électron et le trou est susceptible de varier dans un intervalle de largeur T . Donc, on doit avoir une dépendance en température du taux de transition inélastique qui est en T^2 .

Fin du calcul de $Im(T(\epsilon))$

Selon (6.60), la matrice T est donnée en fonction de W^{in} et du déphasage δ par la relation :

$$-\pi\rho_3(\epsilon)Im(T(\epsilon)) = \pi\rho_3(\epsilon)\frac{W(\epsilon, T)}{2} = \sin^2(\delta(\epsilon)) + \frac{\pi\rho_3(\epsilon)}{2}W^{in}(\epsilon, T)\cos(2\delta(\epsilon)) \quad (6.84)$$

En développant $\delta(\epsilon)$ à l'ordre un, on obtient finalement :

$$-\pi\rho_3(\epsilon)Im(T(\epsilon)) = 1 - \alpha^2\epsilon^2 + \frac{\pi\rho_3(\epsilon)}{2}W^{in}(\epsilon, T)(-1 + 2\alpha^2\epsilon^2) + o(\epsilon^2) \quad (6.85)$$

Notons maintenant qu'en utilisant les hypothèses du début du 6.2.3, il vient :

$$|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2 = \frac{1}{\pi^2\rho_3(0)^2}(|\phi_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|\phi_{\uparrow\uparrow}|^2) = \frac{1}{\pi^2\rho_3(0)^2}4\phi^2 = \frac{\alpha^2}{\pi^2\rho_3(0)^4} \quad (6.86)$$

On obtient à l'ordre deux en ϵ et T le même résultat que pour $\rho_3(\epsilon)$ constant :

$$-\pi\rho_3(\epsilon)Im(T(\epsilon)) = 1 - \alpha^2(3/2\epsilon^2 + 1/2\pi^2T^2) \quad (6.87)$$

Or, $\alpha \simeq \frac{1}{T_K}$ où T_K est la température Kondo. Donc :

$$-\pi\rho_3(\epsilon)Im(T(\epsilon)) \simeq 1 - \frac{3\epsilon^2 + \pi^2T^2}{2T_K^2} \quad (6.88)$$

6.2.4 Calcul de la conductance

En reportant (6.88) dans (6.74), et en utilisant la formule de Sommerfeld

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_0(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon = \int_{-\infty}^{\mu} g(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6}T^2g'(\mu) + O(T^4) \quad (6.89)$$

(μ étant le potentiel chimique), on trouve à l'ordre deux en T :

$$G_{LR}^{(1)/(2)}(T)/G_{LR}^{(1)/(2)}(0) = 1 + \pi^2T^2\left(\frac{c_{(1)/(2)}}{3\gamma^2} - \frac{1}{T_K^2}\right) \quad (6.90)$$

Où $c_{(1)} = 2$ et $c_{(2)} = 1$.

On constate que si γ est suffisamment petit devant T_K , la conductance est une fonction croissante de la température au voisinage de $T = 0$.

Pour comprendre physiquement ce résultat, il faut anticiper sur la prochaine section : il s'avère que dans le cas à la résonance, la densité locale d'état du point quantique est minimum au niveau de Fermi. De plus, la fonction $\Gamma^{(1)/(2)}(\epsilon)$ est minimum au niveau de Fermi ou constante. Donc, la conductance est de l'ordre de la valeur moyenne sur un intervalle centré en 0 et de largeur T , d'une fonction minimum en 0. A basse température, cette valeur moyenne est une fonction croissante de T .

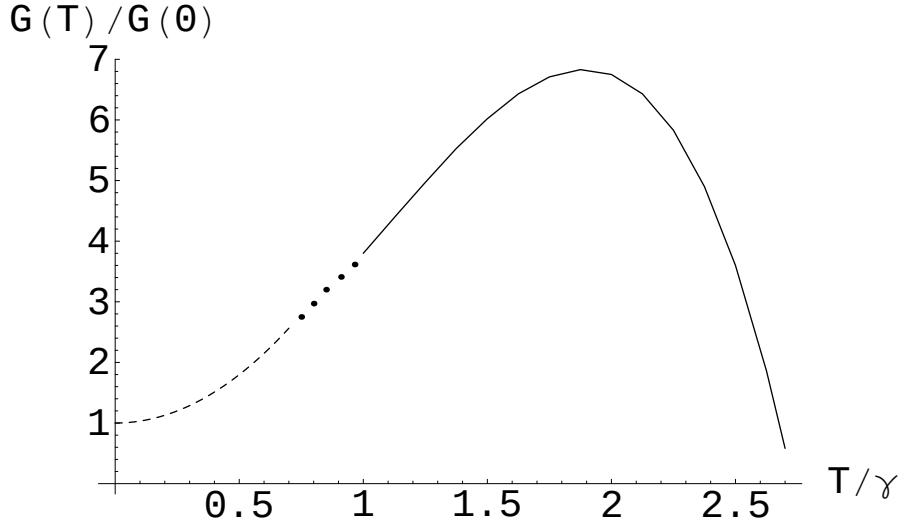


FIG. 6.2 – Conductance normalisée en fonction de $\frac{T}{\gamma}$ dans le cas T_3 non conducteur pour $\frac{\gamma}{T} \ll 1$ (trait plein) et $\frac{\gamma}{T} \gg 1$ (tirets); en pointillés, une interpolation entre les deux régimes. On a pris $T_K = 10\gamma$.

Sur la figure 6.2, on a représenté la conductance normalisée par sa valeur en $T = 0$ en fonction de la température, dans le cas T_3 non conducteur. On a choisi $T_K = 10\gamma$. En trait plein, on a la conductance calculée numériquement dans le cas $\frac{\gamma}{T} \ll 1$ (voir annexe F) et en tirets, on a le développement à l'ordre deux de la conductance valable pour $\frac{\gamma}{T} \gg 1$.

Avec les valeurs de paramètres que nous avons pris, le régime $\frac{\gamma}{T} \ll 1$ n'est pas vraiment atteint, donc la courbe obtenue n'a qu'un sens qualitatif. En revanche, la condition $\frac{T}{T_K} \ll 1$ est à peu près satisfaite.

6.2.5 Bilan

On a calculé la matrice T à basse température en fonction du déphasage et du taux de relaxation inélastique.

Le déphasage est obtenu par un développement limité issu d'une théorie de type liquides de Fermi ([26]).

Le taux de relaxation inélastique quant à lui, est calculé explicitement en présence d'effets de taille finie. Il fait intervenir les amplitudes de diffusion, qui sont évaluées par la théorie des liquides de Fermi ([26]). Nous avons fait l'hypothèse que ces amplitudes de diffusion dépendent peu de l'énergie, ce qui est discutable dans le cas $\gamma \ll T$.

En reportant l'expression obtenue pour la matrice T dans la formule de Meir-Wingreen, on obtient une expression pour la conductance à basse température. On constate que dans le cas où le niveau de Fermi est un maximum de la densité d'état de T_3 (cas à la résonance)

et lorsque γ est suffisamment petit, la conductance à basse température est une fonction croissante de la température, jusqu'à un point au-delà duquel elle décroît. Ce maximum de conductance à température finie est une signature des effets de taille finie. Son existence est lié au fait que dans le cas à la résonance, la densité locale d'état du point quantique admet un minimum au niveau de Fermi (à cause de la scission du pic Kondo par les effets de taille finie qui sera évoquée dans la prochaine section).

6.3 Etude du système pour $T < T_K$

Dans cette section, nous allons utiliser une méthode numérique appelée *théorie des bosons esclaves en champ moyen*, afin de calculer la densité locale d'état du point quantique et la conductance du système lorsque $T < T_K$.

Après avoir exposé le principe de la méthode ([27],[15]), nous donnerons les résultats et nous les commenterons.

6.3.1 Présentation de la méthode des bosons esclaves en champ moyen

Dans la représentation des bosons esclaves, on suppose que l'énergie de répulsion coulombienne U est infinie et on remplace l'Hamiltonien d'Anderson par l'Hamiltonien suivant :

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \sum_{k,\alpha,\sigma} (t_{k\alpha} f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\alpha\sigma} b + t_{k\alpha}^{*} c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} b^{\dagger}) + \sum_{k,\alpha,\sigma} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\alpha\sigma} \quad (6.91)$$

Dans cette expression, $c_{k\alpha\sigma}^{\dagger}$ est un opérateur de création d'un électron de nombre d'onde k et de spin σ dans le terminal α , $f_{\sigma}^{\dagger}$ est un opérateur de création d'un électron de spin σ dans le point quantique et $b^{\dagger}$ est un opérateur bosonique associé en quelque sorte à la création d'un trou dans le point quantique.

Les termes de couplage entre les terminaux et le point quantique, dans l'Hamiltonien que l'on vient d'écrire, décrivent soit l'annihilation d'un trou et la création d'un électron dans le point quantique, avec annihilation d'un électron dans un terminal, soit la création d'un trou et l'annihilation d'un électron dans le point quantique, avec création d'un électron dans un terminal. Dans les deux cas, on constate que conformément à la définition d'un trou, il y a annihilation d'un trou lorsqu'il y a création d'un électron dans le point quantique et réciproquement.

La contrainte $U = \infty$ impose qu'il y ait au plus un électron dans le point quantique ; elle peut donc s'écrire :

$$Q \equiv b^{\dagger} b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} = 1 \quad (6.92)$$

Pour tenir compte de cette contrainte, on peut introduire un nouvel Hamiltonien :

$$H' = H + i\lambda(Q - 1) \quad (6.93)$$

Où λ est un multiplicateur de Lagrange.

L'étape suivante est une approximation de champ moyen. Elle consiste à remplacer b par sa valeur moyenne b_0 .

Ensuite, on écrit l'énergie libre du système :

$$F_{SB} = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \text{Im}(\ln(\tilde{G}_f(\omega^+))) d\omega + (\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_f)(b_0^2 - 1) \quad (6.94)$$

où $\tilde{\epsilon}_f \equiv \epsilon_f + i\lambda$ et :

$$\tilde{G}_f(\omega^+) \equiv \frac{1}{\omega^+ - \tilde{\epsilon}_f - \sum_{k,\alpha} \frac{|t_{k\alpha}|^2}{\omega^+ - \epsilon_{k\alpha}}} \quad (6.95)$$

Dans cette expression, $\omega^+ \equiv \omega + i\eta$, η étant un infiniment petit strictement positif. On a posé de plus $t_{k\alpha} \equiv b_0 t_{k\alpha}$.

On peut réécrire la fonction de Green $\tilde{G}_f$ en séparant les parties réelle et imaginaire du dénominateur :

$$\tilde{G}_f(\omega^+) = \frac{1}{\omega + i\eta - \tilde{\epsilon}_f - b_0^2 A(\omega) + ib_0^2 B(\omega)} \quad (6.96)$$

où l'on a défini :

$$B(\omega) = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha}(\omega)$$

$$A(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} P.P. \int d\epsilon \frac{\Gamma_{\alpha}(\epsilon)}{\omega - \epsilon} \quad (6.97)$$

La dernière étape de la méthode des bosons esclaves en champ moyen consiste à trouver le couple (λ, b_0) qui minimise F_{SB} ; cela étant fait, on connaîtra alors la fonction de Green $\tilde{G}_f(\omega^+)$, ce qui permettra de calculer la densité locale d'état du point quantique et la conductance du système. Notons par ailleurs, que dans la méthode des bosons esclaves en champ moyen, la température Kondo peut être évaluée par $T_K = b_0^2 B(0)$.

Malheureusement, la minimisation de F_{SB} ne peut être faite que numériquement.

Lors de l'application de la méthode des bosons esclaves en champ moyen, les densités d'état des trois terminaux ont été déterminées grâce à un modèle de liaisons fortes, comme cela a été fait dans le chapitre 5.

Une présentation générale de la méthode des bosons esclaves en champ moyen se trouve dans [27] et [52], et son application à l'effet Kondo dans un point quantique se trouve dans [15].

6.3.2 Spectroscopie de la densité locale d'état du point quantique

Présentation des résultats

Sur la figure 6.3. (respectivement 6.4.) a été représenté la densité locale d'état du point quantique lorsque le niveau de Fermi est un minimum (respectivement un maximum) de

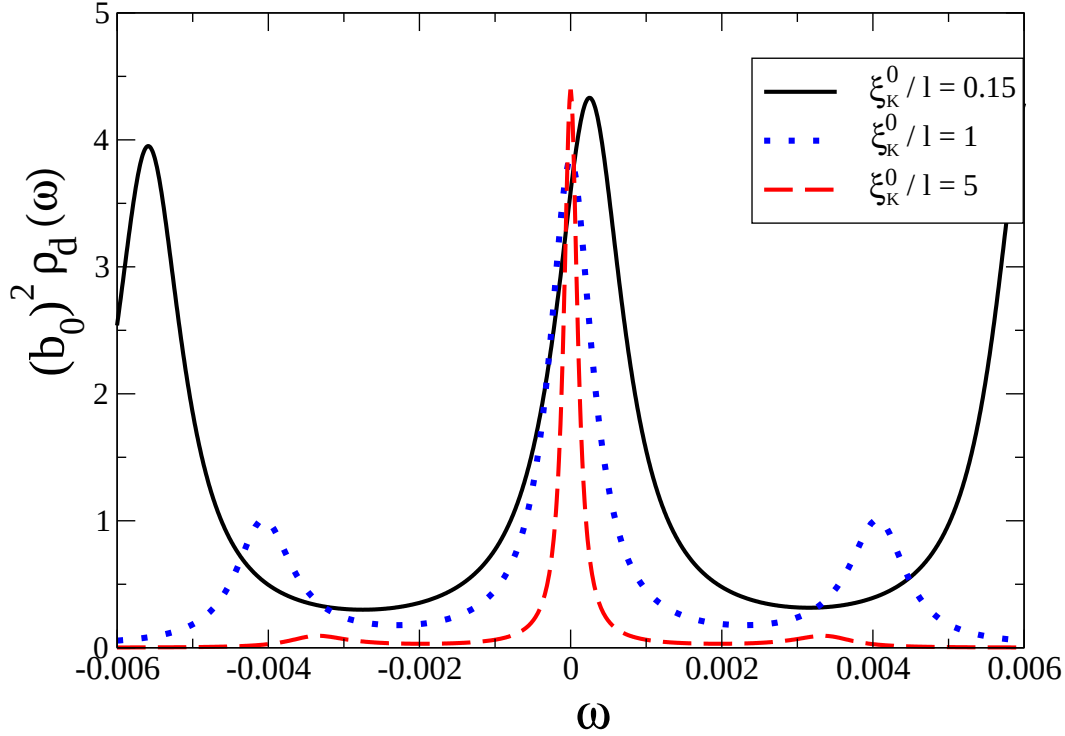


FIG. 6.3 – Densité locale d'état du point quantique lorsque le niveau de Fermi est un minimum de ρ_3 ; $\gamma = 5.10^{-4}$, $\Delta \simeq 6.3.10^{-3}$ (unité $t = 1$).

la densité d'état de T_3 .

On a choisi une fois pour toutes l'unité d'énergie où $t = 1$ et on a pris les valeurs de paramètres suivantes :

$t_3 = 0.5$, $t_L = t_R = 0.1$, $t' = 0.5$, $l = 1000$.

On choisit pour unité de longueur la distance entre deux sites consécutifs dans le modèle de liaisons fortes. Avec ce choix d'unité, l est la longueur de T_3 .

La taille du nuage Kondo pour une densité d'état de T_3 constante $\xi_{K0} \sim \frac{\hbar v_F}{T_{K0}}$ est contrôlée en faisant varier le paramètre ϵ_f .

Notons enfin que pour faciliter la lecture des graphes, on a représenté non pas la densité locale d'état ρ_d mais plutôt $b_0^2 \rho_d$.

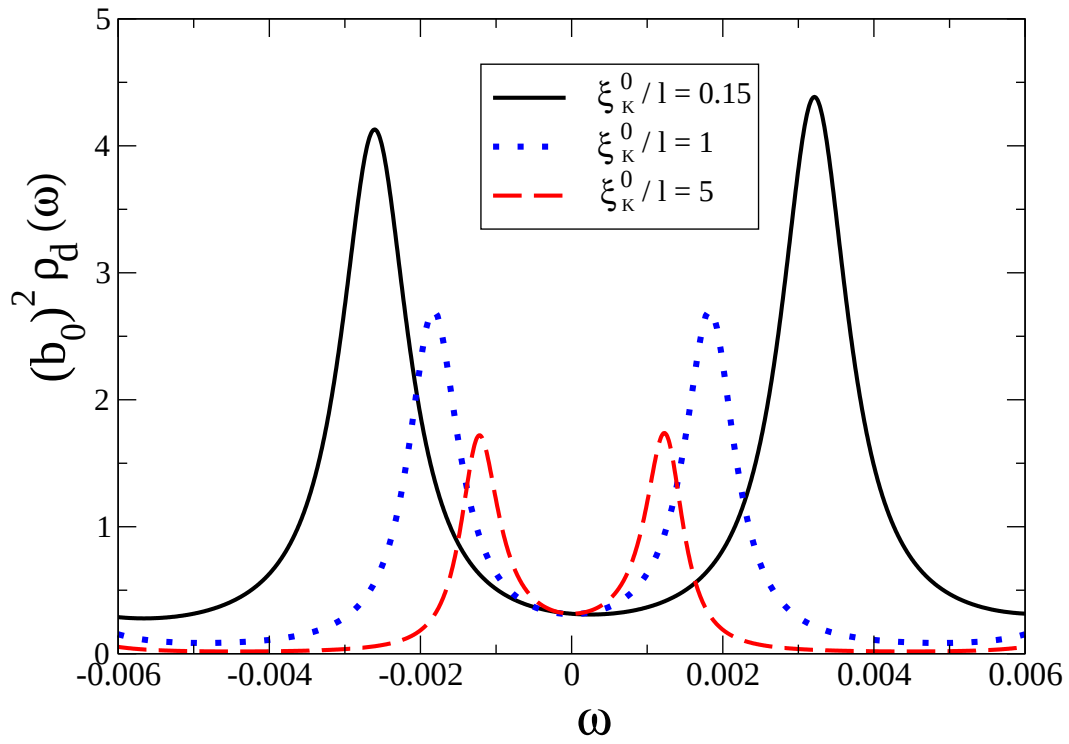


FIG. 6.4 – Densité locale d'état du point quantique lorsque le niveau de Fermi est un maximum de ρ_3 ; $\gamma = 5.10^{-4}$, $\Delta \simeq 6.3.10^{-3}$ (unité $t = 1$).

Explication des résultats

La densité locale d'état du point quantique s'écrit :

$$\rho_d(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{b_0^2 B(\omega)}{(\omega - \tilde{\epsilon}_f - b_0^2 A(\omega))^2 + b_0^4 B(\omega)^2} \quad (6.98)$$

Les calculs numériques montrent que $\tilde{\epsilon}_f$ est proche de 0 et nous le négligerons donc dans ce qui suit.

Par ailleurs, nous ferons l'hypothèse que pour tout ω , $\Gamma_L(\omega), \Gamma_R(\omega) \ll \Gamma_3(\omega)$. Par conséquent, les fonctions A et B sont en tout point peu différentes de leur valeur lorsque $\Gamma_L = \Gamma_R = 0$.

Explication de la position des extremums de la figure 6.3. Fixons tous les paramètres du problème autres que t_3 et faisons varier t_3 .

Remarquons que les fonctions A et B sont proportionnelles à t_3^2 et considérons alors les deux cas suivant :

a) t_3 est suffisamment grand pour que $\forall \omega, b_0^4(A(\omega)^2 + B(\omega)^2) \gg b_0^2|\omega A(\omega)|, \omega^2$ (T_{K0} suffisamment grand).

b) t_3 est suffisamment petit pour que $\forall \omega, b_0^4(A(\omega)^2 + B(\omega)^2) \ll b_0^2|\omega A(\omega)|$, excepté dans un voisinage de $\omega = 0$ de largeur petite devant Δ (T_{K0} suffisamment petit).

Cas a) :

Dans ce cas, dans le dénominateur de ρ_d , on peut ne garder que les termes quadratiques en A et B . Donc, le dénominateur de ρ_d s'écrit :

$$(\omega - \tilde{\epsilon}_F - b_0^2 A(\omega))^2 + b_0^4 B(\omega)^2 \simeq b_0^4 (A(\omega)^2 + B(\omega)^2) \quad (6.99)$$

A un minimum de B , i.e. $B = B_{min}$, on a $A = 0$ donc ρ_d vaut $\frac{1}{\pi b_0^2 B_{min}}$. Or, on a pour tout ω , $\pi \rho_d(\omega) \simeq \frac{B(\omega)}{b_0^2 (A(\omega)^2 + B(\omega)^2)} \leq \frac{1}{b_0^2 B(\omega)} \leq \frac{1}{b_0^2 B_{min}}$. On en déduit que les minimums de B sont des maximums de ρ_d .

Au voisinage de l'un des maximums de B , soit ω_0 , on peut approximer B par la somme d'une lorentzienne et d'une constante ; la constante est là pour modéliser l'influence des autres pics. Un calcul explicite montre alors que ρ_d est minimum en ω_0 .

En conclusion, ρ_d est maximum là où B est minimum et vice-versa.

Cas b) :

Dans ce cas, on peut négliger les termes quadratiques en A et B et le dénominateur de ρ_d s'écrit donc :

$$(\omega - \tilde{\epsilon}_F - b_0^2 A(\omega))^2 + b_0^4 B(\omega)^2 \simeq \omega^2 - 2\omega b_0^2 A(\omega) \quad (6.100)$$

Au voisinage d'un pic de la densité d'état de T_3 , ce dénominateur s'approche de 0 et on a donc un pic de ρ_d . Ainsi, dans le cas b), on observe des pics de ρ_d près des maximums de B . En plus de ces pics, on a un pic de ρ_d à l'énergie de Fermi car l'expression approximée que l'on a écrite pour le dénominateur de ρ_d s'annule alors.

Etude de la scission du pic Kondo sur la figure 6.4. Supposons que l'énergie de Fermi est un maximum de la densité d'état de T_3 (cas à la résonance).

Nous allons approximer la densité d'état de T_3 par une unique lorentzienne centrée en l'énergie de Fermi :

$$\Gamma_3(\epsilon) = \frac{K'}{\epsilon^2 + \gamma^2} \quad (6.101)$$

Une intégration relativement élémentaire permet d'obtenir la fonction A :

$$A(\omega) = \frac{K'\omega}{\gamma} \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \quad (6.102)$$

On a donc l'expression suivante pour ρ_d au voisinage de l'énergie de Fermi :

$$\rho_d(\omega) \simeq \frac{\frac{1}{\pi} \frac{b_0^2 K'}{\omega^2 + \gamma^2}}{\left(\omega - b_0^2 \frac{K'\omega}{\gamma} \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2}\right)^2 + \frac{b_0^4 K'^2}{(\omega^2 + \gamma^2)^2}} \quad (6.103)$$

En annulant la dérivée de cette expression, on obtient une équation d'ordre six :

$$2(\omega(\omega^2 + \gamma^2) - b_0^2 \frac{K'\omega}{\gamma})^2 + 2(\omega^2 + \gamma^2 - r^2 \frac{K'}{\gamma})((\omega^2 + \gamma^2)^2 - \frac{b_0^2 K'}{\gamma}(\gamma^2 - \omega^2) - 2b_0^4 K'^2) = 0 \quad (6.104)$$

Faisons maintenant l'hypothèse $b_0^2 \frac{K'}{\gamma} (\simeq \gamma T_K) \sim \omega^2 \gg \gamma^2$. En ne gardant que les termes dominants de l'équation précédente, on trouve une équation ayant pour solution :

$$\omega = 0 \text{ ou } \omega = \pm \sqrt{b_0^2 \frac{K'}{\gamma}} \equiv \pm \omega_{pic} \quad (6.105)$$

On peut exprimer ω_{pic} en fonction de $b_0^2 \Gamma_3(0) \simeq T_K$:

$$\omega_{pic} = \sqrt{b_0^2 \gamma T_K} \simeq \sqrt{\gamma T_K} \quad (6.106)$$

Ces équations montrent qu'il y a une scission de la densité locale d'état du point quantique, l'espacement entre les deux pics étant donné par $2\omega_{pic}$.

En faisant un développement limité à l'ordre deux de ρ_d au voisinage de ω_{pic} et en ne gardant que les termes dominants, on trouve :

$$\rho_d(\omega) \simeq_{\omega \sim \omega_{pic}} \frac{\frac{1}{\pi} b_0^2 K'}{4\omega_{pic}^2 ((\omega - \omega_{pic})^2 + (\frac{\gamma}{2})^2)} \quad (6.107)$$

Ce qui permet d'affirmer que les pics de ρ_d ont une largeur γ .

La scission du pic Kondo se produit lorsque la séparation entre les deux pics devient supérieure à la largeur de ces pics, c'est-à-dire $\gamma \leq \sqrt{\gamma T_K}$ soit $\gamma \leq T_K$.

Dans l'annexe H, nous étudions l'origine physique de cette scission du pic Kondo, qui se traduit par une perte de poids spectral en $\omega = 0$. En résumé, cette scission est un effet déjà présent en l'absence d'interaction et elle peut être interprétée comme la levée de dégénérescence qui survient lorsque l'on couple deux niveaux dégénérés.

Détermination de la largeur de l'enveloppe de ρ_d En négligeant $A(\omega)$, lorsque $B(\omega)$ est égal à sa valeur moyenne, la densité locale d'état du point quantique s'écrit :

$$\rho_d(\omega) \simeq \frac{1}{\pi} \frac{b_0^2 < B >}{\omega^2 + b_0^4 < B >^2} \quad (6.108)$$

Or $b_0^2 < B > = T_K^0$. Donc, l'enveloppe de ρ_d est une lorentzienne de largeur T_K^0 .

Une dernière remarque On constate que lorsque $\xi_{K0}/L = 0.15$, la densité locale d'état du point quantique n'est pas exactement centrée en 0 et donc que l'on n'atteint pas tout à fait la conductance unitaire. Cela est dû au fait que dans ce cas, ϵ_f est trop grand pour que l'on soit totalement dans le régime Kondo.

A propos de la brisure de la symétrie particule-trou par l'approximation des bosons esclaves en champ moyen :

L'approximation des bosons esclaves en champ moyen suppose que $U \rightarrow \infty$ et elle brise donc la symétrie particule-trou. On peut se demander dans quelles conditions cette brisure de symétrie est observable.

Nous avons vu au chapitre 3 que la brisure de la symétrie particule-trou est liée à l'existence d'un potentiel diffusif, dont on va noter $\mathcal{V}$ l'ordre de grandeur. Lorsque l'échelle d'énergie tend vers 0, le couplage Kondo J est renormalisé en couplage fort mais pas $\mathcal{V}$. Cependant, la largeur de bande D joue le rôle d'une borne supérieure pour le couplage J . Ainsi, l'importance de la symétrie particule-trou à basse énergie est déterminée par le rapport $\frac{\mathcal{V}}{D}$: la brisure de cette symétrie ne sera négligeable que si ce rapport est très petit devant 1.

Il a été montré ([68]) que dans un anneau latéralement couplé à un point quantique dans le régime Kondo, la brisure de la symétrie particule-trou engendre un courant permanent à nombre d'électrons dans l'anneau pair qui tend vers une limite finie pour une taille de l'anneau tendant vers l'infini (alors qu'en présence d'une symétrie particule-trou, ce courant tend vers 0).

Pour en revenir à la méthode des bosons esclaves en champ moyen, on peut se demander si la prise en compte des corrections en $\frac{1}{N}$ au champ moyen (où N est la dégénérescence des états du point quantique) ne permettrait pas de diminuer les effets liés à la brisure de la symétrie particule-trou. La solution de ce problème nécessiterait des calculs élaborés (voir par exemple [27]).

6.3.3 Conductance en fonction de la température

On garde les mêmes valeurs de paramètres et les mêmes choix d'unités que dans la section précédente.

Dans cette sous-section, nous nous intéresserons à la conductance à deux terminaux L et R dans le cas T_3 non conducteur. Cette conductance est donnée par la formule de Meir-Wingreen à deux terminaux.

Sur la figure 6.5 est représentée la conductance en fonction de la température dans les 3 cas suivant :

- cas sans interaction $\epsilon_f = U = 0$.
- cas avec interaction et $\frac{\xi_{K0}}{l} = 0.15$.
- cas avec interaction et $\frac{\xi_{K0}}{l} = 5$.

Pour chacun des trois cas, on a représenté la courbe à la résonance (R), c'est-à-dire pour une énergie de Fermi maximum de la densité d'état de T_3 , et la courbe hors résonance (NR), c'est-à-dire pour une énergie de Fermi minimum de la densité d'état de T_3 . On passe de la situation R à la situation NR en faisant varier e_W , le potentiel auquel on porte T_3 .

Tout d'abord, on constate que dans les trois cas, la conductance à la résonance a un comportement non monotone : on retrouve qu'à basse température, G est une fonction croissante de la température, comme on l'on avait prédit dans la section 6.2. Notons que si l'on augmente γ , on peut retrouver une conductance monotone, conformément à la formule (6.90).

L'argument physique que nous avons donné ci-dessus pour expliquer ce comportement de la conductance est que la densité locale d'état du point quantique à la résonance est minimum au niveau de Fermi. Cet argument est tout aussi valable dans le cas sans interaction ; en effet, la fonction de Green retardée du point quantique a la même forme dans le cas sans interaction et dans le cas avec interaction, au facteur de renormalisation b_0 près.

On constate que dans le cas $\frac{\xi_{K0}}{l} = 0.15$, les courbes sont relativement proches du cas sans interaction excepté que :

- La courbe NR est plus basse que dans le cas sans interaction, à basse température. Cela est dû comme dans la section précédente au fait que ϵ_f est trop grand pour que l'on soit exactement dans le régime Kondo.
- La deuxième différence avec le cas sans interaction est qu'à haute température $T \gg T_{K0}$, la conductance est beaucoup plus basse que dans le cas sans interaction.

La température Kondo vaut $T_K \simeq T_{K0} = 0.006/0.15 = 4.10^{-2}$.

Dans le cas $\frac{\xi_{K0}}{l} = 5$, on constate que la courbe NR a une forte décroissance à partir d'une valeur de T de l'ordre de la température Kondo T_K^{NR} ; lorsque T franchit T_K^{NR} , la conductance NR passe rapidement de sa valeur en $T = 0$ calculée au chapitre 4 à une valeur très faible. Dans le cas R , la température Kondo est plus grande $T_K^R > T_K^{NR}$.

On peut évaluer les températures Kondo T_K^R et T_K^{NR} en regardant à partir de quelle température la conductance devient négligeable devant sa valeur en $T = 0$. On trouve $T_K^R \simeq 9.10^{-4}$ et $T_K^{NR} \simeq 4.10^{-4}$.

La figure 6.6 représente la conductance en fonction de e_W pour une température fixée $T = 2.10^{-3}$, et des valeurs de $\frac{\xi_{K0}}{l}$ variant de 0.25 à 5. Les autres paramètres ont la même valeur que ci-dessus excepté que l'on prend maintenant $l = 200$. Pour $\frac{\xi_{K0}}{l} = 0.25$, la conductance est maximum hors résonance et minimum à la résonance. Cela est lié à la

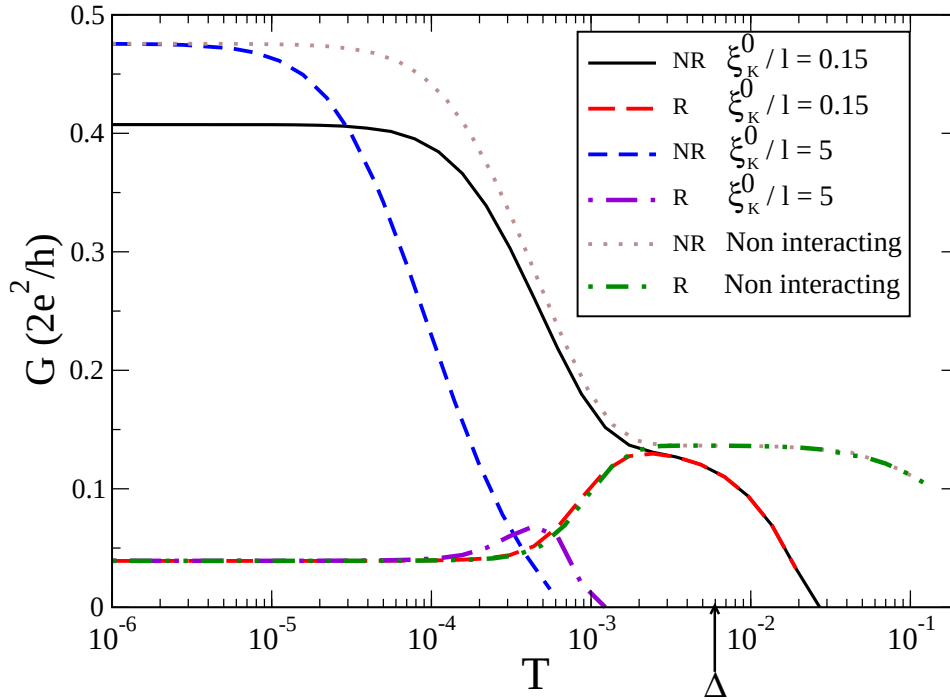


FIG. 6.5 – Conductance en fonction de la température ; les énergies sont données en unité $t = 1$. On a $\gamma = 5.10^{-4}$ et $\Delta \simeq 0.006$.

valeur de la conductance à température nulle qui est plus forte hors résonance (voir chapitre 4). Pour $\frac{\xi_{K0}}{l} = 5$, on constate au contraire une forte suppression de la conductance hors résonance, qui devient nettement plus faible que la conductance à la résonance. Cela, qui est une signature des effets de taille finie, est lié au fait que l'on passe dans un régime où $T_K^{NR} < T < T_K^R$.

6.3.4 Bilan

La méthode des bosons esclaves en champ moyen permet de connaître la densité locale d'état du point quantique et la conductance du système à basse température $T \leq T_K$.

Dans le régime $T_{K0} \gg \Delta$, les effets de taille finie sont peu importants. La densité locale d'état du point quantique ρ_d est alors en anti-résonance avec ρ_3 . De plus, ρ_d a une enveloppe de largeur T_{K0} .

Dans le régime $T_{K0} \ll \Delta$ maintenant, seuls subsistent deux ou trois pics de ρ_d . A la résonance, on a essentiellement deux pics symétriques par rapport à l'énergie de Fermi, dont la largeur est γ et la séparation $2\sqrt{\gamma T_K}$. Hors résonance, l'essentiel du poids spectral

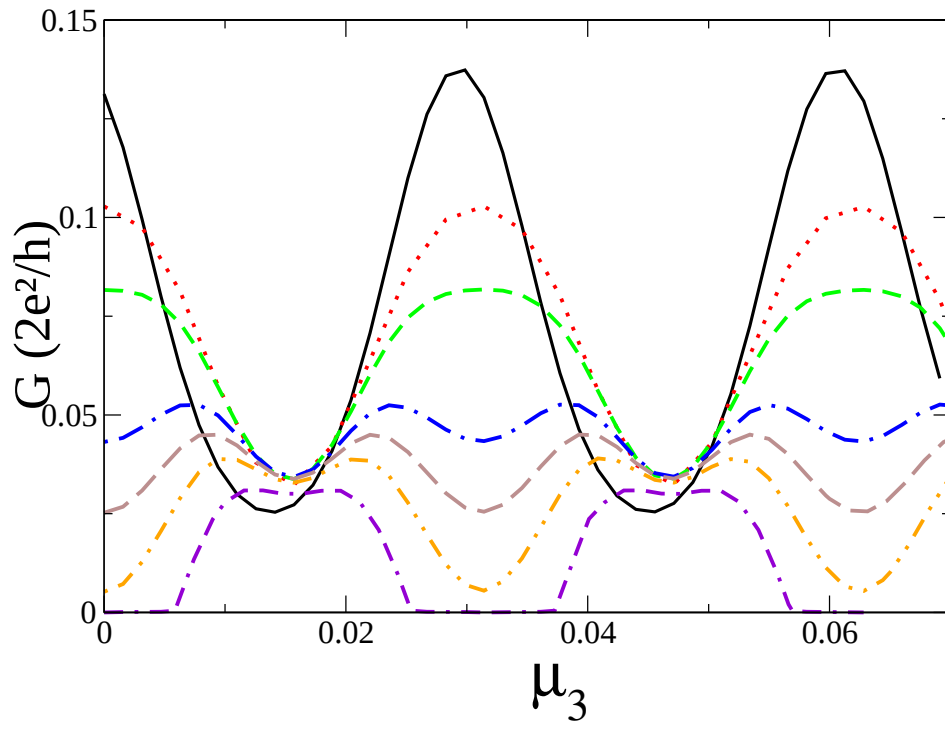


FIG. 6.6 – Conductance en fonction de e_W (en unité $t = 1$) à $T = 2.10^{-3}$. De haut en bas, $\frac{\xi_{K0}}{\Gamma} = 0.25, 0.75, 1.5, 2.5, 3, 3.75, 5$. $\Delta \simeq 3.1 \times 10^{-2}$, $\gamma = 2.5 \times 10^{-3}$

est concentré dans un pic situé à l'énergie de Fermi.

Une signature remarquable des effets de taille finie est que l'on a une conductance beaucoup plus grande à la résonance qu'hors résonance dans le régime où $T_K^{NR} < T < T_K^R$.

6.4 Bilan général

Dans cette thèse, nous avons concentré nos efforts sur le calcul des propriétés de transport de notre système à trois terminaux.

Ainsi, dans ce dernier chapitre, nous avons calculé la conductance du système, qui est matricielle dans le cas T_3 conducteur et scalaire dans le cas T_3 non conducteur.

Pour ce faire, nous avons utilisé des méthodes extrêmement variées. A basse température, on a utilisé la théorie des liquides de Fermi, qui utilise un développement limité du déphasage à basse énergie.

A des températures $T \leq T_K$, on a utilisé la méthode des bosons esclaves en champ moyen, qui utilise une fonction de Green retardée du point quantique de type sans interactions avec toutefois des paramètres renormalisés, calculés numériquement par minimisation de l'énergie libre.

Enfin, pour des températures très grandes devant T_K , on a utilisé la théorie des perturbations.

Les principaux effets de taille finie qui apparaissent dans la conductance sont un comportement non monotone de la conductance Kondo dans le cas à la résonance, une scission du pic Kondo dans ce même cas et une suppression de la conductance hors résonance à température fixée non nulle.

Chapitre 7

Conclusion

7.1 Résumé des résultats

Dans cette thèse, nous avons introduit une géométrie où un point quantique est connecté à deux terminaux ainsi qu'à un troisième réservoir. Nous avons supposé que le couplage à ce troisième réservoir est très grand devant les couplages aux deux premiers terminaux. Le but de cette nouvelle géométrie est de sonder les propriétés du nuage Kondo, qui se développe essentiellement dans le troisième réservoir, à partir des propriétés de transport à travers les deux premiers terminaux.

Après avoir introduit au chapitre 3 le formalisme utilisé dans la thèse, nous avons développé au chapitre 4 la théorie des liquides de Fermi pour calculer la conductance à température nulle. Ce calcul révèle une forte suppression de la matrice de conductance à température nulle lorsque $\Gamma_3(0) \gg \Gamma_L, \Gamma_R$. Explication : dans un tel régime, le nuage Kondo qui permet la conduction se développe essentiellement dans T_3 .

Dans le chapitre 5, nous avons abordé l'analyse de notre géométrie par le groupe de renormalisation perturbatif. Nous avons vu que la température Kondo, principale échelle d'énergie du problème, dépend de la structure fine de ρ_3 si seulement si $T_{K0} \ll \Delta$. Dans ce régime, qui correspond à des effets de taille finie importants, la température Kondo est la même que pour une densité d'état constante $\rho_3(0)$ avec une largeur de bande effective qui vaut γ à la résonance et Δ hors résonance.

Dans le chapitre 6, nous avons abordé le calcul de la conductance en présence d'effets de taille finie.

Tout d'abord, nous nous sommes intéressés au régime perturbatif $T \gg T_K$. Dans ce régime (et pour $\gamma \ll T \ll \Delta$), la matrice de conductance à la résonance est une fonction universelle de deux paramètres $\frac{T}{T_K}$ et $\frac{\gamma}{T_K}$.

Ensuite, nous nous sommes intéressés au comportement de la conductance à température finie très inférieure à T_K . Pour cela, nous avons tenté de généraliser à une densité d'état non constante l'approche de Nozières du problème Kondo par la théorie des liquides de Fermi. Nous avons trouvé que pour γ suffisamment petit, la conductance à la résonance admet un maximum à température finie.

Enfin, nous avons étudié notre système pour des températures $T \leq T_K$, grâce à la

théorie des bosons esclaves en champ moyen. Nous avons mis en évidence une scission du pic Kondo à la résonance, qui s'avère être un effet sans interaction facilement interprétable dans le modèle de système à deux niveaux. Nous avons vérifié aussi que T_K^{NR} peut devenir inférieur à T_K^R , ce qui est une signature des effets de taille finie susceptible d'être vérifiée expérimentalement.

7.2 Perspectives

Les prolongements possibles de cette thèse sont par exemple :

- La prise en compte simultanée d'une énergie de charge non négligeable de T_3 et des effets de taille finie.
- L'étude de l'effet Kondo hors équilibre en présence d'effets de taille finie.
- La mise en oeuvre expérimentale des idées de cette thèse.

7.2.1 Effets d'interaction en présence d'effets de taille finie

Nous avons déjà parlé aux chapitres 2 et 4 de travaux traitant une géométrie multi-terminale en tenant compte de l'énergie de charge de certains des réservoirs ([4],[5],[6]). Cependant, ces travaux ne prennent pas en compte les effets de taille finie.

Bien que le problème de la prise en compte simultanée d'interactions dans les réservoirs et d'effets de taille finie ait été abordé pour une géométrie particulière ([59]), tout reste à faire dans notre géométrie.

D'abord, énonçons des généralités qui ne tiennent pas compte des effets de taille finie. Nous avons vu que la prise en compte d'une énergie de charge de T_3 peut mener à un effet Kondo à deux canaux, car à température suffisamment basse, les processus non diagonaux qui ne conservent pas la charge de T_3 sont éliminés ([4],[5]). On peut comprendre d'une autre façon pourquoi l'ajout d'une énergie de charge peut mener à un effet Kondo à deux canaux : en l'absence d'énergie de charge, le point quantique se couple seulement à un unique canal qui est une combinaison linéaire des champs électroniques des différents terminaux ([14]). Lorsque l'on ajoute une énergie de charge et que l'on écrit l'Hamiltonien dans la base où le point quantique se couple à un seul canal, il apparaît des termes supplémentaires liés à la non linéarité des Hamiltoniens libres des terminaux exprimés en fonction des opérateurs nombre de particule. Ces termes supplémentaires empêchent de se ramener à un problème à un seul canal.

Même en présence d'une énergie de charge, l'obtention d'un véritable effet Kondo à deux canaux est en général difficile car elle suppose l'égalité des couplages associés aux deux canaux.

Nous allons maintenant dégrossir le problème de l'étude des effets de taille finie du système en présence d'une énergie de charge de T_3 , par une analyse basée sur les équations du groupe de renormalisation.

On considère un point quantique relié à deux terminaux L et R et à un grain de taille finie T_3 . Soit Δ l'écart typique entre les niveaux d'énergie du grain. On prend en compte l'énergie de charge du grain E_G . Comme d'habitude, on note U l'énergie coulombienne du point quantique, D_0 la largeur de bande et T_{K0} la température Kondo en l'absence d'effets de taille finie.

Nous allons faire les hypothèses $T_{K0} \ll \Delta \ll E_G \ll U \ll D_0$.

On se ramène aisément à un problème biterminal en remarquant que puisque les densités d'état de L et R sont constantes, le point quantique se couple seulement à une combinaison linéaire l de L et R ([14]). On a donc deux réservoirs effectifs : T_3 et l .

Introduisons les couplages adimensionnés $\lambda_{ij} = \sqrt{\bar{\rho}_i \bar{\rho}_j} J_{ij}$ où $\bar{\rho}_i$ est la densité d'état moyenne de $i \in \{l, 3\}$ et les J_{ij} sont les couplages de l'Hamiltonien Kondo, supposés indépendants de l'énergie.

Regardons le comportement des λ_{ij} lorsque l'on diminue l'énergie.

Pour cela, nous allons appliquer les équations du groupe de renormalisation en trois étapes : $E_G \ll \Lambda \ll U$, $\Delta \ll \Lambda \ll E_G$ et $T_{K0} \ll \Lambda \ll \Delta$.

$E_G \ll \Lambda \ll U$:

On a les équations du groupe de renormalisation à l'ordre deux :

$$\frac{d\lambda_{ij}}{d \ln \Lambda} = - \sum_k \lambda_{ik} \lambda_{kj} \quad (7.1)$$

Il en résulte que si l'on avait initialement $\lambda_{33} \gg \lambda_{ll}$, cette relation va rester vraie.

$\Delta \ll \Lambda \ll E_G$:

Dans ce régime, le couplage λ_{l3} est exponentiellement supprimé car les fluctuations de charge dans T_3 sont interdites. Les équations du groupe de renormalisation au deuxième ordre ne suffisent alors plus. Il faut aller au troisième ordre :

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda_{33}}{d \ln \Lambda} &= -\lambda_{33}^2 + \frac{1}{2} \lambda_{33} (\lambda_{33}^2 + \lambda_{ll}^2) \\ \frac{d\lambda_{ll}}{d \ln \Lambda} &= -\lambda_{ll}^2 + \frac{1}{2} \lambda_{ll} (\lambda_{33}^2 + \lambda_{ll}^2) \end{aligned} \quad (7.2)$$

Sachant que $\lambda_{33}(E_G) \gg \lambda_{ll}(E_G)$, la première équation montre que le couplage λ_{33} augmente lorsque l'on diminue Λ , et la deuxième équation montre que le couplage λ_{ll} augmente moins que λ_{33} , voire diminue, lorsque l'on diminue Λ .

Conclusion : $\lambda_{33}(\Delta) \gg \lambda_{ll}(\Delta)$.

$T_{K0} \ll \Lambda \ll \Delta$:

Commençons par supposer que l'on est dans le cas hors résonance (niveau de Fermi minimum de la densité d'état de T_3).

On peut supposer que la densité d'état de T_3 est négligeable (car on est hors résonance) et le couplage J_{33} reste donc constant. Par contre, le couplage λ_{ll} augmente et va vers un régime de couplage fort :

$$\frac{d\lambda_{ll}}{d \ln \Lambda} = -\lambda_{ll}^2 \quad (7.3)$$

Conclusion : pour $\Lambda \ll \Delta$ hors résonance, on a un effet Kondo où le point quantique est écranté par les électrons de l uniquement.

Dans le cas à la résonance (c'est-à-dire le cas où le niveau de Fermi est un maximum de la densité d'état de T_3), le réservoir T_3 a un spin impair et va donc former un singlet Kondo avec le point quantique. Ainsi, à la résonance, le nuage Kondo se forme dans T_3 et les réservoirs L et R sont spectateurs ([40]).

Ceci étant fait, il restera encore à étudier le cas où l'on a un Δ fini mais $\Delta < T_{K0}$.

En conclusion, on pourra négliger l'effet de l'énergie de charge de T_3 tant que $E_G \ll |\epsilon_d|, \epsilon_d + U$ et $T \gg E_G$ (car sous ces hypothèses, les couplages de la transformation de Schrieffer-Wolff sont peu affectés par E_G). Mais dès que ces hypothèses ne sont plus satisfaites, on doit s'attendre à ce qu'apparaisse une nouvelle physique plus complexe, avec éventuellement un effet Kondo à deux canaux.

7.2.2 Effet Kondo hors équilibre en présence d'effets de taille finie

On peut distinguer deux façons de mettre notre système hors équilibre :

- 1) Toutes les différences de deux potentiels chimiques distincts sont plus grandes que T_K . C'est la situation envisagée par Lebanon et Schiller ([3]) et par Sun et Guo ([2]). Nous avons déjà parlé dans le chapitre 3 de ces travaux où le terminal T_3 est faiblement couplé au point quantique et sert à mesurer l'effet Kondo hors équilibre se développant dans les terminaux L et R fortement couplés.
- 2) Une deuxième façon de sortir de l'équilibre correspond à deux des trois potentiels chimiques ayant une différence très petite devant T_K mais le troisième potentiel chimique est distant des deux premiers d'une valeur supérieure à T_K .

Nous allons voir que cette dernière situation permet sous certaines conditions d'étudier la dynamique de formation et de destruction du nuage Kondo (ces problèmes de dynamique du nuage Kondo ont été brièvement évoqués au chapitre 2 ; cf références [22] et [23]).

L'idée est de mettre le point quantique D dans un régime de transport séquentiel en bloquant les fluctuations réelles de la charge de T_3 . Alors, lorsque le nombre d'électrons de D passe d'une valeur paire à une valeur impaire, il y a formation du nuage Kondo dans T_3 et lorsque ce nombre repasse à une valeur paire, le nuage est détruit. Ainsi, par des mesures de transport à travers L et R , on pourra étudier la formation et la destruction du nuage Kondo.

Pour que l'on ait du transport séquentiel entre L et R , il faut que ϵ_d soit compris entre μ_L et μ_R . Mais pour que l'effet Kondo se développe dans T_3 , on doit avoir $\mu_3 - \epsilon_d \gg \Gamma_3$. Pour satisfaire simultanément à ces deux conditions, il sera en général nécessaire que μ_3 soit plus grand que μ_L et μ_R , contrairement au cas à l'équilibre avec $I_3 = 0$ où μ_3 est compris entre μ_L et μ_R .

Mais si μ_3 devient supérieur à μ_L, μ_R , on peut s'attendre à ce qu'un courant sorte de T_3 . Pour que cela ne soit pas le cas, il faut que T_3 soit couplé capacitivement à un terminal

et il faut ajouter une énergie de charge à T_3 .

On est donc amené naturellement à faire une modélisation du système qui tienne compte de l'énergie de charge. Pour cela, nous allons représenter toutes les jonctions par des condensateurs et calculer classiquement l'énergie électrostatique du système. Cela est fait dans l'annexe C.

Notons (n_D, n_3) l'état de charge où l'on a n_D électrons dans D et n_3 électrons dans T_3 . Dans le plan ayant pour coordonnées les potentiels des grilles de D et T_3 , on trouve que les régions où (n_D, n_3) est constant sont délimitées par des hexagones. En plaçant le point de fonctionnement du système sur un coté approprié de ces hexagones, on satisfait la condition de blocage des fluctuations réelles de la charge de T_3 simultanément avec un transport séquentiel à travers D .

Pour que l'étude dynamique du nuage Kondo puisse être faite, il faut que le temps de formation ou de destruction du nuage Kondo soit très petit devant le temps typique pendant lequel la charge de D reste constante. Supposons que le nombre d'électrons de D fluctue entre N et $N + 1$. Alors si par exemple $\mu_L > \mu_R$, le temps typique pendant lequel n_D reste égal à $N + 1$ est $\frac{h}{\Gamma_R}$ alors que le temps typique pendant lequel n_D reste égal à N est $\frac{h}{\Gamma_L}$. Le temps typique de formation ou de destruction du nuage Kondo peut quant à lui être approximé par $\frac{h}{T_K}$ pour des températures proches de T_K ([22]). Pour que l'étude de la dynamique du nuage Kondo puisse être menée à terme, on arrive donc à la condition $\Gamma_L, \Gamma_R \ll T_K$.

Cette condition est-elle suffisante pour l'étude de la dynamique du nuage Kondo ? *A priori* non car rien ne nous assure qu'il puisse y avoir un effet Kondo (se traduisant par des fluctuations *virtuelles* de la charge de T_3) en présence d'un blocage de Coulomb des fluctuations réelles de cette charge. Pour voir si un tel effet Kondo peut exister, écrivons la transformation de Schrieffer-Wolff généralisée en présence d'une énergie de charge des réservoirs ([4]). Soit $(n_{D,0}, n_{3,0})$ l'état de charge qui pour les potentiels de grille choisis ci-dessus, minimise l'énergie électrostatique et satisfait à $n_{D,0}$ impair. Notons $E(n_D, n_3)$ l'énergie électrostatique associée à l'état de charge (n_D, n_3) . Le couplage qui apparaît dans l'Hamiltonien de Schrieffer-Wolff prend alors la forme :

$$J_{33} = 2t_3^2 \times \left(\frac{1}{E(n_{D,0} - 1, n_{3,0} + 1) - E(n_{D,0}, n_{3,0}) - \epsilon_-} + \frac{1}{E(n_{D,0} + 1, n_{3,0} - 1) - E(n_{D,0}, n_{3,0}) + \epsilon_+} \right) \quad (7.4)$$

Où l'on a utilisé les notations introduites au chapitre 3 (en particulier, $\epsilon_- = \epsilon_d$, $\epsilon_+ = \epsilon_d + U$).

Pour que l'on ait le droit d'écrire la transformation de Schrieffer-Wolff, il faut et il suffit que les dénominateurs d'énergie ΔE qui y apparaissent satisfassent à la condition :

$$\Delta E \gg \Gamma(\epsilon_{+/-}) \quad (7.5)$$

où $\Gamma(\epsilon_{+/-})$ est la largeur des niveaux respectifs ϵ_+ et ϵ_- . Pour que cette condition soit vérifiée, il suffit qu'elle le soit lorsque l'on remplace ΔE par les différences d'énergie électrostatique qui interviennent dans la transformation de Schrieffer-Wolff.

En conclusion, notre géométrie triterminale offre la possibilité d'une étude de la dynamique de formation et de destruction du nuage Kondo. L'inclusion des effets de taille finie dans cette étude est un problème complexe qui n'a jamais été abordé jusqu'ici.

7.2.3 Perspectives expérimentales

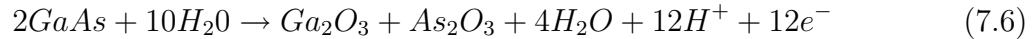
Nous allons maintenant suggérer une mise en oeuvre expérimentale des idées de cette thèse.

Pour cela, nous allons prolonger les idées de l'article [61], que nous avons déjà évoqué à propos de l'effet Kondo hors équilibre.

On part d'une hétérostructure semiconductrice AlGaAs-GaAs. A l'interface entre AlGaAs et GaAs, on a un gaz d'électrons bidimensionnel situé $34nm$ en dessous de la surface. La densité électronique vaut $n_s = 4.5 \times 10^{15}m^{-2}$.

Sur la surface de l'hétérostructure, on dessine un anneau quantique triterminal par oxydation anodique locale.

L'oxydation anodique locale consiste en une oxydation de GaAs par la pointe d'un microscope à force atomique ([67]) : la pointe du microscope est portée à un potentiel négatif ou est traversée par un courant négatif (par rapport à l'échantillon). GaAs est alors le siège de la réaction d'oxydation suivante :



On peut ainsi former une couche d'oxyde sur l'échantillon. En dessous de cette couche, le gaz d'électrons bidimensionnel est appauvri.

L'anneau quantique triterminal que l'on dessine avec des lignes d'oxyde est représenté sur la figure 7.1.

En plus des réservoirs L , R et T_3 , on a des grilles LG_L , LG_R et LG_3 qui permettent de contrôler le couplage entre L , R , T_3 et l'anneau.

Ce contrôle des couplages avec l'anneau peut aussi être fait à l'aide d'un champ magnétique, qui change la distribution des fonctions d'onde dans l'anneau.

Le nombre d'électrons dans l'anneau est contrôlé par les trois grilles PG qui sont portées au même potentiel $V_{PG} \simeq 66.1mV$.

Le diamètre de l'anneau peut être calculé en mesurant la période des oscillations d'Aharonov-Bohm ; il est de l'ordre de $270nm$.

L'énergie de charge de l'anneau et l'espacement moyen entre les niveaux d'énergie à une particule de l'anneau sont respectivement de l'ordre de $1.2meV$ et $200\mu eV$.

On travaille dans un réfrigérateur de dilution $3He/4He$ dont voici l'idée. En dessous du point triple qui apparaît dans le diagramme de phase de $3He-4He$, un mélange de $3He$ et de $4He$ se sépare en deux phases : une phase contenant principalement du $3He$, appelée phase riche en $3He$ et une phase contenant principalement du $4He$, appelée phase riche

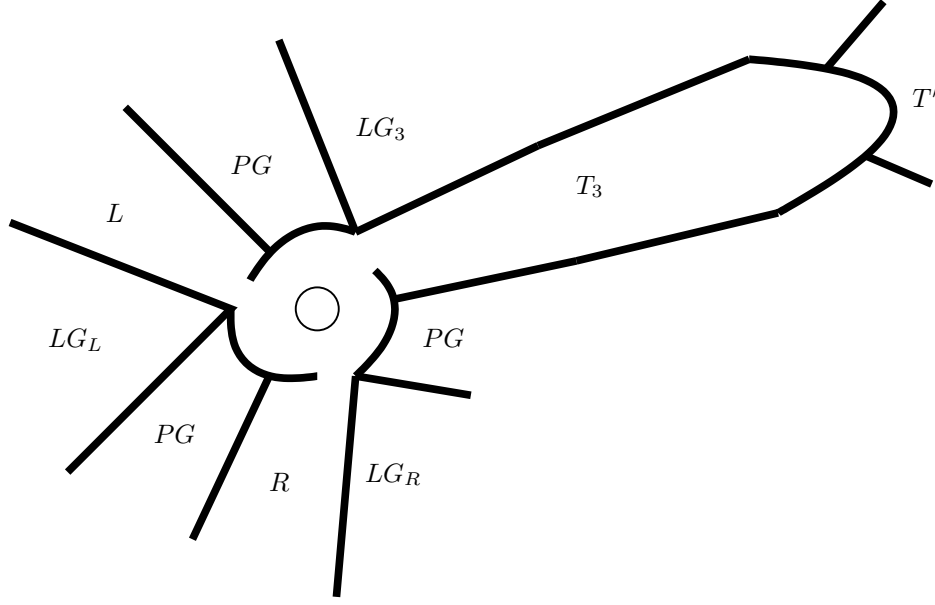


FIG. 7.1 – Anneau quantique triterminal en présence d'effets de taille finie de T_3 . Figure adaptée à partir de [61]

en ^4He . Lorsque l'on pompe dans la phase riche en ^4He , on enlève essentiellement du ^3He car il s'évapore plus facilement. Pour rétablir l'équilibre, il faut alors un transfert de ^3He de la phase riche en ^3He à la phase riche en ^4He . Un tel transfert coûte de l'énergie et refroidit donc les murs de la chambre de mélange, que l'on met en contact thermique avec le système que l'on souhaite refroidir.

Cherchons à évaluer la taille du nuage Kondo.

Pour cela, il faut commencer par calculer la vitesse de Fermi. Le nombre d'onde de Fermi pour un gaz bidimensionnel est donné par :

$$k_F = \sqrt{2\pi n_s} \simeq 1.7 \times 10^8 m^{-1} \quad (7.7)$$

La vitesse de Fermi s'exprime en fonction de k_F et de la masse effective de l'électron m^* :

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} \quad (7.8)$$

Dans GaAs, on a typiquement $m^* = 0.07m$ où m est la masse de l'électron libre ([7]). Donc :

$$v_F \simeq 2.8 \times 10^5 m s^{-1} \quad (7.9)$$

La taille du nuage Kondo en l'absence d'effets de taille finie est alors donnée par :

$$\xi_{K0} = \frac{\hbar v_F}{T_{K0}} \quad (7.10)$$

Dans l'expérience de [61], pour un champ magnétique $B = 40mT$, on trouve $T_{K0} \simeq 500mK$. Il vient alors :

$$\xi_{K0} \simeq 4.2\mu m \quad (7.11)$$

Par conséquent, pour avoir des effets de taille finie importants, il faut donner à T_3 une longueur petite devant $4.2\mu m$. Cette condition est satisfaite pour une longueur de T_3 de l'ordre de la taille de l'anneau, quelques centaines de nanomètres.

7.2.4 Résumé des perspectives

Pour rendre la discussion de cette thèse plus réaliste, il semble inévitable de tenir compte de l'énergie de charge de T_3 .

La prise en compte de cette énergie dans l'étude des effets de taille finie de T_3 n'est pas un problème facile, mais on peut donner quelques premières conclusions en utilisant les équations du groupe de renormalisation. On peut ainsi montrer que sous les hypothèses $T_{K0} \ll \Delta \ll E_G \ll U \ll D_0$, le nuage Kondo se forme préférentiellement dans L et R hors résonance, mais dans T_3 à la résonance.

L'adjonction d'une énergie de charge à T_3 permet d'étudier la dynamique de formation et de destruction du nuage Kondo, en plaçant T_3 dans un régime de blocage de Coulomb mais en laissant L et R dans un régime de transport séquentiel.

Enfin, nous avons montré que les idées avancées dans cette thèse sont susceptibles d'être réalisées expérimentalement, avec des valeurs raisonnables pour les paramètres physiques (par exemple la taille typique de T_3 en dessous de laquelle on peut espérer observer des effets de taille finie est de l'ordre de quelques μm).

Annexe A

Démonstration de la formule de Meir-Wingreen

On garde les mêmes notations qu'au chapitre 1.

En régime stationnaire, l'opérateur courant vaut :

$$I_{op} = -e \frac{dN_L}{dt} = -e \frac{i}{\hbar} [H, N_L] \quad (\text{A.1})$$

où $N_L = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma L}^\dagger c_{k\sigma L}$ est l'opérateur nombre de particules dans le terminal L .

En calculant le commutateur $[H, N_L]$, on voit que la formule (A.1) implique pour le courant moyen :

$$\begin{aligned} I \equiv \langle I_{op} \rangle &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{k\sigma, n} t_{kL, n} (\langle c_{k\sigma L}^\dagger d_n \rangle - \langle d_n^\dagger c_{k\sigma L} \rangle) \\ &= \frac{e}{\hbar} \sum_{k\sigma n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} t_{kL, n} (G_{n, k\sigma L}^<(\omega) - G_{k\sigma L, n}^<(\omega)) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

On a introduit les transformées de Fourier $G_{n, k\sigma L}^<(\omega)$ et $G_{k\sigma L, n}^<(\omega)$, des fonctions de Green de Keldysh inférieures.

On admet que l'on a :

$$G_{k\sigma L, n}^<(\omega) = \sum_m t_{kL, m} (G_{0k\sigma L, k\sigma L}^t(\omega) G_{m, n}^<(\omega) - G_{0k\sigma L, k\sigma L}^<(\omega) G_{m, n}^{\tilde{t}}(\omega)) \quad (\text{A.3})$$

Et :

$$G_{n, k\sigma L}^<(\omega) = \sum_m t_{kL, m} (G_{0k\sigma L, k\sigma L}^<(\omega) G_{n, m}^t(\omega) - G_{0k\sigma L, k\sigma L}^{\tilde{t}}(\omega) G_{n, m}^<(\omega)) \quad (\text{A.4})$$

En reportant les équations (A.3) et (A.4) dans (A.2), et en utilisant les équations suivantes :

$$\begin{aligned} G^>(\omega) + G^<(\omega) &= G^t(\omega) + G^{\tilde{t}}(\omega) \\ G^>(\omega) - G^<(\omega) &= G^r(\omega) - G^a(\omega) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_0^{<}{}_{k\sigma L, k\sigma L}(\omega) &= 2i\pi f_L(\omega)\delta(\omega - \epsilon_{kL}) \\
G_0^{>}{}_{k\sigma L, k\sigma L}(\omega) &= -2i\pi(1 - f_L(\omega))\delta(\omega - \epsilon_{kL})
\end{aligned} \tag{A.5}$$

, on retrouve bien l'équation (1.13).

Il est facile d'en déduire l'équation de Meir-Wingreen. Pour cela, il suffit d'utiliser la petite astuce suivante. Dans le cas où $\Gamma_{Rmn}(\epsilon) = k\Gamma_{Lmn}(\epsilon)$, la conservation du courant implique $I = I_L = I_R = \frac{k}{1+k}I_L + \frac{1}{1+k}I_R$, où I_L est le courant à gauche de D et I_R le courant à droite de D .

Annexe B

Transformation de Schrieffer-Wolff

Gardons les mêmes notations qu'au chapitre 3.

On part de l'Hamiltonien d'Anderson H et on cherche un nouvel Hamiltonien $\bar{H}$ unitairement équivalent à H et ne contenant pas de terme du premier ordre en $t_{k\alpha}$:

$$\bar{H} = e^S H e^{-S} \quad (\text{B.1})$$

Notons H_1 le terme de couplage tunnel de H et notons H_0 la somme des autres termes de H .

Si l'on choisit S tel que

$$[H_0, S] = H_1 \quad (\text{B.2})$$

et si S est linéaire en $t_{k\alpha}$, alors il n'y a pas de terme linéaire en $t_{k\alpha}$ dans $\bar{H}$:

$$\bar{H} = H_0 + \frac{1}{2}[S, H_1] + \frac{1}{3}[S, [S, H_1]] + \frac{1}{8}[S, [S, [S, H_1]]] + \dots \quad (\text{B.3})$$

Pour que ces conditions soient satisfaites, il suffit que :

$$S = \sum_{k\sigma\alpha a} \frac{t_{k\alpha}}{\epsilon_{k\alpha} - \epsilon_a} n_{-\sigma,a} c_{k\sigma\alpha}^\dagger d_\sigma - H.C. \quad (\text{B.4})$$

où $a = +, -$ et l'on a posé :

$$\begin{aligned} n_{-\sigma,+} &= n_{-\sigma} \\ n_{-\sigma,-} &= 1 - n_{-\sigma} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Après cette transformation unitaire, on trouve au deuxième ordre en les $t_{k\alpha}$:

$$\bar{H} = H_0 + H_K + H_V + H'_0 + H_{ch} \quad (\text{B.6})$$

Pour simplifier les expressions, supposons que $\epsilon_k \ll |\epsilon_-|, \epsilon_+$. H_K et H_V sont alors ceux du chapitre 3. Quant à H'_0 et H_{ch} , ils valent :

$$H'_0 = - \sum_{\alpha\sigma} (V_{\alpha\alpha} - \frac{1}{4}J_{\alpha\alpha} + \frac{1}{2}J_{\alpha\alpha}n_{-\sigma})n_\sigma$$

$$H_{ch} = \frac{1}{4} \sum_{k\alpha k'\beta\sigma} J_{\beta\alpha} c_{k',-\sigma\beta}^\dagger c_{k\sigma\alpha}^\dagger d_\sigma d_{-\sigma} + H.C. \quad (\text{B.7})$$

Le terme H'_0 peut être réabsorbé dans H_0 en redéfinissant ϵ_+ et ϵ_- . Quant au terme H_{ch} , il ne connecte pas le sous-espace physiquement pertinent $\sum_\sigma n_\sigma = 1$ avec le sous-espace $\sum_\sigma n_\sigma = 0, 1$ ou 2 et ce terme peut donc être négligé.

On retrouve donc bien le Hamiltonien du chapitre 3 après transformation de Schrieffer-Wolff.

Annexe C

Modélisation du système par des condensateurs : construction du diagramme de stabilité

Nous allons maintenant modéliser classiquement notre géométrie triterminale, dans le cas où 3 est couplé à un terminal.

En fait, nous allons faire les calculs dans une situation plus générale que celle dont nous sommes partis : on va s'intéresser à un ensemble de $n + 1$ points quantiques D_i ($i \in [1, n + 1]$) tels que pour tout i différent de $n + 1$, D_i est relié à D_{i+1} par une capacité C_i (chacun des points quantiques D_1 et D_{n+1} sont reliés à un seul point quantique alors que tous les autres points quantiques sont reliés à deux points quantiques). On suppose de plus que pour tout i , D_i est relié à des électrodes $E_{i,j}$ ($j \in [1, m_i]$) portées aux potentiels $V_{i,j}$ et reliées à D_i par des capacités $C_{i,j}$. Cette situation est illustrée sur la figure C.1.

Pour tout i , notons V_i le potentiel de D_i et définissons la charge dite de biais par :

$$\tilde{Q}_i = \sum_{j=1}^{m_i} C_{i,j} V_{i,j} \quad (\text{C.1})$$

Pour tout i , soit $\tilde{C}_i$ la somme des capacités des condensateurs reliés à D_i .

Dans ces conditions, à l'équilibre électrostatique, on a pour tout i différent de 1 et n :

$$Q_i = -\tilde{Q}_i - C_i V_{i+1} - C_{i-1} V_{i-1} + \tilde{C}_i V_i \quad (\text{C.2})$$

Cette condition affirme simplement que $Q_i = \sum_a C_a U_a$ où l'indice a parcourt l'ensemble des voisins de i , C_a est la capacité de la jonction entre i et a et U_a est la différence de potentiel entre i et a .

De plus, à l'équilibre électrostatique :

$$\begin{cases} Q_1 = -\tilde{Q}_1 - C_1 V_2 + \tilde{C}_1 V_1 \\ Q_{n+1} = -\tilde{Q}_{n+1} - C_n V_n + \tilde{C}_{n+1} V_{n+1} \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

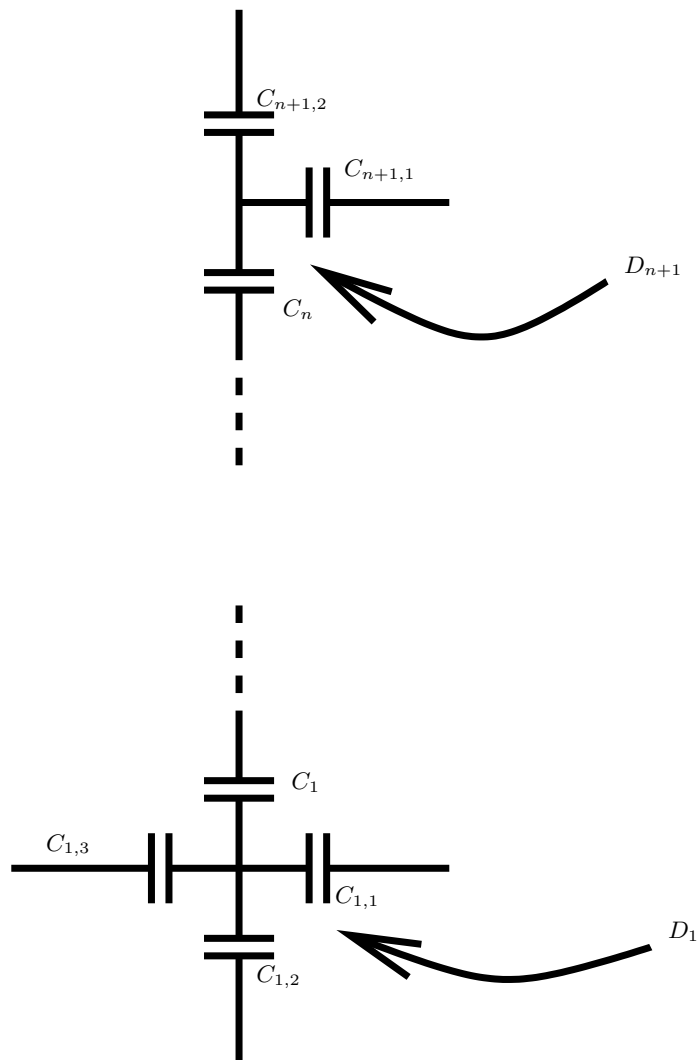


FIG. C.1 – Modélisation du système par des condensateurs

On peut réécrire les équations (C.2) et (C.3) sous la forme :

$$\forall i \in [1, n+1], Q_i = -\tilde{Q}_i + \sum_{j=1}^{n+1} K_{i,j} V_j \quad (C.4)$$

Où les $K_{i,j}$ sont définis par :

$$\begin{aligned} \forall i \in [1, n+1], K_{i,i} &= \tilde{C}_i \\ \forall i \in [1, n], K_{i,i+1} &= -C_i \\ \forall i \in [2, n+1], K_{i,i-1} &= -C_{i-1} \end{aligned} \quad (C.5)$$

et $K_{i,j} = 0$ dans tous les autres cas.

On constate que la matrice $[K_{i,j}]$ est symétrique.

Calculons l'énergie δE que l'on doit fournir au système de points quantiques pour augmenter la charge de D_i de δQ_i quel que soit i :

$$\delta E = \sum_{i=1}^{n+1} V_i \delta Q_i \quad (C.6)$$

Or, on a pour tout i :

$$V_i = \sum_{j=1}^{n+1} K_{i,j}^{-1} (Q_j + \tilde{Q}_j) \quad (C.7)$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \delta E &= \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} K_{i,j}^{-1} (Q_j + \tilde{Q}_j) \delta (Q_i + \tilde{Q}_i) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(K_{i,j}^{-1} (Q_j + \tilde{Q}_j) \delta (Q_i + \tilde{Q}_i) + K_{i,j}^{-1} (Q_i + \tilde{Q}_i) \delta (Q_j + \tilde{Q}_j) \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{i,j}^{-1} \delta \left((Q_j + \tilde{Q}_j) (Q_i + \tilde{Q}_i) \right) \end{aligned} \quad (C.8)$$

On a donc l'expression suivante de l'énergie électrostatique :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{i,j}^{-1} (Q_j + \tilde{Q}_j) (Q_i + \tilde{Q}_i) + Cste \quad (C.9)$$

Appliquons ce résultat à la modélisation en terme de condensateurs de notre géométrie triterminale. On a un système de deux réservoirs D_1 et D_2 reliés par une capacité C_0 et tels que :

- D_1 est relié par trois condensateurs, de capacités respectives C_1, C_2 et C_{g1} , à trois électrodes, de potentiels respectifs V_1, V_2 et V_{g1} .
- D_2 est relié par un condensateur de capacité C_{g2} à une électrode de potentiel V_{g2} .

Le point quantique D_1 joue le rôle de D alors que D_2 joue le rôle de 3.

Posons :

$$\begin{cases} C = C_1 + C_{g1} + C_2 + C_0 \\ C' = C_{g2} + C_0 \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Ici, on a :

$$\begin{cases} \tilde{Q}_1 = V_1 C_1 + V_2 C_2 + C_{g1} V_{g1} \\ \tilde{Q}_2 = C_{g2} V_{g2} \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

Les $K_{i,j}$ valent ici :

$$\begin{cases} K_{1,1} = C \\ K_{1,2} = \Gamma_{2,1} = -C_0 \\ K_{2,2} = C' \end{cases} \quad (\text{C.12})$$

D'où :

$$\begin{cases} K_{1,1}^{-1} = \frac{C'}{CC' - C_0^2} \\ K_{1,2}^{-1} = K_{2,1}^{-1} = \frac{C_0}{CC' - C_0^2} \\ K_{2,2}^{-1} = K_{2,2}^{-1} = \frac{C}{CC' - C_0^2} \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

On trouve donc pour l'énergie électrostatique :

$$E = \frac{1}{2} \frac{C'}{CC' - C_0^2} L_1^2 + \frac{1}{2} \frac{C}{CC' - C_0^2} L_2^2 + \frac{C_0}{CC' - C_0^2} L_1 L_2 + Cste \quad (\text{C.14})$$

Où l'on a posé :

$$\begin{cases} L_1 = Q_1 + \tilde{Q}_1 \\ L_2 = Q_2 + \tilde{Q}_2 \end{cases} \quad (\text{C.15})$$

Dans un graphe V_{g1}, V_{g2} , pour tous (n_1, n_2) entiers relatifs, nous allons tracer la cellule composée des points en lesquels l'énergie est minimisée par la configuration (n_1, n_2) , où l'on a n_1 électrons dans le point quantique 1 et n_2 électrons dans le point quantique 2. De manière évidente, ces cellules se déduisent les unes des autres par les translations de vecteur (z_1, z_2) , z_1 et z_2 étant des entiers relatifs. Par conséquent, il nous suffit de déterminer l'ensemble des points auxquels la configuration $(n_1 = 0, n_2 = 0)$ minimise l'énergie.

Les calculs sont donnés ci-dessous en appendice. Le résultat est représenté sur la figure C.2.

Le régime de blocage de Coulomb correspond à l'intérieur des "diamants" alors qu'il y a transport séquentiel aux limites de ceux-ci, c'est-à-dire sur les lignes de dégénérescence de la charge.

Notons que les effets quantiques ont pour rôle d'élargir les limites entre diamants de Coulomb, la largeur de ces limites étant directement reliée à la largeur des niveaux des points quantiques.

Les diamants de Coulomb sont évoqués par exemple dans [21].

Appendice : détails techniques de la construction du diagramme de stabilité :

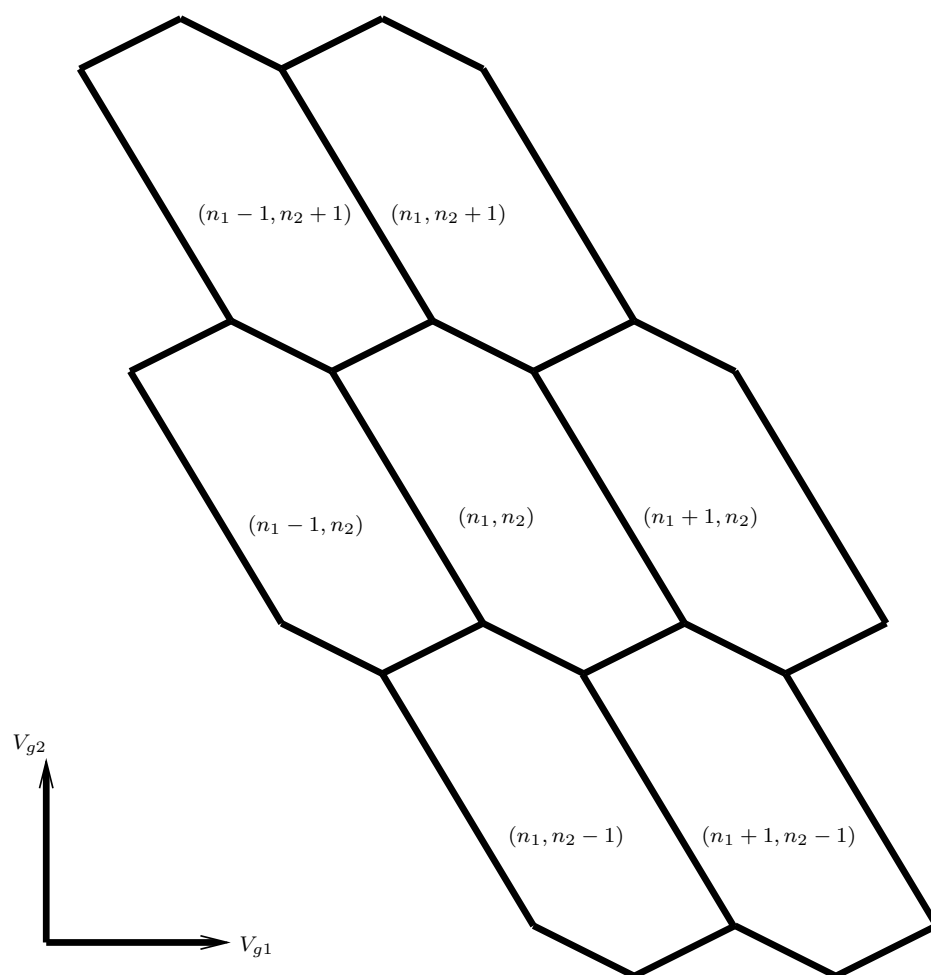


FIG. C.2 – Diagramme de stabilité du système

Notons $E_{n_1, n_2}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)$ l'énergie électrostatique au point $(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)$ lorsqu'il y a n_1 (respectivement n_2) électrons dans le point quantique 1 (respectivement 2). Des calculs simples montrent que :

$$\begin{aligned}
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= \frac{1}{2} \frac{C'}{CC' - C_0^2} \tilde{Q}_1^2 + \frac{1}{2} \frac{C}{CC' - C_0^2} \tilde{Q}_2^2 + \frac{C_0}{CC' - C_0^2} \tilde{Q}_1 \tilde{Q}_2 + C_{ste} \\
E_{n_1, n_2}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) + \frac{1}{2} \frac{C'}{CC' - C_0^2} (n_1 e)^2 + \frac{1}{2} \frac{C}{CC' - C_0^2} (n_2 e)^2 \\
&+ \frac{C_0}{CC' - C_0^2} (n_1 e)(n_2 e) + \left(\frac{C'}{CC' - C_0^2} (n_1 e) + \frac{C_0}{CC' - C_0^2} (n_2 e) \right) \tilde{Q}_1 \\
&+ \left(\frac{C}{CC' - C_0^2} (n_2 e) + \frac{C_0}{CC' - C_0^2} (n_1 e) \right) \tilde{Q}_2
\end{aligned} \tag{C.16}$$

La cellule S dans laquelle la configuration $(n_1 = 0, n_2 = 0)$ minimise l'énergie est incluse dans la cellule S' passant par le point $(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) = (0, 0)$ et délimitée par les courbes d'équation :

$$\begin{aligned}
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{\pm e, 0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) \\
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{0, \pm e}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) \\
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{\pm e, \mp e}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)
\end{aligned} \tag{C.17}$$

Des calculs triviaux montrent que ces courbes sont des droites d'équations respectives :

$$\begin{aligned}
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{\pm e, 0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) \Leftrightarrow \frac{\tilde{Q}_2}{e} = -\frac{C'}{C_0} \frac{\tilde{Q}_1}{e} \mp \frac{C'}{2C_0} \\
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{0, \pm e}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) \Leftrightarrow \frac{\tilde{Q}_2}{e} = -\frac{C_0}{C} \frac{\tilde{Q}_1}{e} \mp \frac{1}{2} \\
E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) &= E_{\pm e, \mp e}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) \Leftrightarrow \frac{\tilde{Q}_2}{e} = \frac{C' - C_0}{C - C_0} \frac{\tilde{Q}_1}{e} \pm \frac{C' + C - 2C_0}{2(C - C_0)}
\end{aligned} \tag{C.18}$$

Donc, la cellule S' est un hexagone.

On a bien sûr $S \subset S'$. Pour montrer que $S = S'$, il suffit de vérifier qu'aux sommets de l'hexagone S' , la configuration $(n_1, n_2) = (0, 0)$ minimise l'énergie électrostatique. Ceci se fait sans trop de difficultés.

La cellule S est schématisée sur la figure C.3.

Soit A le point d'intersection des droites $E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) = E_{e,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)$ et $E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) = E_{0,e}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)$. Soit B le point d'intersection des droites $E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) = E_{e,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)$ et $E_{0,0}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2) = E_{e,-e}(\tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2)$.

Supposons que l'on veuille que la charge du point quantique D_1 puisse fluctuer entre

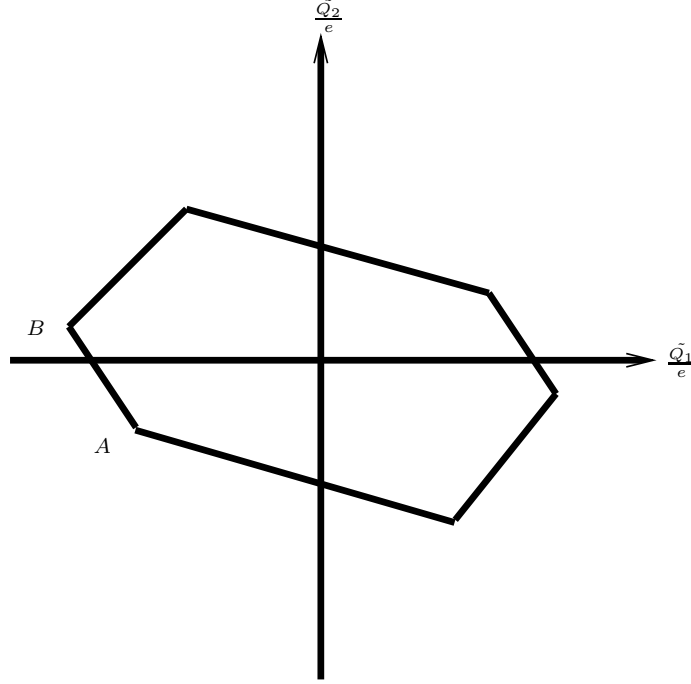


FIG. C.3 – Cellule où la configuration $(n_1, n_2) = (0, 0)$ minimise l'énergie

0 et e (respectivement entre e et $2e$) sans que la charge du point quantique D_2 ne fluctue. Alors, le point $(\frac{\tilde{Q}_1}{e}, \frac{\tilde{Q}_2}{e})$ (respectivement $(\frac{\tilde{Q}_1}{e} + 1, \frac{\tilde{Q}_2}{e})$) doit appartenir au segment $[AB]$:

$$\begin{aligned} & \alpha \begin{pmatrix} -\frac{C(C'-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} \\ -\frac{C'(C-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} \end{pmatrix} \\ & \gamma \begin{pmatrix} \frac{2C_0^2-C_0C-CC'}{2(CC'-C_0^2)} \\ \frac{C'(C-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (C.19)$$

Donc, on doit avoir :

$$\begin{pmatrix} \frac{\tilde{Q}_1}{e} (resp. " + 1) \\ \frac{\tilde{Q}_2}{e} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{C(C'-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} \\ -\frac{C'(C-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} \frac{C_0(C_0-C)}{(CC'-C_0^2)} \\ \frac{C'(C-C_0)}{(CC'-C_0^2)} \end{pmatrix} \quad (C.20)$$

Où $t \in [0, 1]$.

En terme de V_{g1} et V_{g2} , cette égalité se réécrit :

$$\begin{cases} V_{g1} = \left(-\frac{C(C'-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} + t \frac{C_0(C_0-C)}{(CC'-C_0^2)} (resp. " - 1) \right) \frac{e}{C_{g1}} - \frac{V_1 C_1 + V_2 C_2}{C_{g1}} \\ V_{g2} = \left(-\frac{C'(C-C_0)}{2(CC'-C_0^2)} + t \frac{C'(C-C_0)}{(CC'-C_0^2)} \right) \frac{e}{C_{g2}} \end{cases}, t \in [0, 1] \quad (C.21)$$

La longueur de ce segment vaut :

$$L = \sqrt{\left(\frac{C_0(C_0-C)}{(CC'-C_0^2)} \frac{e}{C_{g1}} \right)^2 + \left(\frac{C'(C-C_0)}{(CC'-C_0^2)} \frac{e}{C_{g2}} \right)^2} \quad (C.22)$$

Annexe D

Détermination des coefficients de transmission dans un modèle de liaisons fortes, dans le cas sans interaction

On part du modèle de liaisons fortes du chapitre 4. On va faire les hypothèses :

- 1) $U = 0$.
- 2) $l \rightarrow \infty$.
- 3) $e_W = 0$.

La première hypothèse est essentielle; elle permet de se ramener à un problème à 1 particule. Les hypothèses 2) et 3) en revanche ne sont là que pour simplifier les calculs. Puisque l'on s'est ramené à un problème à 1 particule, on peut omettre l'indice de spin dans les calculs.

Le vecteur d'état du système peut s'écrire :

$$|\psi > (k) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j(k) |j > + \sum_{j=1}^{\infty} \psi'_j(k) |j >' \quad (D.1)$$

Où $|j >$ (j entier naturel) désigne l'état où l'on a un seul électron qui est situé au site j du terminal R si $j > 0$, au site $-j$ du terminal L si $j < 0$ et sur le point si $j = 0$. De plus, $|j >'$ (j entier positif) désigne l'état où l'on a un seul électron qui est situé au site j du 3ième terminal.

On suppose que les $\psi_j(k)$ et les $\psi'_j(k)$ décrivent la diffusion par le point quantique d'une onde plane de nombre d'onde k :

$$\begin{aligned} \text{si } j \leq -1, \psi_j(k) &= e^{ikj} + r e^{-ikj} \\ \text{si } j \geq 1, \psi_j(k) &= \tau e^{ikj} \\ \text{si } j \geq 1, \psi'_j(k) &= \tau' e^{ikj} \end{aligned} \quad (D.2)$$

En projetant l'équation de Schrodinger sur l'état $|0 >$, on peut déterminer $\psi_0(k)$ en fonction de $\psi_{-1}(k), \psi_1(k)$ et $\psi'_1(k)$ (relation (r)). En projetant l'équation de Schrodinger sur les états $|-1 >, |1 >$ et $|1 >'$ et en utilisant la relation (r) pour éliminer $\psi_0(k)$, on obtient un système linéaire de 3 équations à 3 inconnues dont la résolution donne les coefficients de transmission τ et τ' et le coefficient de réflexion r .

On trouve :

$$|\tau|^2 = \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(E - E^*)^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R + \Gamma_3)^2} \quad (\text{D.3})$$

Où $E = -2t\cos(k)$ est l'énergie et où l'on a posé :

$$E^* = -\cos(k) \frac{t_3^2 + t_L^2 + t_R^2}{t} + \epsilon_d$$

Notons que les Γ_α ont l'expression suivante :

$$\Gamma_\alpha = \frac{t_\alpha^2}{t} \sin(k) \quad (\text{D.4})$$

A la résonnance ($E = E^*$), on retrouve le résultat du chapitre 4.

Annexe E

Calcul perturbatif de la matrice de conductance à haute température à l'ordre 3

Au troisième ordre, on a 3 sortes de termes dans l'intensité :

$$\begin{aligned}
 \langle I_\gamma \rangle_1^{(3)} &= \langle 0 | S^{(1)}(-\infty, 0) I_\gamma(0) S^{(1)}(0, -\infty) | 0 \rangle \\
 \langle I_\gamma \rangle_2^{(3)} &= \langle 0 | S^{(2)}(-\infty, 0) I_\gamma(0) | 0 \rangle \\
 \langle I_\gamma \rangle_3^{(3)} &= \langle 0 | I_\gamma(0) S^{(2)}(0, -\infty) | 0 \rangle
 \end{aligned} \tag{E.1}$$

Où $S^{(n)}(t_2, t_1)$ désigne la contribution d'ordre n à l'opérateur $S(t_2, t_1)$.

Commençons par calculer le terme $\langle I_\gamma \rangle_1^{(3)}$:

$$\begin{aligned}
 \langle I_\gamma \rangle_1^{(3)} &= -\frac{ei}{\hbar^3} \sum_{\substack{\alpha_1 \beta_1 \\ \alpha \\ \alpha_2 \beta_2}} \sum_{\substack{k_1 s_1 \\ k'_1 s'_1 \\ ks \\ k' s' \\ k_2 s_2 \\ k'_2 s'_2}} \sum_{abc} \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt_2 \times \\
 &\quad \left(\frac{\sigma_{s_1 s'_1}^a}{2} \frac{\sigma_{ss'}^b}{2} \frac{\sigma_{s_2 s'_2}^c}{2} \right) \langle 0 | S^a(t_1) S^b(0) S^c(t_2) | 0 \rangle \times \\
 &\quad \left(-J_{\alpha_1 \beta_1} J_{\gamma \alpha} J_{\alpha_2 \beta_2} \langle 0 | c_{k_1 s_1 \alpha_1}^\dagger(t_1) c_{k'_1 s'_1 \beta_1}(t_1) c_{k s \gamma}^\dagger(0) c_{k' s' \alpha}(0) c_{k_2 s_2 \alpha_2}^\dagger(t_2) c_{k'_2 s'_2 \beta_2}(t_2) | 0 \rangle \right) \\
 &\quad + H.C.
 \end{aligned} \tag{E.2}$$

Ensuite, on utilise le théorème de Wick pour exprimer la fonction de Green électronique à 6 points en fonction des fonctions de Green électroniques à 2 points ; la somme sur les spin va faire apparaître la trace $tr \left(\frac{\sigma^a}{2} \frac{\sigma^b}{2} \frac{\sigma^c}{2} \right)$. On obtient finalement :

$$\langle I_\gamma \rangle_1^{(3)} = -\frac{e}{\hbar^3} \sum_{abc} \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt_2 tr \left(\frac{\sigma^a}{2} \frac{\sigma^b}{2} \frac{\sigma^c}{2} \right) \langle 0 | S^a(t_1) S^b(0) S^c(t_2) | 0 \rangle \times$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_2 \gamma} J_{\gamma \alpha_1} \times \\
& \sum_{k_1 k_2} \left(-G_{k_1 \alpha_1}^<(-t_1) G_{k_2 \alpha_2}^>(t_1 - t_2) G_{k \gamma}^<(t_2) + G_{k_2 \alpha_2}^<(t_2 - t_1) G_{k \gamma}^>(t_1) G_{k_1 \alpha_1}^>(-t_2) \right) \\
& + H.C.
\end{aligned} \tag{E.3}$$

On utilise ensuite les relations :

$$\begin{aligned}
& tr \left(\frac{\sigma^a}{2} \frac{\sigma^b}{2} \frac{\sigma^c}{2} \right) = \frac{i}{4} \epsilon^{abc} \\
& < 0 | S^a(t_1) S^b(0) S^c(t_2) | 0 > = \frac{i}{8} \epsilon^{abc}
\end{aligned} \tag{E.4}$$

Et on remplace les sommes sur les nombres d'onde par des intégrales. On remplace alors les fonctions de Green par leur expression en fonction des distributions de Fermi-Dirac dans les différents terminaux. Après cela, on peut effectuer les intégrales sur t_1 et t_2 à l'aide de la relation suivante :

$$\int_0^\infty e^{i\omega t} dt = \pi \delta(\omega) - v.p. \frac{1}{i\omega} \tag{E.5}$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned}
< I_\gamma >_1^{(3)} &= \frac{3}{8} \frac{e}{\hbar} \int d\epsilon_1 \int d\epsilon_2 \int d\epsilon \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \rho_{\alpha_1}(\epsilon_1) \rho_{\alpha_2}(\epsilon_2) \rho_\gamma(\epsilon) J_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_2 \gamma} J_{\gamma \alpha_1} \times \\
& Re \left\{ -i f_\gamma(\epsilon) (1 - f_{\alpha_2}(\epsilon_2)) f_{\alpha_1}(\epsilon_1) \left(v.p. \frac{1}{i(\epsilon_1 - \epsilon_2)} + \pi \delta(\epsilon_1 - \epsilon_2) \right) \left(v.p. \frac{1}{i(\epsilon_2 - \epsilon)} + \pi \delta(\epsilon_2 - \epsilon) \right) \right. \\
& \left. - i f_{\alpha_2}(\epsilon_2) (1 - f_\gamma(\epsilon)) (1 - f_{\alpha_1}(\epsilon_1)) \left(v.p. \frac{1}{i(\epsilon_2 - \epsilon)} + \pi \delta(\epsilon_2 - \epsilon) \right) \left(v.p. \frac{1}{i(\epsilon_1 - \epsilon_2)} + \pi \delta(\epsilon_1 - \epsilon_2) \right) \right\}
\end{aligned} \tag{E.6}$$

Dans chacun des termes de la partie réelle, il reste à effectuer une intégrale sur ϵ_1, ϵ_2 ou ϵ , de façon à se débarrasser de la distribution de Dirac. On obtient alors finalement :

$$\begin{aligned}
< I_\gamma >_1^{(3)} &= -\frac{3}{8} \frac{e\pi}{\hbar} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_2 \gamma} J_{\gamma \alpha_1} \times \\
& \int d\epsilon_1 \int d\epsilon v.p. \frac{1}{\epsilon_1 - \epsilon} \times \\
& \{ \rho_{\alpha_1}(\epsilon_1) \rho_{\alpha_2}(\epsilon) \rho_\gamma(\epsilon) (f_{\alpha_2}(\epsilon) - f_{\alpha_2}(\epsilon_1)) (f_{\alpha_1}(\epsilon_1) + f_\gamma(\epsilon)) + f_\gamma(\epsilon) f_{\alpha_1}(\epsilon_1) \} + \\
& \rho_{\alpha_1}(\epsilon_1) \rho_{\alpha_2}(\epsilon_1) \rho_\gamma(\epsilon) (f_{\alpha_2}(\epsilon_1) - f_{\alpha_2}(\epsilon)) (f_{\alpha_1}(\epsilon_1) + f_\gamma(\epsilon)) + f_\gamma(\epsilon) f_{\alpha_1}(\epsilon_1) \}
\end{aligned} \tag{E.7}$$

Intéressons-nous maintenant aux contributions $< I_\gamma >_2^{(3)}$ et $< I_\gamma >_3^{(3)}$ à la valeur moyenne du courant. On a :

$$< I_\gamma >_2^{(3)} + < I_\gamma >_3^{(3)} =$$

$$\begin{aligned}
& 2Re \left(\langle 0 | \left(\frac{-1}{2\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt'_1 T_K(H_{int}(t_1)H_{int}(t'_1)) A | 0 \rangle \right) + \\
& 2Re \left(\langle 0 | A \left(\frac{-1}{2\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^0 dt'_1 T_K(H_{int}(t_1)H_{int}(t'_1)) | 0 \rangle \right)
\end{aligned} \tag{E.8}$$

Ces 2 termes seront apellés respectivement $\langle I_\gamma \rangle^{(3) '}$ et $\langle I_\gamma \rangle^{(3) ''}$.

Le calcul de $\langle I_\gamma \rangle^{(3) '}$ (respectivement $\langle I_\gamma \rangle^{(3) ''}$) ressemble beaucoup à celui de $\langle I_\gamma \rangle_1^{(3)}$. Il y a toutefois quelques différences qui doivent être signalées. D'abord, ce calcul fait non seulement apparaître les fonctions de Green $G^>$ et $G^<$ mais aussi les fonctions de Green G^t (respectivement $G^{\bar{t}}$) définies de la manière suivante (cf chapitre 1) :

$$\begin{aligned}
G_{ks\alpha}^t(t) &= \Theta(t)G_{ks\alpha}^>(t) + \Theta(-t)G_{ks\alpha}^<(t) \\
G_{ks\alpha}^{\bar{t}}(t) &= \Theta(-t)G_{ks\alpha}^>(t) + \Theta(t)G_{ks\alpha}^<(t)
\end{aligned} \tag{E.9}$$

(Θ est la fonction marche). Ensuite, ce calcul va faire apparaître :

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \tilde{T} S^a(t_1) S^b(t_2) S^c(0) | 0 \rangle &= \frac{i}{8} \epsilon^{abc} sgn(t_2 - t_1) \\
\langle 0 | T S^a(0) S^b(t_1) S^c(t_2) | 0 \rangle &= \frac{i}{8} \epsilon^{abc} sgn(t_1 - t_2)
\end{aligned} \tag{E.10}$$

Où sgn est la fonction signe.

Les calculs donnent les résultats suivant :

$$\begin{aligned}
\langle I_\gamma \rangle^{(3) '}&= \frac{3}{8} \frac{e\pi}{\hbar} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_1 \gamma} J_{\alpha_2 \alpha_1} J_{\gamma \alpha_2} \times \\
& \int d\epsilon d\epsilon' \left\{ v.p. \frac{\rho_\gamma(\epsilon) \rho_{\alpha_1}(\epsilon) \rho_{\alpha_2}(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} (1 - f_\gamma(\epsilon)) f_{\alpha_1}(\epsilon) (1 - 3f_{\alpha_2}(\epsilon')) - \right. \\
& \left. v.p. \frac{\rho_\gamma(\epsilon) \rho_{\alpha_1}(\epsilon') \rho_{\alpha_2}(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} (1 - f_\gamma(\epsilon)) f_{\alpha_2}(\epsilon') (1 - f_{\alpha_1}(\epsilon')) \right\}
\end{aligned} \tag{E.11}$$

Et :

$$\begin{aligned}
\langle I_\gamma \rangle^{(3) ''}&= \frac{3}{8} \frac{e\pi}{\hbar} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_1 \gamma} J_{\alpha_2 \alpha_1} J_{\gamma \alpha_2} \times \\
& \int d\epsilon d\epsilon' \left\{ v.p. \frac{\rho_\gamma(\epsilon) \rho_{\alpha_1}(\epsilon) \rho_{\alpha_2}(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} (1 - f_{\alpha_1}(\epsilon)) f_\gamma(\epsilon) (3f_{\alpha_2}(\epsilon') - 2) - \right. \\
& \left. v.p. \frac{\rho_\gamma(\epsilon) \rho_{\alpha_1}(\epsilon') \rho_{\alpha_2}(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} (1 - f_{\alpha_2}(\epsilon')) f_{\alpha_1}(\epsilon') f_\gamma(\epsilon) \right\}
\end{aligned} \tag{E.12}$$

La contribution totale d'ordre 3 au courant vaut :

$$\begin{aligned}
\langle I_\gamma \rangle^{(3)} &= -\frac{3}{8} \frac{e\pi}{\hbar} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} J_{\alpha_1 \gamma} J_{\alpha_2 \alpha_1} J_{\gamma \alpha_2} \times \\
& \int d\epsilon d\epsilon' v.p. \frac{\rho_\gamma(\epsilon) \rho_{\alpha_1}(\epsilon) \rho_{\alpha_2}(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'} 2(2f_{\alpha_2}(\epsilon') - 1)(f_{\alpha_1}(\epsilon) - f_\gamma(\epsilon))
\end{aligned} \tag{E.13}$$

Pour de faibles différences de potentiel entre les différents terminaux, on peut linéariser cette expression. On obtient :

$$\langle I_\gamma \rangle^{(3)} = \frac{3\pi e^2}{4\hbar} \sum_{\alpha_1\alpha_2} J_{\alpha_1\gamma} J_{\alpha_2\alpha_1} J_{\gamma\alpha_2} \int d\epsilon \rho_\gamma(\epsilon) \rho_{\alpha_1}(\epsilon) \left(-\frac{df}{d\epsilon} \right) I^{\alpha_2}(\epsilon) (V_\gamma - V_{\alpha_1}) \quad (\text{E.14})$$

Où I^α a été défini dans la section 6.1. On trouve ainsi l'expression de la matrice de conductance à l'ordre 3 qui a été donnée dans la section 6.1.

Annexe F

Calcul de la conductance à $T \ll T_K$ dans le cas $\frac{\gamma}{T} \ll 1$

Le cas $\frac{\gamma}{T} \ll 1$ est celui où les effets de taille finie sont très importants. Dans ce cas, la pertinence des hypothèses que nous avons faites dans la section 6.2. est loin d'être évidente. Mais nous avons vu que l'on obtient des résultats physiques raisonnables, du moins dans le cas T_3 non conducteur.

Calcul du taux de transition associé aux collisions in-élastiques

Dans le cas $\frac{\gamma}{T} \ll 1$, les facteurs de Fermi-Dirac qui apparaissent dans les intégrales I_1 et I_2 varient lentement devant les densités d'état. Par conséquent, nous allons approximer ces facteurs de Fermi-Dirac par leur valeur en $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$. Les intégrales I_1 et I_2 se calculent alors aisément par le théorème des résidus et l'on trouve :

$$W^{in}(\epsilon, T) = \pi \rho_3(0)^3 (|A_{\uparrow\downarrow}|^2 + \frac{1}{2}|A_{\uparrow\uparrow}|^2) \frac{3\pi^2}{2} \frac{\epsilon^2 + \gamma^2}{9 + \left(\frac{\epsilon}{\gamma}\right)^4 + 10\left(\frac{\epsilon}{\gamma}\right)^2} \quad (\text{F.1})$$

Interprétation physique de $W^{in}(0, T)$:

On constate que $W^{in}(0, T)$ se comporte en γ^2 au lieu de T^2 comme dans le cas précédent. Cela est dû au fait que maintenant, l'énergie de l'électron de la paire électron-trou ainsi que la différence des énergies de l'électron et du trou, ne varient plus dans un intervalle de largeur T mais dans un intervalle de largeur γ , car c'est la largeur de la densité d'état qui est maintenant le facteur limitant les états accessibles.

Fin du calcul de $Im(T(\epsilon))$

En reportant (F.1) dans (6.85), et en utilisant (6.86) et $\alpha \simeq \frac{1}{T_K}$, on trouve :

$$-\pi\rho_3(\epsilon)Im(T(\epsilon)) \simeq 1 - \left(\frac{\epsilon}{T_K}\right)^2 + \frac{3\pi^2}{4} \left(\frac{\gamma}{T_K}\right)^2 \frac{-1 + 2\left(\frac{\epsilon}{T_K}\right)^2}{9 + \left(\frac{\epsilon}{\gamma}\right)^4 + 10\left(\frac{\epsilon}{\gamma}\right)^2} \quad (F.2)$$

Pour pouvoir utiliser cette relation dans la formule (6.74), on a besoin qu'elle soit valide jusqu'à des énergies de l'ordre de T donc par hypothèse très grandes devant γ . Or, il n'est pas du tout évident que le développement à l'ordre un du déphasage soit valide jusqu'à de telles énergies. Cette dernière hypothèse sera utilisée mais elle reste incertaine.

Le calcul de la conductance se fait numériquement. Les résultats sont donnés dans la section 6.2.

Annexe G

Calcul de la hauteur du plateau de la courbe donnant la conductance à la résonance d'un point quantique inséré entre deux fils de taille finie

La compréhension de cette annexe requiert la connaissance de la théorie des bosons esclaves en champ moyen exposée dans la section 6.3. On garde les notations du chapitre 2 et de la section 6.3.

Dans l'approche bosons esclaves en champ moyen, si l'on note $\tilde{\Gamma}$ le couplage renormalisé, la fonction $\pi\rho_d(\omega)\tilde{\Gamma}(\omega)$ est donnée par :

$$\pi\rho_d(\omega)\tilde{\Gamma}(\omega) = \frac{2b_0^4\Gamma(\omega)^2}{((\omega - \tilde{\epsilon}_f - b_0^2A(\omega))^2 + 4b_0^4\Gamma(\omega)^2)} \quad (\text{G.1})$$

La formule de Meir-Wingreen donne donc l'expression suivante pour le courant :

$$\begin{aligned} G &= \frac{4e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \pi\rho_d(\omega)\tilde{\Gamma}(\omega) \\ &= \frac{4e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \frac{2b_0^4\Gamma(\omega)^2}{((\omega - \tilde{\epsilon}_f - b_0^2A(\omega))^2 + 4b_0^4\Gamma(\omega)^2)} \end{aligned} \quad (\text{G.2})$$

Pour des températures T telles que $\Delta \ll T \ll T_{K0}$, vu que $\pi\rho_d(\epsilon)\tilde{\Gamma}(\epsilon)$ est quasi périodique de période Δ sur un intervalle de largeur T , son intégrale pondérée par $\left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right)$ est proche de sa valeur moyenne prise sur un intervalle de largeur Δ .

Donc, la hauteur du plateau de conductance est donnée par :

$$G_{\text{plateau}} = \frac{4e^2}{h} \frac{1}{\Delta} \int_0^{\Delta} d\omega \frac{2b_0^4\Gamma(\omega)^2}{((\omega - \tilde{\epsilon}_f - b_0^2A(\omega))^2 + 4b_0^4\Gamma(\omega)^2)} \quad (\text{G.3})$$

Lorsque le couplage tunnel t_{WD} entre les fils et le point quantique tend vers l'infini (T_{K0} suffisamment grand), on peut négliger les termes en $\omega - \tilde{\epsilon}_f$ devant $b_0^4(A^2 + 4\Gamma^2)$. Donc :

$$G_{plateau} = \frac{4e^2}{h} \frac{1}{\Delta} \int_0^\Delta d\omega \frac{2\Gamma(\omega)^2}{A(\omega)^2 + 4\Gamma(\omega)^2} \quad (G.4)$$

Supposons que l'on est à la résonance. On peut approximer la densité d'état dans l'intervalle $[0, \Delta]$ par une somme de deux lorentziennes :

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{K'}{\epsilon^2 + \gamma^2} + \frac{K'}{(\epsilon - \Delta)^2 + \gamma^2} \quad (G.5)$$

On a alors :

$$A(\omega) = \frac{2K'\omega}{\gamma} \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} + \frac{2K'(\omega - \Delta)}{\gamma} \frac{1}{(\omega - \Delta)^2 + \gamma^2} \quad (G.6)$$

En reportant (G.5) et (G.6) dans (G.4), on trouve :

$$\begin{aligned} G_{plateau} &= \frac{2e^2}{h} \frac{1}{\Delta} \int_0^\Delta \frac{d\omega}{1 + \frac{1}{\gamma^2} \left(\frac{\frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2} + \frac{\omega - \Delta}{(\omega - \Delta)^2 + \gamma^2}}{\frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} + \frac{1}{(\omega - \Delta)^2 + \gamma^2}} \right)^2} \\ &= \frac{4e^2}{h} \gamma \frac{\Delta^2 \arctan\left(\frac{\Delta}{2\gamma}\right) + (\Delta^2 + 8\gamma^2) \arctan\left(\frac{\Delta}{\gamma}\right) + \Delta\gamma \ln\left(1 + \frac{\Delta^2}{\gamma^2}\right)}{\Delta(\Delta^2 + 16\gamma^2)} \end{aligned} \quad (G.7)$$

Dans la limite $\Delta \gg \gamma$, on trouve :

$$G_{plateau} = \frac{4\pi e^2}{h} \frac{\gamma}{\Delta} \quad (G.8)$$

Physiquement, on peut comprendre ce résultat de la manière suivante. La conductance du plateau est proportionnelle à la valeur moyenne de $\pi\rho_d(\omega)\tilde{\Gamma}(\omega)$ et elle est donc d'autant plus petite que les pics de cette fonction sont étroits et espacés (sachant que ces pics ont une hauteur constante $\frac{1}{2}$).

Annexe H

Etude de l'origine physique de la scission du pic Kondo lorsque le niveau de Fermi est un maximum de la densité d'état de T_3

Nous allons montrer que la scission du pic Kondo lorsque le niveau de Fermi est un maximum de la densité d'état de T_3 est un effet qui est déjà présent dans un modèle de liaisons forte où le point quantique D est couplé à deux terminaux L et R et à un troisième réservoir ne contenant qu'un seul niveau d'énergie ϵ_3 . Chose importante, il n'est pas nécessaire d'ajouter un terme d'interaction à ce modèle pour que la scission du pic Kondo apparaisse. Ainsi, cet effet est un effet sans interaction.

Partons du modèle de liaisons fortes du chapitre 4 dans lequel on pose $U = 0$ et dans lequel on remplace T_3 par un unique site D_3 en lequel on a un niveau d'énergie ϵ_3 . On note toujours t_3 le coefficient de couplage tunnel entre D et D_3 .

Puisque $U = 0$, on se ramène à un problème à une particule dont on peut omettre l'indice de spin.

Le vecteur d'état du système peut s'écrire :

$$|\psi\rangle(k) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \psi_j(k) |j\rangle + \psi_3 |D_3\rangle \quad (\text{H.1})$$

où $|j\rangle$ (j entier naturel) désigne l'état où l'on a un seul électron qui est situé au site j du terminal R si $j > 0$, au site $-j$ du terminal L si $j < 0$ et sur le point quantique D si $j = 0$. $|D_3\rangle$ désigne l'état où l'on a un seul électron qui est localisé sur le point quantique D_3 (l'Hamiltonien libre de D_3 est $H_3 = \epsilon_3 c_3^\dagger c_3$ où c_3 est l'opérateur d'annihilation d'un électron sur D_3).

On considère une onde incidente dans L qui donne lieu à une onde réfléchie dans L et une onde transmise dans R :

$$\text{si } j \leq -1, \psi_j(k) = e^{ikj} + r e^{-ikj}$$

$$si\ j \geq 1, \psi_j(k) = \tau e^{ikj} \quad (H.2)$$

L'étape suivante consiste à écrire l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ et à la projeter sur les états $|-1\rangle$, $|0\rangle$, $|1\rangle$ et $|D_3\rangle$. On obtient alors un système de quatre équations à quatre inconnues $r(k)$, $\psi_0(k)$, $\tau(k)$ et $\psi_{D_3}(k)$. La résolution de ce système est très facile et donne :

$$|\tau|^2 = \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(E - E^{**})^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \quad (H.3)$$

où $E = -2t\cos(k)$ est l'énergie et où l'on a posé :

$$E^{**} = -\cos(k)\frac{t_L^2 + t_R^2}{t} + \epsilon_d + \frac{t_3^2}{E - \epsilon_3} \quad (H.4)$$

et les Γ_α ont l'expression suivante :

$$\Gamma_\alpha = \frac{t_\alpha^2}{t} \sin(k) \quad (H.5)$$

Notons que l'on obtient la même expression pour le taux de transmission que dans le cas où D_3 est absent, à ceci près que ϵ_d est remplacé par $\epsilon_d + \frac{t_3^2}{E - \epsilon_3}$.

La densité locale d'état de D ρ_d s'obtient en identifiant la formule de Meir-Wingreen et celle de Landauer :

$$\rho_d = \frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{4\pi\Gamma_L\Gamma_R} |\tau|^2 = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{(E - E^{**})^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \quad (H.6)$$

On note qu'en $E = \epsilon_3$, E^{**} est infini et donc $\rho_d = 0$.

Les calculs que nous avons fait jusqu'ici supposaient que le niveau d'énergie ϵ_3 est discret. Pour obtenir des résultats plus physiques, il faut tenir compte de la largeur γ de ce niveau d'énergie. Pour cela, on est amené à remplacer le dénominateur $E - \epsilon_3$ de (H.4) par $E - \epsilon_3 + i\gamma$. On obtient alors pour ρ_d l'expression suivante :

$$\rho_d = \frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{4\pi\Gamma_L\Gamma_R} |\tau|^2 = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{(E - E^{***})^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R)^2 + \frac{\gamma^2 t_3^4}{((E - \epsilon_3)^2 + \gamma^2)^2} + \frac{2\gamma t_3^2(\Gamma_L + \Gamma_R)}{(E - \epsilon_3)^2 + \gamma^2}} \quad (H.7)$$

où :

$$E^{***} = -\cos(k)\frac{t_L^2 + t_R^2}{t} + \epsilon_d + \frac{t_3^2(E - \epsilon_3)}{(E - \epsilon_3)^2 + \gamma^2} \quad (H.8)$$

Sur la figure H.1, on a représenté ρ_d pour les valeurs de paramètres suivantes : $t_L = t_R = t_3 = 0.5t = \gamma$, $\epsilon_D = 0$ et $\epsilon_3 = 0$ ou $\epsilon_3 = 1.5$.

On constate que dans le cas à la résonance, c'est-à-dire $\epsilon_3 = 0$, on a bien une séparation du pic Kondo en deux pics.

Dans le cas hors résonance, c'est-à-dire $\epsilon_3 \neq 0$, il n'y a plus qu'un seul pic Kondo à peu près centré en 0.

En conclusion, nous avons montré que la scission du pic Kondo dans le cas à la résonance peut être interprétée sans qu'il soit nécessaire de faire intervenir des interactions

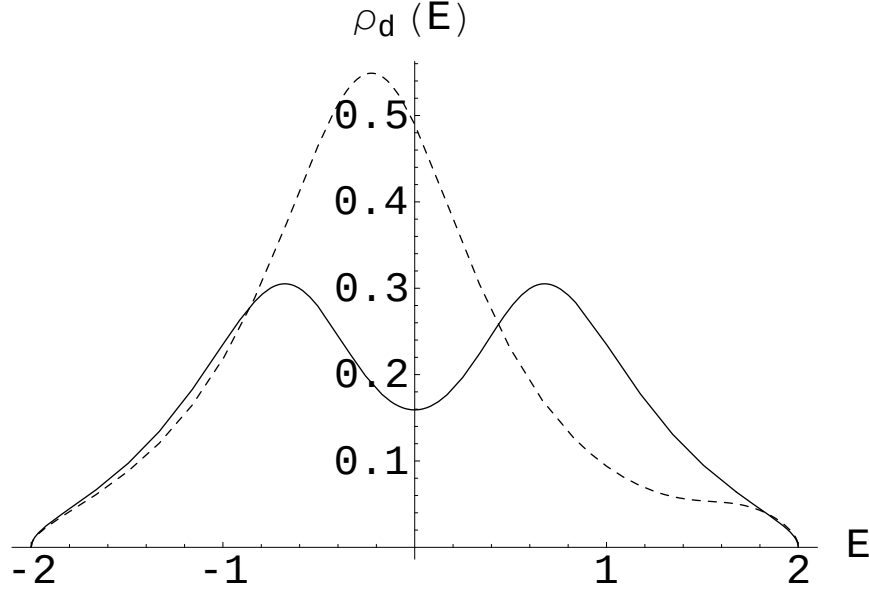


FIG. H.1 – Densité locale d'état de D pour $t_L = t_R = t_3 = 0.5t = \gamma$, $\epsilon_D = 0$ et $\epsilon_3 = 0$ (trait plein) ou $\epsilon_3 = 1.5t$ (pointillés)

dans le problème ($U = 0$).

On peut donner une interprétation de la scission du pic Kondo dans le cadre du modèle de système à deux niveaux. Supposons que les deux niveaux ϵ_D et ϵ_3 soient dégénérés et non couplés. Si l'on branche un couplage t_3 entre ces deux niveaux, il va y avoir levée de la dégénérescence et apparition de deux nouveaux niveaux séparés de $|t_3|$, un niveau liant et un niveau anti-liant. Cette levée de dégénérescence donne une interprétation physique simple de la scission du pic Kondo. Ceci est illustré sur la figure H.2.

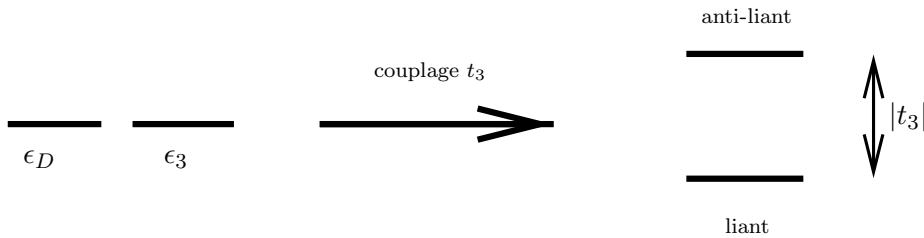


FIG. H.2 – Image moléculaire de la scission du pic Kondo

Bibliographie

- [1] J. Kondo *Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys*, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964)
- [2] Q.Sun et H.Guo *Kondo resonance in a multiprobe quantum dot*, *Phys.Rev.B*, **64**, 153306 (2001)
- [3] E.Lebanon et A.Schiller *Measuring the out-of-equilibrium splitting of the Kondo resonance*, *Phys.Rev.B*, **65**, 035308 (2001)
- [4] Y.Oreg et D.Goldhaber-Gordon *Two-channel Kondo Effect in a Modified Single Electron Transistor*, *Phys.Rev.Lett.* **90**, 136602 (2003)
- [5] M.Pustilnik, L.Borda, L.I.Glazman et J.von Delft *Quantum phase transition in a two-channel-Kondo quantum dot device*, *Phys.Rev.B*, **69**, 115316 (2004)
- [6] S.Florens et A.Rosch *Climbing the Entropy Barrier : Driving the Single-towards the Multichannel Kondo Effect by a Weak Coulomb Blockade of the Leads*, *Phys.Rev.Lett.*, **92**, 216601 (2004)
- [7] S.Datta *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University press
- [8] P.Simon *Effet du nuage d'écran Kondo dans les systèmes mésoscopiques*, mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches
- [9] G.D.Mahan *Many-Particle Physics*, Kluwer Academic/ Plenum Publishers
- [10] Y.Meir et N.S.Wingreen *Landauer Formula for the current through an interacting Electron Region*, *Phys.Rev.Lett.*, **68**, 2512 (1992)
- [11] P.W.Anderson, *Localized Magnetic States in Metals*, *Physical Review*, **124**, 41 (1961)
- [12] J.R. Schrieffer et P.A. Wolff, *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians*, *Physical Review*, **149**, 491 (1966)
- [13] P.Nozières, *The Kondo problem : fancy mathematical techniques versus simple physical ideas*
- [14] L.I.Glazman, *cours de l'école de physique des Houches session Juillet 2004*
- [15] P.Simon et I.Affleck, *Kondo screening cloud in mesoscopic devices*, *Phys.Rev.B*, **68**, 115304 (2003)
- [16] P.Simon et I.Affleck *Finite-Size Effects in Conductance Measurements on Quantum Dots*, *Phys.Rev.Lett.*, **89**, 206602 (2002)

- [17] P.Simon et I.Affleck *Persistent currents through a quantum dot*, *Phys.Rev.B*, **64**, 085308 (2001)
- [18] P.Simon et I.Affleck *Detecting the Kondo Screening Cloud Around a Quantum Dot*, *Phys.Rev.Lett*, **86**, 2854 (2001)
- [19] W.G. van der Wiel, S. De Franceschi, T.Fujisawa, J.M. Elzerman, S. Tarucha, et L.P. Kouwenhoven, *The Kondo Effect in the Unitary Limit*, *Science*, **289**, 2105 (2000)
- [20] D. Goldhaber-Gordon, H.Shtrikman, D.Mahalu, D.Abusch-Magder, U.Meirav, et M.A.Kaster, *Kondo effect in a single-electron transistor*, *Nature*, **391**, 156 (1998)
- [21] W.G.van der Wiel, S.De Franceschi, J.M.Elzerman, T.Fujisawa, S.Tarucha et L.P.Kouwenhoven *Electron transport through double quantum dots*, *Reviews of Modern Physics*, **75**, 1 (2003)
- [22] M.Plihal, D.Langreth et P.Nordlander *Fundamental Time Constant for a Biased Quantum Dot in the Kondo Regime*, *Cond-Mat* 0108525 (2001)
- [23] M.Plihal, D.Langreth et P.Nordlander *Kondo time scales for quantum dots : Response to pulsed bias potentials*, *Phys.Rev.B* **61**, R13341 (2000)
- [24] T.Ng et P.A.Lee, *On-Site Coulomb Repulsion and Resonant Tunneling*, *Phys.Rev.Lett*, **61**, 1768 (1988)
- [25] I.Affleck et A.W.W.Ludwig, *Critical theory of overscreened Kondo fixed points*, *Nuclear Physics B* **360** (1991)
- [26] P.Nozières, *A “Fermi-Liquid” Description of the Kondo Problem at Low Temperatures*, *Journal of Low Temperature Physics*, **17**, 31, 1974
- [27] A.C.Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge university press
- [28] H.C. Manoharan, C.P. Lutz, D.M. Eigler *Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure*, *Nature*, **403**, 512 (2000)
- [29] U.Fano, *Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts*, *Physical Review*, **124**, 1866 (1961)
- [30] Nygard, Jesper, Cobden, David Henry, Lindelof, Poul Erik, *Kondo physics in carbon nanotubes*, *Nature*, **408**, 342 (2000)
- [31] M.Bockrath, D.H. Cobden, P.L. Mc Euen, N.G.Chopra, A.Zettl, A.Thess, R.E. Smalley, *Single-Electron Transport in Ropes of Carbon Nanotubes*, *Science*, **275**, 1922 (1997)
- [32] M. Pustilnik, Y. Avishai, K. Kikain, *Quantum Dots with Even Number of Electrons : Kondo effect in a Finite Magnetic Field*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1756 (2000)
- [33] M. Pustilnik, L.I. Glazman, *Conduction through a Quantum Dot near a Singlet-Triplet Transition*, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2993 (2000)
- [34] W.Liang, M.P.Shores, M.Bockrath, J.R.Long, H.Park *Kondo resonance in a single-molecule transistor*, *Nature*, **417**, 725 (2002)
- [35] B.Reusch, W.Häusler, H.Grabert *Wigner molecules in quantum dots*, *Phys.Rev.B*, **63**, 113313 (2001)

- [36] E.Akkermans et G.Montambaux *Physique mésoscopique des électrons et des photons, CNRS Editions (2004)*
- [37] N.W.Ashcroft et N.D.Mermin *Solid State Physics, Saunders College, Philadelphia (1976)*
- [38] C.Textier *Electronic transport in weakly disordered metals, cours donné à l'école de physique mésoscopique d'Aussois de 2005*
- [39] Y.Imry *Introduction to Mesoscopic Physics, Oxford University Press (1997)*
- [40] I.L Aleiner, P.W. Brouwer, L.I. Glazman *Quantum Effects in Coulomb Blockade, Physics Reports, **358**, 309 (2002)*
- [41] R.Landauer *Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction, IBM J.Res.Dev, **32**, 306 (1988)*
- [42] R.Landauer *Conductance from Transmission : Common Sense Points, Physica Scripta, **T42**, 110 (1992)*
- [43] P.C.Martin et J.Schwinger *Theory of Many-Particle Systems, Physical Review, **115**, 1342 (1959)*
- [44] L.V. Keldysh *Diagram technique for nonequilibrium processes, Soviet Physics JETP, **20**, 1018 (1965)*
- [45] C.Caroli, R.Combescot, P.Nozières, D.Saint-James *Direct calculation of the tunneling current, Journal.Phys.C : Solid State Physics, **4**, 916 (1971)*
- [46] H.Grabert et M.H.Devoret *Single Charge Tunneling. Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures, Kluwer academic/ Plenum Publishers*
- [47] H.Van.Houten, C.W.J.Beenakker et A.A.M. Staring *Coulomb-Blockade Oscillations in Semiconductor Nanostructures, Cond-Mat 0508454 (2005)*
- [48] C.W.J. Beenakker *Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot, Phys.Rev.B, **44**, 1646*
- [49] K.G.Wilson *The renormalization group : Critical phenomena and the Kondo problem, Reviews of Modern Physics, **47**, 773 (1975)*
- [50] N.Andrei *Diagonalization of the Kondo Hamiltonian, Phys.Rev.Lett, **45**, 379 (1980)*
- [51] P.B.Vigman *Exact solution of s-d exchange model at $T = 0$, Soviet-Phys JETP Lett, **31**, 364 (1980)*
- [52] P.Coleman *New approach to the mixed-valence problem, Phys.Rev.B, **29**, 3035 (1984)*
- [53] I.Affleck *Conformal Field Theory Approach to the Kondo Effect, Acta Phys.Polon. **B26** 1869 (1995)*
- [54] Y.Meir, N.S.Wingreen, P.A.Lee *Transport through a Strongly Interacting Electron System : Theory of Periodic Conductance Oscillations, Phys.Rev.Lett, **66**, 3048 (1991)*
- [55] W.B.Thimm, J.Kroha, J.von Delft *Kondo Box : A Magnetic Impurity in an Ultrasmall Metallic Grain, Phys.Rev.Lett, **82**, 2143 (1999)*

- [56] O.Újsághy, A.Zawadowski, B.L.Gyorffy *Spin-Orbit Induced Magnetic Anisotropy for Impurities in Metallic Samples of Reduced Dimensions : Finite Size Dependence in the Kondo Effect*, *Phys.Rev.Lett*, **76**, 2378 (1996)
- [57] P.S. Cornaglia, C.A. Balseiro *Kondo impurities in nanoscopic systems : Confinement-induced regimes*, *Phys.Rev.B*, **66**, 115303 (2002)
- [58] D.Loss et P.Goldbart *Period and amplitude halving in mesoscopic rings with spin*, *Phys.Rev.B*, **43**, 13762
- [59] R.K.Kaul, G.Zaránd, S.Chandrasekharan, D.Ullmo, H.U.Baranger *Spectroscopy of the Kondo Problem in a Box*, *Cond-Mat* 0601274
- [60] Y.Meir, N.S.Wingreen, P.A.Lee *Low-Temperature Transport Through a Quantum Dot : The Anderson Model Out of Equilibrium*, *Phys.Rev.Lett*, **70**, 2601 (1993)
- [61] R.Leturcq, L.Schmid, K.Ensslin, Y.Meir, D.C. Driscoll et A.C. Gossard *Probing the Kondo density of states in a three-terminal quantum ring*, *Phys.Rev.Lett.* **95**, 126603 (2005)
- [62] A.Rosch, J.Kroha, P.Wölfle *Kondo Effect in Quantum Dots at High Voltage : Universality and Scaling*, *Phys.Rev.Lett*, **87**, 156802 (2001)
- [63] A.Rosch, J.Paaske, J.Kroha et P.Wölfle *Nonequilibrium Transport through a Kondo Dot in a Magnetic Field : Perturbation Theory and Poor Man's Scaling*, *Phys.Rev.Lett*, **90**, 076804 (2003)
- [64] P.Simon, R.López, Y.Oreg *Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida and Magnetic-Field Interactions in Coupled Kondo Quantum Dots*, *Phys.Rev.Lett.* **94**, 086602 (2005)
- [65] A.Kaminski, Y.V.Nazarov, L.I.Glazman *Suppression of the Kondo Effect in a Quantum Dot by External Irradiation*, *Phys.Rev.Lett*, **83**, 384 (1999)
- [66] A.Kaminski, Y.V.Nazarov, L.I.Glazman *Universality of the Kondo effect in a quantum dot out of equilibrium*, *Phys.Rev.B*, **62**, 8154 (2000)
- [67] R.Held, T.Vancura, T.Heinzel, K.Ensslin, M.Holland, W.Wegscheider *In-plane gates and nanostructures fabricated by direct oxidation of semiconductor heterostructures with an atomic force microscope*, *Appl.Phys.Lett* **73** 262 (1998)
- [68] E.Sorensen, I.Affleck *Kondo Screening Cloud Around a Quantum Dot : Large-Scale Numerical Results*, *Phys.Rev.Lett*, **94** 86601 (2005)
- [69] N.W.Ashcroft, N.D.Mermin *Solid state physics*, Saunders College Publishing
- [70] J.M.Ziman *Principles of the theory of solids*, Cambridge at the university press (1965)
- [71] L.Kouwenhoven, L.Glazman *Revival of the Kondo effect*, *Physics World*, **14**, 33
- [72] S.Camalet, J.Schrieffer, P.Degiovanni, F.Delduc *Quantum impurity approach to a coupled qubit problem*, *Europhys. Lett.*, **68**, 27 (2004)
- [73] J.Gan *Solution of the two-impurity Kondo model : Critical point, Fermi-liquid phase, and crossover*, *Phys.Rev.B* **51**, 8287 (1995)
- [74] P.Simon, J.Salomez, D.Feinberg *Transport spectroscopy of a Kondo quantum dot coupled to a finite size grain*, *Phys.Rev.B* **73**, 205325 (2006)