HAL
open science

Etudes des effets de taille finie et de l'écrantage causé par une pointe de STM dans les liquides de Lüttinger

Marine Guigou

To cite this version:

Marine Guigou. Etudes des effets de taille finie et de l'écrantage causé par une pointe de STM dans les liquides de Lüttinger. Matière Condensée [cond-mat]. Université de la Méditerranée - Aix-Marseille II, 2009. Français. NNT : . tel-00406336v2

HAL Id: tel-00406336

https://theses.hal.science/tel-00406336v2

Submitted on 25 Jul 2009

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

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

Université Aix-Marseille II
Faculté des sciences de Luminy
Centre de Physique Théorique - UMR 6207

Thèse

présentée en première version en vu d'obtenir le grade de Docteur, spécialité « Physique Théorique »

par

Marine Guigou

Etudes des effets de taille finie et de l'écrantage causé par une pointe de STM dans les liquides de Lüttinger

Thèse soutenue le 19 juin 2009 devant le jury composé de :

Mme	Mireille Lavagna (Rapporteure)
Mme	Adeline Crépieux (Directrice de thèse)
M.	Bertrand Reulet (Rapporteur)
M.	Hermann Grabert (Président)
M.	Thierry Martin (Examinateur)

À ma mère.

Remerciements

Ces pages, blanches au moment où je commence à écrire, sont l'occasion de remercier les personnes qui, d'une manière ou d'une autre, sont entrées dans ma vie, y sont restées ou non, mais qui, toutes à leur façon, m'ont apportées un bout de lumière.

Alors, je tiens à te remercier en tout premier lieu, Adeline Crépieux. Merci de m'avoir acceptée en thèse sous ta direction. Si le doctorat est comme l'arrivée dans un nouveau monde, celui de la recherche, merci de m'avoir aidé dans mes premiers pas. Et j'avoue qu'avec mon caractère de cochon et mon goût prononçé pour la bouderie, ça n'a pas du être de tout repos. D'autant plus que j'étais ta première doctorante.

Merci surtout d'avoir, avec rigueur et patience, permis à la jeune étudiante d'il y a trois ans de confirmer son appétit pour la recherche, d'avoir écouté sans hurler les explications scientifiques parfois foireuses, merci de m'avoir laisser chuter quand cela était nécessaire. Je souhaite à n'importe quel étudiant d'avoir une encadrante autant présente, optimiste et capable de se remettre en question comme tu l'as fait avec moi.

Mes remerciements s'adressent ensuite à Thierry Martin, qui est à l'origine de mon goût pour la matière condensée. En 2005, il me propose un sujet de stage de Master I, plus qu'intéressant, l'électronique moléculaire. Et c'est déjà trop tard, je veux continuer dans ce domaine. Alors, je remercie Thierry pour deux choses, d'une part, m'avoir fait découvrir la matière condensée et d'autre part, m'avoir aiguiller vers Adeline et un sujet de thèse passionnant après mon Master II au Cinam.

Je remercie les membres du jury, Mireille Lavagna, Bertrand Reulet et Herman Grabert, d'avoir lu avec attention mon manuscrit et de m'avoir questionné et conseillé sur son fond et sur sa forme.

Merci également aux membres de l'équipe NANO, Thibault Jonkheere et Pierre Devillard pour leur disponibilité et leur suggestions sur la présentation de mon travail.

Pour ces trois années passées au sein du Centre de Physique Théorique, je remercie

Marc Knecht ainsi que chacun des personnels ITA pour leur professionnalisme, leur gentillesse et leur bonne humeur : Vincent Bayle, Marie-Thérèse Donel, Véronique Leclercq-Ortal (je n'oublie pas le cours de dessin du samedi ! !), Karine Lesage, Pascale Lapalud, Marie-Hélène Monjol, Elisabeth Bernardo et tous ceux que j'ai également eu plaisir à croiser et qui m'ont rendu bien des services.

Je remercie les doctorants que j'ai eu plaisir à côtoyer durant ces trois années, ceux qui ont vogués vers d'autres lieux : Marjorie, Than, Yvon (le triangle des bermudes, c'est ça ?), Benjamin. Un grand merci à Romain pour nos discussions plus ou moins oisives ainsi que nos franches rigolades (attention, une porte peut en cacher une autre ! !) et à Thomas pour son sens aigu du partage de liens internet plus bizarres les uns que les autres. Et puis, d'un point de vue nicotinique, merci à Jean-Philippe et Gregory pour nos pauses *guigou*, qui ont été l'occasion de gros délires (i.e. *john doe*, mort ou vivant ?). Merci également à tous mes co-bureaux pour la bonne humeur ambiante. Je tiens particulierement à remercier à Jean-Philippe (on n'a toujours pas fini *les justes* !), Diane, Cédric, Carina, Lionel, Adeline, d'avoir partagé bureaux, discussions, fous rires, disputes, Irish Coffee (Diane, prends moi une paille, s'il te plaît !), années luminyennes, vacances, voyages (mais où est passé le Pompon ?), rêves, espoir, désespoir, illusions . . .

Et puis merci aux petits nouveaux : Manu, pour avoir pris la relève du rendez-vous des thésards avec mordant, Denis (Ponchour ! !), et tous ceux que j'oublie.

Un merci tout particulier à Rémi pour son enthousiasme, son soutien inconditionnel et son sang froid. Merci d'avoir été là, toutes ces années, sans faillir.

Ma famille. Merci à vous tous. Merci à ceux qui ont pu se déplacer pour assister à ma soutenance, cela m'a aidé de vous savoir près de moi ce jour-là, pour partager, tout simplement. Merci à ceux qui n'ont pu se déplacer, car vous étiez également là en pensée et c'était suffisant. Et évidemment, merci à mes parents, à ma mère pour son amour et son soutien, et tellement d'autres choses encore . . .

Enfin, j'adresse un grand merci à Valérie, Julien et Francis ainsi qu'à Pascale d'être venue à la soutenance et pour leur aide quant à la préparation du pôt. Merci surtout à Janine d'avoir préparé pendant des semaines le pôt lui-même (et j'avais dit pour 50 personnes, pas 80, hein ! !).

Table des matières

Table des matières vii

Préface 1

1 Propriétés des conducteurs mésoscopiques 5

1.1 Limite de la physique classique . . . 7

1.2 Le régime mésoscopique . . . 7

1.2.1 Echelles mésoscopiques . . . 8

1.3 Exemples d'effets quantiques dans le régime mésoscopique . . . 10

1.3.1 Effet Aharonov-Bohm . . . 10

1.3.2 Localisation . . . 11

1.3.3 Blocage de Coulomb . . . 14

1.4 Théorie de conduction dans les métaux . . . 17

1.4.1 Théorie des électrons de conduction . . . 17

1.4.2 Prise en compte des interactions . . . 19

1.4.3 Approximation de Hartree-Fock . . . 20

1.4.4 Effet d'écrantage dans les métaux . . . 21

1.5 Théorie des liquides de Fermi . . . 23

1.5.1 Concept de *quasi-particule* . . . 23

1.5.2 Propriétés à l'équilibre . . . 24

1.6 Théorie de la diffusion . . . 27

1.6.1 Courant et conductance . . . 28

1.7 Bruit et corrélations croisées . . . 35

1.7.1 Définition des corrélations de courant . . . 36

1.7.2 Bruit à l'équilibre . . . 37

1.7.3 Bruit hors équilibre : limite classique . . . 38

1.7.4 Bruit hors équilibre : limite quantique . . . 39

1.7.5 Dépendance du bruit en fréquence . . . 44

1.7.6 Discussion sur la convention du bruit . . . 46

Conclusion . . . 49

2 La théorie des liquides de Lüttinger 51
2.1 Linéarisation du spectre 53
2.2 Bosonisation 56
2.2.1 Introduction de nouveaux champs bosoniques 59
2.3 Expression bosonisée du hamiltonien du système 60
2.3.1 Hamiltonien cinétique 60
2.3.2 Hamiltonien d'interaction 60
2.4 Expression bosonisée du lagrangien et de l'action 63
2.5 Exemples de propriétés d'un liquide de Lüttinger 64
2.5.1 Propriétés thermodynamiques 64
Conclusion 66

3 Transport hors équilibre 67
3.1 Fonctions de corrélations 69
3.1.1 De l'intérêt des fonctions de corrélations retardées 69
3.2 Fonctions de Green hors équilibre 69
3.2.1 Théorie des perturbations usuelle 70
3.2.2 Formalisme de Keldysh 72
3.2.3 Expression des fonctions de Green fermioniques et bosoniques 75
3.3 Propriétés spectrales d'un liquide de Lüttinger 77
3.3.1 La densité d'états du fil quantique 77
3.3.2 La fonction spectrale 79
3.3.3 Fonctions de corrélations à n-particules 86
Conclusion 87

4 Transport dans un nanotube de carbone connecté à deux électrodes 89
4.1 Présentation des nanotubes de carbone 91
4.1.1 Méthodes de fabrication 91
4.1.2 Propriétés électroniques d'un nanotube de carbone 91
4.1.3 Dispositifs expérimentaux et étude des propriétés de transport 93
4.1.4 Présentation du modèle 95
4.2 Liquides de Lüttinger dans les nanotubes de carbone 96
4.2.1 Théorie effective à basse énergie 97
4.2.2 Propriétés de transport d'un nanotube de carbone 100
4.2.3 Cas d'un nanotube de longueur infinie 103
4.3 Propriétés de transport dans un nanotube connecté à des électrodes 108
4.3.1 Modèle 108
4.3.2 Courant moyen et corrélations de courant à fréquence nulle 109
4.3.3 Analyse des résultats 110

4.3.4 Corrélations courant-courant à fréquence finie 113
4.4 Transport photo-assisté 117
Conclusion 121

5 Effets de l'écrantage d'un fil quantique causé par la pointe d'un STM 123
5.1 Présentation du système 125
5.1.1 Rappels 125
5.1.2 Modèle 126
5.2 Equations de Dyson des fonctions de Green bosoniques 127
5.2.1 Choix de la forme du potentiel électrostatique 131
5.2.2 Application aux équations de Dyson 132
5.3 Propriétés spectrales du fil quantique 133
5.3.1 Fonction spectrale en présence d'écrantage 133
5.3.2 Densité d'états 138
5.4 Propriétés de transport du fil quantique 144
5.4.1 Courant tunnel 145
5.4.2 Bruit non symétrisé 147
5.4.3 Conductance 152
Conclusion 153

Perspectives 157

A Fonctions de Green bosoniques 159
A.1 Cas d'un fil de longueur infinie 159
A.2 Cas d'un nanotube de carbone de longueur L 161

B Calcul de la fonction spectrale 165

C Calcul du courant moyen et des corrélations de courant 171
C.1 Courant moyen 171
C.2 Corrélations de courant 173
C.2.1 Calcul des facteurs $\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(\Omega)$ et $\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(x(x'),\Omega)$ 173
C.2.2 Corrélations de courant à fréquence nulle 175
C.2.3 Corrélations de courant à fréquence finie 176

D Equations de Dyson en présence d'écrantage 181
D.1 Calcul des équations de Dyson 181

E Fonctions de Green bosoniques en fréquence 187

F Fonctions de Green bosoniques en présence d'écrantage 189

F.1 Fonctions de Green bosoniques du fil en présence d'écrantage . . . 189
F.2 Fonctions de Green bosoniques de la pointe en présence d'écrantage 191
F.3 Fonctions de Green bosoniques mixtes 192

Bibliographie **195**

Introduction

La physique mésoscopique est une branche de la physique de la matière condensée qui traite de systèmes à l'interface entre mondes microscopique et macroscopique et dont la description relève à la fois de la physique quantique et de la mécanique statistique. Ce double traitement est nécessaire tant les propriétés d'un solide sont liées à celles, quantiques, de ses constituants élementaires : électrons, ions, atomes, etc ...

Le premier chapitre de cette thèse est dévolu à l'introduction des concepts fondamentaux de la physique mésoscopique.

On définit un échantillon mésoscopique comme étant un système dont les dimensions sont inférieures à la longueur de cohérence de phase des électrons. Celle-ci correspond à la longueur moyenne sur laquelle la phase de la fonction d'onde électronique est définie. Afin d'observer les effets d'interférence liés à la nature ondulatoire des électrons, les dimensions du système doivent être faibles. Il faut attendre les années 80 et le développement de la nano-fabrication et de la cryogénie pour pouvoir réaliser des conducteurs de taille inférieure à la longueur de cohérence de phase. Depuis, on observe des manifestations de la cohérence quantique (blocage de Coulomb, localisation forte, fluctuations de la conductance) dans de nombreux systèmes expérimentaux.

Le premier modèle décrivant le transport dans des systèmes mésoscopiques est généralement attribué à Landauer. Il propose une méthode simple pour calculer le courant moyen et la conductance dans un fil connecté de part et d'autre à des réservoirs [1], [2]. Basé sur une approche de diffusion, le modèle de Landauer décrit le transport en termes de transmission des ondes électroniques d'une électrode à l'autre. Dans les années 80, des expériences ont confirmées ces prédictions théoriques, notamment par la mise en évidence de la quantification de la conductance, qui augmente par palier de hauteur $2e^2/h$ [3].

Cette thèse aborde plusieurs aspects fondamentaux de la physique mésoscopique. Plus particulièrement, elle porte sur l'étude du transport dans des systèmes unidimensionnels. Un conducteur est considéré de dimension 1 lorsque les électrons se propagent suivant une seule direction. Le confinement des particules peut provenir de la géométrie du système, comme dans les nanotubes de carbone, ou de l'application d'un champ extérieur comme c'est le cas pour les états de bords de l'effet Hall quantique fractionnaire.

L'étude du transport ne se limite pas à la détermination du courant moyen et de la conductance qui sont associées au caractère moyen du transport. En effet, l'étude du bruit, *i.e.* des fluctuations temporelles du courant autour de sa valeur moyenne, permet de mettre en évidence la nature corpusculaire des électrons. L'analyse du comportement du bruit donne ainsi accès à de précieuses informations sur la physique des systèmes étudiés.

Des travaux théoriques et expérimentaux ont permis le développement de cette physique du bruit. Un des résultats fondamentaux pointant la nature corpusculaire des particules, est la relation de Schottky [4]. Celle-ci montre que le bruit, généré par une source de particules indépendantes, est proportionnel au courant moyen et à la charge effective des porteurs de courant : $S = 2e^\star \langle I \rangle$. Depuis, cette formule a été vérifiée expérimentalement dans divers systèmes mésoscopiques. Par exemple, dans des jonctions entre un métal normal et un supraconducteur, les mesures simultanées du courant et du bruit ont mis en évidence la charge $e^\star = 2e$ des paires de Cooper [5], [6], [7], [8]. La charge fractionnaire des quasi-particules sur les états de bords dans le régime de l'effet Hall quantique fractionnaire a également été mise en évidence [9], [10], [11]. D'autre part, des études théoriques ont mis en lumière la charge anormale des excitations dans les systèmes unidimensionnels [12], [13], [14].

Le bruit a ainsi fait l'objet d'études théoriques et expérimentales, qui montrent l'influence du protocole expérimental sur sa mesure [15], [16], [17]. De plus, ces prédictions théoriques dépendent de la définition choisie pour le bruit [18], [19], [20].

Une description réaliste et une meilleure compréhension des divers phénomènes apparaissant dans les conducteurs mésoscopiques nécessitent de prendre en compte les interactions électron-électron. Mais inclure ce type de couplage peut s'avérer être une tâche délicate, impliquant des calculs perturbatifs complexes.

En introduisant le concept de quasi-particule, Landau a développé une théorie simplifiant en partie ce problème [21]. Elle est appelée théorie des liquides de Fermi et s'appuie sur les principes fondamentaux de la théorie de conduction des métaux, en ramenant la description d'un conducteur à N corps en interaction à celle d'un système de quasi-particules libres. Malgré sa grande efficacité pour traiter les systèmes à deux ou trois dimensions, cette théorie ne fournit pas une description adéquate des phénomènes apparaissant dans les systèmes unidimensionnels : séparation spin-charge, distortion de Peierls, etc ...

Un nouveau paradigme doit alors être introduit : la théorie des liquides de Tomonaga-Lüttinger [22], [23], traitée dans le deuxième chapitre. Dans un système d'électrons fortement corrélés, cette théorie décrit les excitations comme des bosons, même si leur constituants élémentaires sont de nature fermionique. Les modèles issus de cette théorie sont d'une grande importance pour décrire les phénomènes typiques

des systèmes unidimensionnels, dans lesquels les corrélations jouent un rôle fondamental. Par ailleurs, les prédictions de cette théorie sont corroborées par des expériences mettant en jeu des fils quantiques [24] et des nanotubes de carbone [25].

Le transport électronique est un outil privilégié pour étudier les propriétés de cohérence quantique. La circulation de porteurs de courant à travers un système nécessite le maintien d'une différence de potentiel à ses bornes. Le traitement de situations où le déséquilibre est important requiert alors l'utilisation d'un formalisme de thermodynamique introduit et développé par Keldysh [26]. Le troisième chapitre de cette thèse présente ce formalisme qui permet une réécriture de la théorie des perturbations usuelle pour des systèmes hors équilibre. Une fois introduits les définitions et les outils que son utilisation nécessite, nous l'appliquerons à un fil quantique de longueur infinie, mettant en évidence l'importance du comportement en loi de puissance des grandeurs caractéristiques d'un liquide de Lüttinger.

Le quatrième chapitre présente l'étude des effets de taille finie dans un conducteur unidimensionnel. Le système complet auquel nous nous intéressons alors est constitué d'une pointe de STM (Scanning Tunneling Microscope) qui, par l'application d'une tension, permet le transfert tunnel d'électrons dans un nanotube de carbone, lequel est connecté à chaque extrémité à une électrode. En utilisant le formalisme de Keldysh, les propriétés de transport sont étudiées, grâce aux calculs du courant moyen et des corrélations de courant. L'investigation des effets de taille finie est faite via l'étude du comportement de ces quantités physiques en fonction de la longueur du nanotube de carbone.

Enfin et dans le but de décrire un système réaliste, le cinquième chapitre est dévolu à l'étude des effets de l'écrantage causé par la proximité de la pointe de STM, sur les propriétés électroniques d'un fil quantique de longueur infinie. Deux points sont développés. Le premier concerne l'influence de cette proximité sur les propriétés spectrales du conducteur unidimensionnel et le deuxième porte sur les conséquences de cet écrantage sur les propriétés hors équilibre à travers l'étude du transport tunnel.

1

Propriétés des conducteurs mésoscopiques

Sommaire

1.1 Limite de la physique classique 7
1.2 Le régime mésoscopique 7
1.2.1 Echelles mésoscopiques 8
1.3 Exemples d'effets quantiques dans le régime mésoscopique 10
1.3.1 Effet Aharonov-Bohm 10
1.3.2 Localisation 11
1.3.3 Blocage de Coulomb 14
1.4 Théorie de conduction dans les métaux 17
1.4.1 Théorie des électrons de conduction 17
1.4.2 Prise en compte des interactions 19
1.4.3 Approximation de Hartree-Fock 20
1.4.4 Effet d'écrantage dans les métaux 21
1.5 Théorie des liquides de Fermi 23
1.5.1 Concept de *quasi-particule* 23
1.5.2 Propriétés à l'équilibre 24
1.6 Théorie de la diffusion 27
1.6.1 Courant et conductance 28
1.7 Bruit et corrélations croisées 35
1.7.1 Définition des corrélations de courant 36
1.7.2 Bruit à l'équilibre 37
1.7.3 Bruit hors équilibre : limite classique 38
1.7.4 Bruit hors équilibre : limite quantique 39
1.7.5 Dépendance du bruit en fréquence 44

1.7.6 Discussion sur la convention du bruit 46
Conclusion 49

La fin du XXe siècle a vu l'avènement des nanostructures électroniques : semi-conducteurs, matériaux magnétiques mais également biomatériaux et macromolécules. Ces systèmes, dont la taille est de plus en plus réduite, présentent, à basse température, un régime de transport mésoscopique dans lequel les nombreux effets quantiques sont essentiels pour en expliquer le comportement.

La physique mésoscopique, qui s'intéresse à ces systèmes, s'est développée d'une part, grâce aux progrès réalisés dans la fabrication de ces nanostructures, *i.e.* la lithographie électronique, et d'autre part, grâce à la cryogénie permettant de descendre à des températures suffisamment basses pour explorer, dans de bonnes conditions, le comportement de ces nano-objets.

1.1 Limite de la physique classique

Le courant électrique circulant à travers un conducteur métallique obéit à la loi d'Ohm : $I = GV$, où G est la conductance, autrement dit la capacité d'un matériau à laisser circuler des électrons en son sein, et V la différence de potentiel qui lui est appliquée. Tout conducteur dont le transport est linéaire est par conséquent appelé conducteur ohmique. D'un point de vue local, cette loi exprime la proportionnalié entre la densité de courant $\vec{j}$ et le champ électrique $\vec{E}$, via la conductivité électrique σ, reliée à la conductance à travers la relation :

$$G = \sigma \frac{S}{L}, \tag{1.1}$$

où L est la longueur du conducteur et S sa section. La conductivité électrique dépend des propriétés du matériau et est une quantité définie dans le modèle de Drüde par [27] :

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m}, \tag{1.2}$$

n étant la densité de charge et τ le temps moyen entre deux collisions élastiques.

Le comportement de la formule (1.1), lorsque la longueur L diminue, pose la question suivante. La réduction croissante de la taille du conducteur métallique entraine t-elle une augmentation infinie de la conductance ? Les premières expériences mesurant celle-ci infirment cette prédiction et mettent en évidence sa quantification [3]. La relation (1.1) n'est donc valide que pour des conducteurs macroscopiques.

Les propriétés d'un matériau sont souvent liées à sa structure cristalline, autrement dit aux électrons qui le composent, et à cette échelle microscopique, la mécanique quantique gouverne la physique d'un système. Un des piliers de cette théorie est la dualité onde-corpuscule et la mise en évidence de l'aspect ondulatoire des photons a été démontré dans la célèbre expérience de T. Young. La transposition de cette expérience au cas des électrons est récente [28] et a mis en évidence leur nature ondulatoire malgré une détection basée sur leur caractère corpusculaire. Certes, les figures d'interférences ainsi obtenues sont observées dans le vide mais le caractère ondulatoire des électrons peut se manifester également dans des conducteurs sous certaines conditions.

1.2 Le régime mésoscopique

Le régime mésoscopique, du grec *meso* qui signifie *au milieu*, est un régime intermédiaire entre le monde quantique des systèmes microscopiques et le monde classique des structures macroscopiques et nécessite un double traitement. En effet, il s'agit de

traiter de systèmes constitués d'un très grand nombre d'atomes mais dont le comportement est fortement influencé par des effets d'interférences quantiques. La physique mésoscopique est donc à l'interface des physiques statistique et quantique.

1.2.1 Echelles mésoscopiques

La longueur caractéristique de la physique mésoscopique est la longueur de cohérence de phase l_ϕ qui correspond à la distance maximale sur laquelle un électron se propage de manière cohérente. Il est alors décrit, comme le stipule la mécanique quantique, par une amplitude de probabilité se propageant telle une onde avec la capacité d'interférer. L'évolution de la phase est décrite par l'équation de Schrödinger.

Il existe de nombreux évènements provoquant la perte de cohérence de phase d'un électron. Les processus inélastiques de diffusion, comme les collisions d'un électron avec un autre électron ou avec un phonon, en font parties. Par ailleurs, ils donnent lieu à un transfert d'énergie entre l'électron et l'*environnement* qui laisse des indices sur le passage de la particule observables expérimentalement.

En revanche, la conservation de l'énergie lors d'une collision n'implique pas automatiquement la conservation de la cohérence de phase. Par exemple, le choc d'un électron avec une impureté du réseau cristallin est un processus élastique. Mais l'électron peut voir son spin renversé et sa phase modifiée, lorsque le centre diffuseur est magnétique.

Les effets quantiques propres au régime mésoscopique apparaissent dès lors que les échelles de longueur du système deviennent plus petites que la longueur de cohérence de phase l_ϕ, en particulier la longueur L de l'échantillon doit satisfaire l'inégalité :

$$L \lesssim l_\phi. \tag{1.3}$$

La fréquence des processus de diffusion par des phonons dépend de la température et de la taille de l'échantillon [29]. Par exemple, à température ambiante, la mobilité des électrons est fortement réduite par ces processus, mais dès lors que la température diminue, le couplage électron-phonon décroît rapidement et le régime de diffusion électron-électron devient dominant [27]. La longueur de cohérence de phase est alors égale à la longueur entre deux chocs électron-électron : $l_\phi = l_{e-e}$. En conséquence, la réalisation de la condition (1.3) nécessite de considérer des systèmes de longueur de l'ordre du micromètre et à des températures très basses (de l'odre de 0.1K). Par exemple, dans des semi-conducteurs, la longueur de cohérence dépasse la dizaine de micromètres alors que dans les métaux, elle vaut quelques micromètres.

Le régime mésoscopique est également caractérisé par deux autres échelles de longueur. La plus petite est la longueur d'onde de Fermi $\lambda_F = h/\sqrt{2mE_F}$. Il s'agit de la

longueur d'onde de De Broglie des électrons de conduction. Elle est de quelques angströms dans les métaux et peut atteindre 30nm dans certains semi-conducteurs.

L'autre échelle de longueur est le libre parcours moyen l_e. Il s'agit de la distance que parcourt un électron entre deux chocs élastiques avec des centres diffuseurs statiques qui vont modifier de manière aléatoire sa vitesse et sa direction de propagation. Elle dépend donc fortement du désordre.

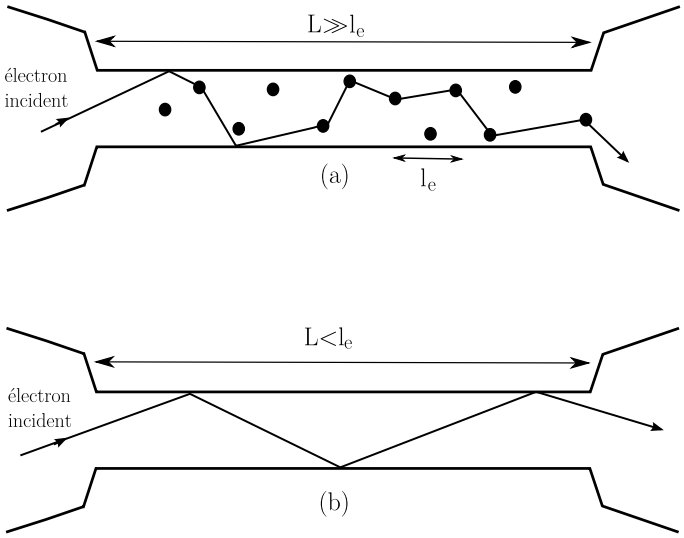


FIGURE 1.1 – *Schéma d'un conducteur : (a) diffusif et (b) balistique.*

A basse température, lorsque les collisions électron-électron dominent, le libre parcours moyen est très inférieur à la longueur de cohérence de phase : $l_e \ll l_\phi$. La propagation d'un électron à travers un conducteur dans le régime mésoscopique dépend alors de la taille de l'échantillon L et du désordre qui y règne. La condition $l_e > L$ correspond au régime balistique où l'électron traverse sans collisions le conducteur et la condition $l_e \ll L$ équivaut au régime diffusif dans lequel le nombre de chocs subis par l'électron est important.

Beaucoup de phénomènes quantiques sont la conséquence de la cohérence de phase des fonctions d'ondes électroniques dans le régime mésoscopique. La section suivante présente certains de ces effets dans des systèmes de faible dimension tel que des gaz d'électrons bidimensionnels, des fils quantiques ou encore des points quantiques.

1.3 Exemples d'effets quantiques dans le régime mésoscopique

1.3.1 Effet Aharonov-Bohm

Les interférences quantiques se manifestant à travers l'effet dit Aharonov-Bohm, mettent en jeu la sensibilité de la fonction d'onde des particules chargées au potentiel vecteur du champ magnétique.

Le principe, décrit par la figure (1.2), est le suivant : une source émet des particules chargées qui peuvent passer à travers deux fentes et interférer, comme dans une expérience de type fentes de Young. A ce système est ajouté un solénoïde placé derrière les fentes dans lequel un champ magnétique **B** est créé [30].

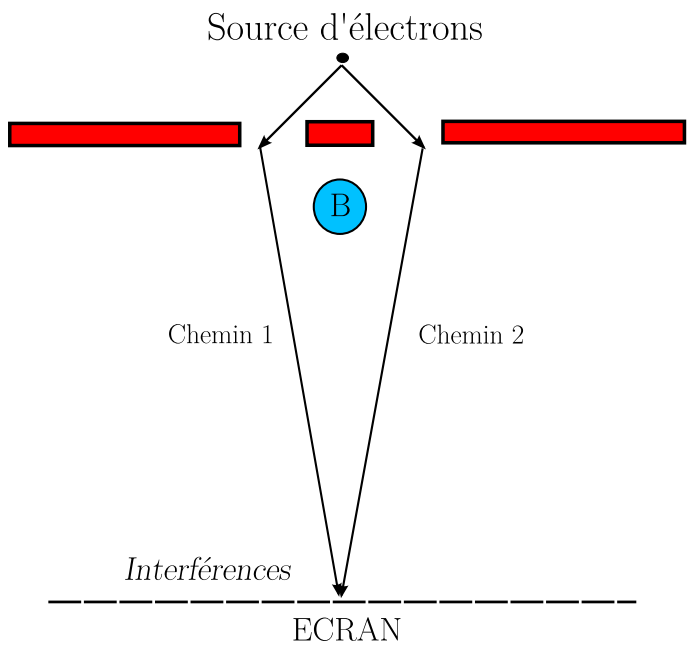


Figure 1.2 – *Expérience de Aharonov-Bohm.*

La figure d'interférence obtenu sur l'écran se trouve alors être modifiée par la présence de ce champ d'intensité variable confiné dans le solénoïde, bien que les trajets des deux faisceaux soient identiques à ceux en l'absence de champ. Ainsi, à la différence de phase géométrique ϕ_0 créant les interférences *nues*, il faut ajouter le déphasage entre les paquets d'onde dû à la présence du champ magnétique **B**, qui est défini, en utilisant le théorème de Stokes, par :

$$\phi_B = \frac{e}{\hbar}\oint d\mathbf{s}\mathbf{A} = \frac{e}{\hbar}\Phi, \tag{1.4}$$

où **A** est le potentiel vecteur et Φ le quantum de flux à l'intérieur du solénoïde.

Changer la valeur de **B** conduit à modifier de manière périodique l'intensité de l'onde perçue sur l'écran. Ainsi, la conductance est proportionnelle à $\cos(\phi_0 + \phi_B)$ et des oscillations périodiques en h/e sont observables dans son comportement en fonction du flux magnétique.

Ce type d'expériences a notamment été réalisé dans des structures contenant des anneaux métalliques [31], avec une longueur de cohérence de phase l_ϕ plus grande que la circonférence de l'anneau. Les interférences entre électrons passant par chaque bras produisent ces oscillations. Elles ont également été observées dans des nanotubes de carbone [32]. La taille et la géométrie des systèmes jouent un rôle important dans le comportement des oscillations et font l'objet de plusieurs études [33], [34].

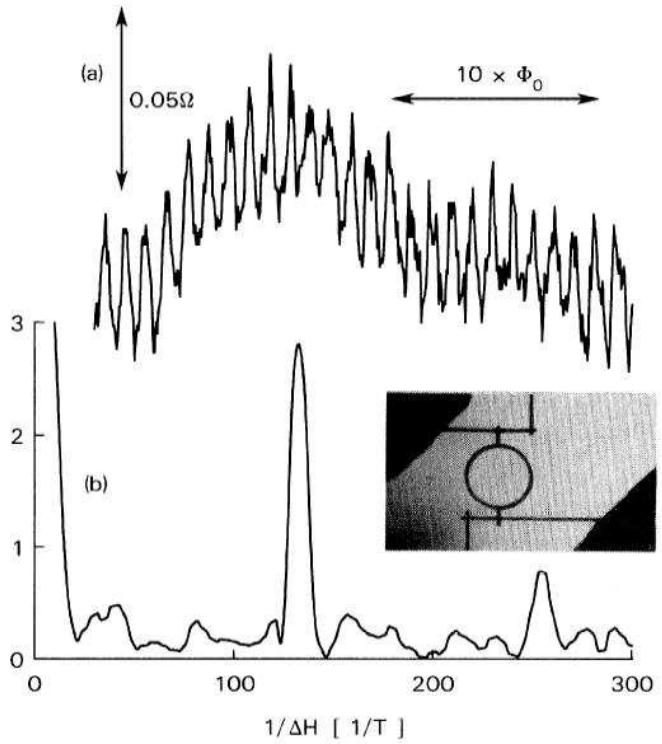


FIGURE 1.3 – *Observation des oscillations de Aharonov-Bohm dans le comportement de la conductance dans des anneaux métalliques. (a) montre la conductance en fonction du champ magnétique* **B** *et (b) sa transformée de Fourier, mettant en évidence la périodicité de ces oscillations [31].*

1.3.2 Localisation

La notion de localisation a été introduite pour la première fois en physique mésoscopique dans un article de P.W. Anderson [35], dans lequel il construit un modèle simple pour les métaux désordonnés afin d'expliquer la transition métal-isolant d'un conducteur à partir d'une certaine valeur du désordre. Il s'agit d'un phénomène pure-

ment quantique, dans lequel la propagation des ondes électroniques forme un réseau d'interférences complexe dues à la présence d'impuretés. Le modèle d'Anderson décrit, à l'origine, un système d'électron mais il est généralisable à tout type d'onde : acoustique, électromagnétique .... D'ailleurs, ces ondes *classiques* sont plus faciles à manipuler expérimentalement et ne nécessitent pas que le système soit à basse température pour observer des interférences [36], [37].

En physique mésoscopique, cette approche a permis la découverte de phénomènes tels que la localisation forte, les fluctuations universelles de conductance ou encore la rétrodiffusion causée par la présence d'une impureté dans un fil quantique. Suivant le titre de l'article de Anderson, la localisation peut être définie comme l'absence de diffusion.

Localisation forte

Une description classique de la dynamique des électrons dans un conducteur en présence de désordre permet d'expliquer pourquoi les métaux ont une conductance non nulle. Les électrons qui sont diffusés par des impuretés rebondissent sur ces centres diffuseurs à la manière des boules d'un jeu de billard.

En revanche, à basse température, la nature ondulatoire des électrons est à prendre en considération et les interférences ainsi provoquées dominent le transport.

Lorsque le libre parcours moyen l_e est comparable à la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$ de l'onde électronique, le transport est fortement réduit à cause des interférences entre les ondes multiplement diffusées. Les électrons peuvent alors être piégés, même en l'absence de puit de potentiel, et leur état est localisé. De plus, la théorie d'échelle de la localisation, basée sur la dépendance de la conductance en fonction de la taille du système, fournit un paramètre codant l'effet du désordre, donné par [38] :

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L}. \tag{1.5}$$

L est la longueur de l'échantillon et g est la conductance en unité de e^2/h. Le comportement de $\beta(g)$ est illustré sur la figure (1.4).

Deux régimes sont discernables. Lorsque $g \gg 1$, le désordre est faible et la relation (1.1) est vérifiée, les électrons sont libres de se déplacer sur le réseau. Le paramètre β, qui dépend de la dimension d du système, vaut alors $d - 2 - a/g$, où le terme a/g est une correction introduite à cause des effets de localisation faible.

En revanche, la condition $g \ll 1$ correspond au régime localisé (désordre important) et la conductance décroît exponentiellement avec l'inverse de la longueur, le transport

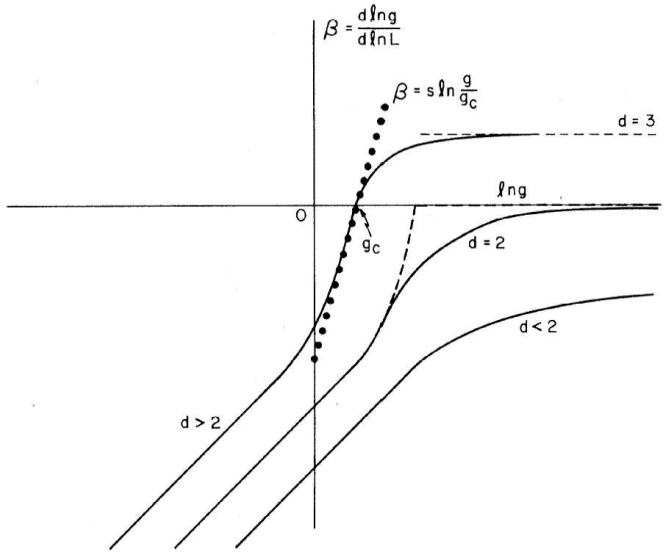


FIGURE 1.4 – *La fonction d'échelle $\beta(g)$ est représentée pour les dimensions* 1, 2 *et* 3 *[38].*

n'existant alors que via l'effet tunnel entre les états localisés. Le paramètre β est alors égal à $\ln g$ à une constante près.

Pour un système d'électrons sans interaction, de dimension inférieure ou égale à 2, le système est un métal, le paramètre β étant négatif. En revanche, en dimension 3, le désordre est important ($\beta > 0$) et une transition métal-isolant se produit. Notons que ces résultats ont été confirmés numériquement et expérimentalement [39].

Fluctuations universelles de la conductance

Les fluctuations de conductance, observables dans des fils quantiques désordonnés ou dans des transistors MOSFET [40], sont une conséquence de la localisation faible et dépendent de paramètres externes [41]. Ainsi, elles sont sensibles au champ magnétique ou à la valeur de l'énergie de Fermi. L'origine de ces fluctuations vient des interférences qui apparaissent entre les différents chemins possibles dans un système désordonné (cf. Fig. (1.5)).

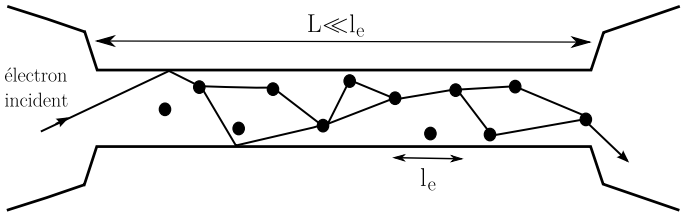


FIGURE 1.5 – *Représentation des chemins possibles d'un électron dans un conducteur diffusif.*

Dans une vision classique, obtenir la probabilité pour un électron de parcourir une certaine distance entre deux points dans un échantillon diffusif consiste à sommer les probabilités de tous les chemins possibles connectant les points de départ et d'arrivée. Cependant, dans le régime mésoscopique, où la description quantique est nécessaire, il faut également prendre en compte les termes d'interférences qui s'écrivent sous la forme du produit d'amplitudes de probabilité des différents chemins et non des probabilités seules.

La formule de Drüde de la conductivité (1.2) correspond au terme classique auquel il est donc nécessaire de rajouter une correction négative, dite de localisation faible, permettant la prise en compte de la cohérence de phase, c'est-à-dire des interférences.

Il est remarquable de constater que l'amplitude des fluctuations de la conductance est universelle dans le régime diffusif et de l'ordre d'un quantum de conductance e^2/h, comme le montre la figure (1.6). Elles ne dépendent donc que des symétries du système [42].

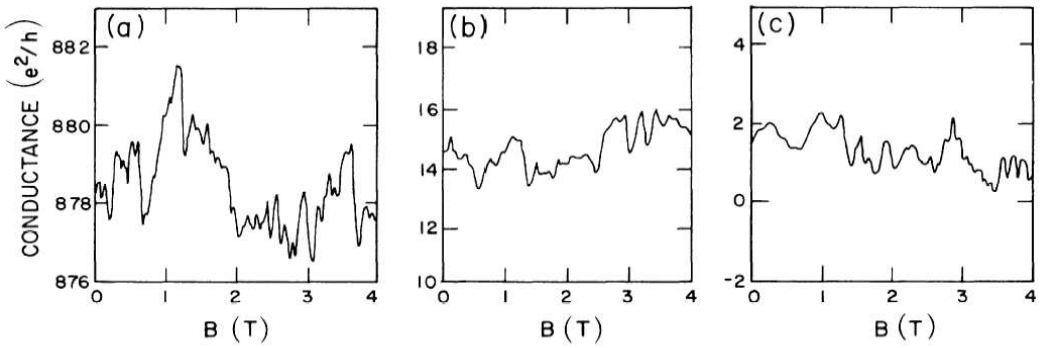


FIGURE 1.6 – *La conductance en fonction du champ magnétique dans des systèmes de géométries différentes [41] : (a) dans un fil d'or de diamètre* $0.8\mu m$*, (b) dans un canal dans un gaz bidimensionnel d'un MOSFET et (c) correspond à des simulations numériques dans le modèle de Anderson.*

1.3.3 Blocage de Coulomb

Le blocage de Coulomb est un effet quantique trouvant sa source dans la discrétisation des niveaux d'énergie d'un échantillon mésoscopique qui permet de mettre en évidence la quantification de la charge des porteurs de courant. Son observation nécessite des systèmes quasi-isolés, également appelés îles ou îlots, dont les états électroniques sont bien définis. Un exemple de ce genre de système est la mise en série de deux jonctions tunnels de faible conductance ($\ll e^2/h$), de capacité C et de résistance tunnel R_t qui définissent un îlot (cf. Fig. (1.7)).

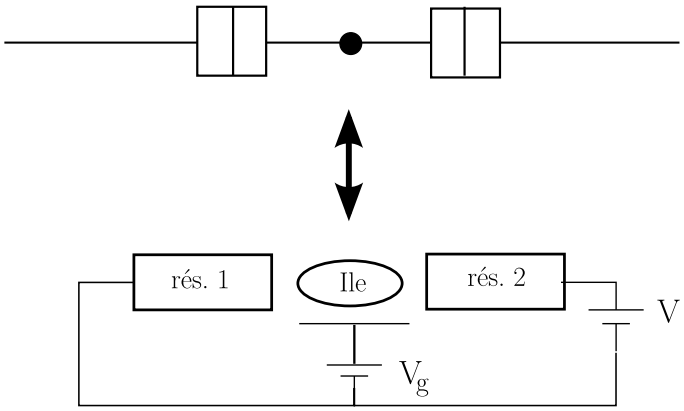


FIGURE 1.7 – *Au dessus, représentation de la mise en serie de deux jonctions tunnel. En dessous, système équivalent permettant l'observation du blocage de Coulomb : une tension de grille V_g peut être ajoutée afin de faire varier le potentiel chimique du système.*

La théorie orthodoxe permet de formaliser ce type de situations de transport dans lesquelles le transfert de charge par effet tunnel a lieu lorsqu'il est énergétiquement favorable au système c'est-à-dire lorsqu'il tend à diminuer son énergie libre. La variation de l'énergie de Helmholtz est définie par :

$$\Delta F = \Delta E_c - \Delta W, \tag{1.6}$$

où $\Delta E_c = e^2/2C$ est l'énergie de charge stockée dans les conducteurs d'une jonction tunnel et ΔW est la variation du travail fourni. Après un transfert tunnel, le système cherche à retrouver son équilibre. Pour cela, les sources de tension absorbent ou débitent des charges afin de compenser l'électron transféré de ou vers l'île mais également les charges de polarisation créées en réponse à la variation électrostatique de l'îlot. Ainsi,

$$\Delta W = \pm eV + polarisation \tag{1.7}$$

Les schémas (1.8) et (1.9) représentent une double jonction tunnel créant une île. Une tension $V = 0$ traduit un état de neutralité de charge pour l'îlot et implique l'absence de charge excédentaire. En revanche, lorsque $V \neq 0$, le nombre d'électrons en excès varie de manière discrète grâce aux transferts tunnel à travers une des jonctions.

La thermodynamique permet de comprendre la suppression possible par effet tunnel du transfert de charge. Tant que la tension V ne dépasse pas une tension seuil $V_{seuil} = e/C_\Sigma$, avec C_Σ la capacité totale du système, l'énergie $E_c = e^2/2C_\Sigma$ à dépenser pour permettre à un électron de pénétrer ou de quitter l'île n'est pas disponible et le transport est bloqué. L'électron a donc besoin d'une autre source d'énergie que celle fournie par agitation thermique pour surmonter la barrière due à l'énergie de charge.

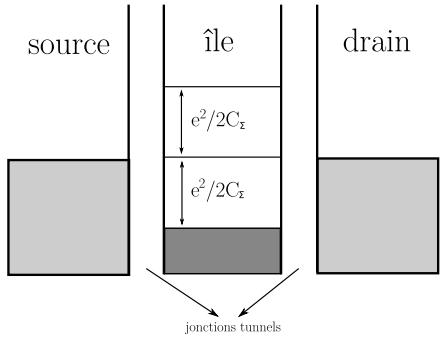


FIGURE 1.8 – *Schéma de bande du blocage de Coulomb*

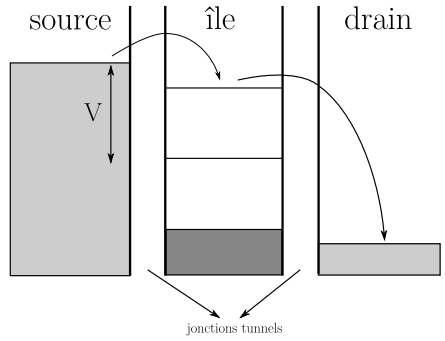


FIGURE 1.9 – *Schéma de bande lors de l'application d'une tension de polarisation V.*

En plus de la tension V, il est possible de rajouter une tension de grille qui change le potentiel chimique de l'île. Lorsque l'énergie d'un des états inoccupés de l'île atteint l'énergie de Fermi d'un des réservoirs, un électron peut traverser la jonction tunnel. Une fois cette résonance passée, l'état qui permettait la conduction devient occupé de façon permanente et on retrouve une situation de blocage de Coulomb.

Le comportement de la conductance en fonction de la tension de grille montre une succession de vallées (blocage de Coulomb) et de pics de résonance (cf. Fig. (1.10)).

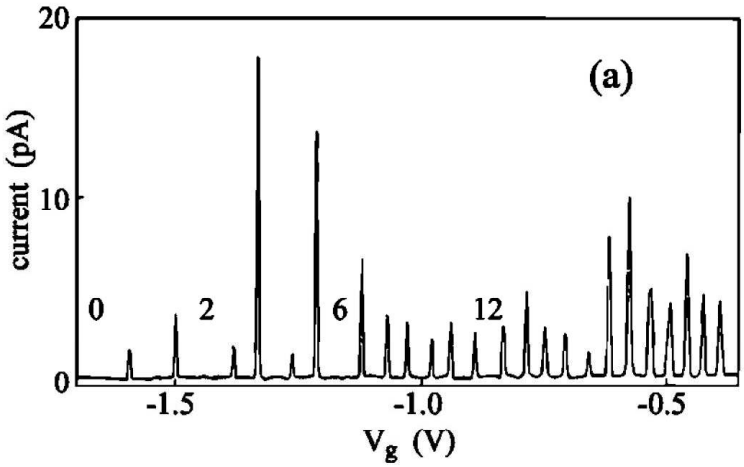


FIGURE 1.10 – *Comportement du courant à travers un point quantique en fonction de la tension de grille appliquée. Chaque pic correspond à l'ajout d'un électron [43].*

Les transistors à effet de champ s'appuient sur ces phénomènes de charge et décharge de l'îlot. Chaque vallée a un nombre bien défini N d'électrons occupant les états du système.

L'essor de la miniaturisation des composants électroniques a permis de vérifier la présence de ces phénomènes liés à la cohérence de phase des porteurs de courant du-

rant les vingt dernières années. La compréhension de ces derniers utilise principalement des théories semi-classiques basées sur une image de particules indépendantes. Cependant, ce développement technologique a fait apparaître de nouveaux comportements dans des systèmes mésocopiques qui restent difficilement explicables en omettant les interactions entre électrons. La section suivante est consacrée à, d'une part un bref rappel de la théorie des électrons indépendants, d'autre part, à la nécessité de tenir compte des interactions ainsi que les approximations sur cette théorie et enfin à l'introduction du concept de liquide de Fermi, initié par Landau.

1.4 Théorie de conduction dans les métaux

Par leur état de conducteur électronique qui est l'un des plus fondamentaux de la matière condensée, les métaux occupent une place particulière dans la physique du solide.

Les XIXe et XXe siècles ont vu émerger un large panel de modèles simples, afin d'expliquer leurs propriétés caractéristiques.

1.4.1 Théorie des électrons de conduction

Modèle de Drüde

Le modèle de Drüde [44] est une extension de la théorie cinétique des gaz au cas d'un métal, vu alors comme un gaz d'électrons. Cependant, aux électrons chargés négativement, il faut ajouter les ions, particules lourdes, chargées positivement et fixes, afin d'assurer la neutralité électronique du métal. Le modèle de Drüde repose sur deux hypothèses principales. D'une part, entre deux collisions, l'électron n'interagit ni avec les autres électrons (approximation des électrons indépendants) ni avec le réseau qu'il traverse (approximation des électrons libres). En l'absence de champ magnétique, le mouvement d'un électron est donc rectiligne et uniforme entre deux collisions. D'autre part, comme dans la théorie cinétique des gaz, les collisions sont des évenements instantanés provoquant un changement brutal de la vitesse d'un électron. Sa nouvelle direction est donc aléatoire car sa vitesse moyenne après collision est nulle.

Dans une certaine mesure, le modèle de Drüde permet de se faire une idée simple de certaines propriétés des métaux, avant une analyse plus poussée. Mais elle ne permet pas de reproduire des résultats expérimentaux pour les métaux.

Un des fondements de ce modèle est tout simplement faux. Comme il s'agit d'une transcription de la théorie cinétique des gaz, il est supposé que la distribution des vitesses des électrons à l'équilibre et à la température T, est fournie par la statistique de

Maxwell-Boltzmann :

$$f(\mathbf{v}) \quad \propto \quad n \exp\left\{\frac{-mv^2}{k_B T}\right\}, \tag{1.8}$$

où n est la densité électronique et v est la norme du vecteur vitesse $\mathbf{v}$. Mais, le principe d'exclusion de Pauli, nécessaire pour expliquer entre autres les états liés des électrons dans les atomes, exige de remplacer cette distribution par celle de Fermi-Dirac.

Modèle de Sommerfeld

Le modèle de Sommerfeld [45] s'appuie sur celui de Drüde, à savoir celui d'un gaz d'électrons libres, mais pour tenir compte de la nature quantique des électons, il adopte la distribution statistique de Fermi-Dirac :

$$f_{FD}(\mathbf{v}) \quad \propto \quad \frac{1}{1+\exp\{(\frac{1}{2}mv^2 - k_B T_0)/k_B T\}}, \tag{1.9}$$

où T_0 est une température déterminée par la condition de normalisation : $n = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{v})$.

Si l'intoduction de f_{FD} dans le modèle de Sommerfeld a permis des prédictions de propriétés métalliques plus fines, il s'agit toujours d'un modèle basé sur une approximation d'électrons indépendants et dont les prédictions ne sont pas vérifiées expérimentalement.

Equation de Boltzmann

Revenons un instant sur la théorie de Drüde. Celle-ci s'appuie sur une approximation du temps de relaxation τ qui stipule la non corrélation des évenements de collisions électroniques. La fonction de distribution des électrons $n(k)$ dans un régime hors équilibre, c'est-à-dire en présence d'un champ externe et/ou d'un gradient de température, est alors identique à celle définie à l'équilibre et égale à la fonction de Fermi.

Cette hypothèse se base sur la supposition que la fonction de distribution n'a aucun effet sur la vitesse des électrons qui subissent des collisions. En d'autres termes, le temps τ entre deux collisions est indépendant de la position et de la vitesse des électrons. Or, le principe d'exclusion de Pauli impose que les électrons ne peuvent être diffusés que vers des niveaux d'énergie vides.

En allant au delà de cette approximation , il est possible de définir la fonction de distribution hors équilibre $n(k)$ en termes de solutions des équations du mouvement semi-classiques et d'obtenir l'équation de Boltzmann [27] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v}.\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} n + \mathbf{F}.\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} n \quad = \quad \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coll}, \tag{1.10}$$

où **F** représente une force au sens de l'équation de la dynamique de Newton.

Cette équation permet de relier les termes de dérive (membres de gauche de l'équation) qui décrivent l'évolution des électrons de conduction dans un système hors équilibre en l'absence de collisions et le terme de collision (membre de droite de l'équation). Celui-ci prend en compte, dans l'évolution des électrons, les mécanismes subtils liés à la présence de diffuseurs dans un échantillon métallique. Ainsi, il décrit la possibilité que les électrons parviennent en un point, non pas parce qu'il s'agit de leur trajectoire naturelle mais parce qu'ils ont été déviés par les collisions subies [46].

Il existe d'autres théories de conduction dans les métaux dont la première version purement quantique est la théorie de Kubo de la réponse linéaire. Bien que les électrons dans les bandes de conduction obéissent, entre deux collisions, aux équations semi-classiques du mouvement pareillement aux théories énoncées précedemment, la formulation de Kubo fait intervenir des probabilités moyennes d'occupation des niveaux d'énergie. Aussi, dans un gaz d'électrons sans interaction, les coefficients des lois linéaires phénoménologiques du transport s'expriment en termes de fonctions de corrélations à l'équilibre de courants. Cette théorie permet de dépasser l'approche semi-classique de l'équation de Boltzmann par l'introduction de termes correctifs dus aux effets d'interférences quantiques. Nous ne développerons pas ici cette théorie et renvoyons aux articles de revue [47], [48], [49] pour une description détaillée.

1.4.2 Prise en compte des interactions

La plus grande difficulté dans l'étude des matériaux réside dans la description des interactions, c'est-à-dire dans le choix du potentiel $U(r)$ qui apparaît dans l'équation de Schrödinger [50] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad = \quad E\psi(\mathbf{r}). \tag{1.11}$$

Le potentiel $U(\mathbf{r}) = U^{el}(\mathbf{r}) + U^{ion}(\mathbf{r})$ inclut les interactions électron-électron et électron-ion, lesquels sont disposés de manière périodique sur le réseau. La prise en compte de ce terme seul conduit, entre autres, aux modèles de Hubbard et des liaisons fortes qui découlent de la théorie des électrons presque libres. De plus, dans une situation hors équilibre initiée par des phénomènes de transport, la théorie semi-classique permet une description du comportement du matériau. Cependant, nous n'entrerons pas dans une description de ces théories.

Pour aller au delà de l'approximation des électrons indépendants, il s'agit de définir le potentiel d'interaction entre les électrons dans la formule (1.11). Ce dernier peut prendre plusieurs formes.

1.4.3 Approximation de Hartree-Fock

Equations de Hartree

Les équations de Hartree permettent la prise en compte des interactions électroniques grâce à l'introduction d'un champ moyen entre les électrons qui suppose tout de même une indépendance [51]. Ces équations s'écrivent :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}) + U^{ion}(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) + \left[e^2\sum_j\int d\mathbf{r}'\frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right]\psi_i(\mathbf{r}) \quad = \quad E_i\psi_i(\mathbf{r}). \qquad (1.12)$$

ψ_i est un niveau à un électron occupé. Ainsi, le potentiel U est différent pour chaque orbitale et les équations de Schrödinger sont résolues de manière auto-cohérente.

Cependant, cette approximation ne peut représenter la configuration particulière des électrons restants qui affectent l'électron de la i-ème orbitale. Cette insuffisance fondamentale se compense en prenant en compte un terme supplémentaire d'échange.

Equations de Hartree-Fock

La clef pour tenir compte de ce nouveau terme repose sur le principe d'exclusion de Pauli qui oblige à considérer des fonctions d'onde antisymétriques $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\ldots\psi_N(\mathbf{r}_N)$. Ce n'était pas le cas dans les équations de Hartree.

D'un point de vue technique, cette fonction d'onde est remplacée par le déterminant de Slater de fonctions d'onde à un électron. Il s'agit d'une combinaison linéaire de $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ et de tous les produits obtenus par permutation des $\mathbf{r}_j$ pondérés par ± 1 afin de garantir la condition d'antisymétrie.

Ce produit s'écrit de manière compacte comme le déterminant d'une matrice $N \times N$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) \quad = \quad \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_1(\mathbf{r_N}) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_2(\mathbf{r_N}) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} . \qquad (1.13)$$

La minimisation du champ moyen à travers les fonctions ψ_i, qui mène à la résolution des équations de Schrödinger à N particules, conduit à une généralisation des équations (1.12) appelée équations de Hartree-Fock [52], [53] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}) + U^{ion}(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) + U^{el}(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) - \left[e^2\sum_j\int d\mathbf{r}'\frac{\psi_j^\star(\mathbf{r}')\psi_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right]\psi_j(\mathbf{r}) \quad = \quad E_i\psi_i(\mathbf{r}). \tag{1.14}$$

U^{el} est le terme d'interaction électronique qui apparaît déjà dans les équations de Hartree et le dernier terme du membre de gauche est le terme d'échange.

Cependant, certains aspects physiques des interactions entre électrons ne peuvent être traités par une approximation de champ auto-cohérent et demandent de s'intéresser au phénomène d'écrantage. Il s'agit de pouvoir considérer la réponse des électrons de conduction aux ions, aux impuretés ou aux autres électrons. Ainsi, dans le but de tenir compte des champs des électrons autres que ceux considérés aux points $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, le potentiel du terme d'échange doit être réécrit et l'on parlera alors de terme d'écrantage.

1.4.4 Effet d'écrantage dans les métaux

Le phénomène d'écrantage est l'une des manifestations les plus essentielles dans les interactions électroniques.

De manière simple, et en ne considérant que l'effet d'écrantage dans un gaz d'électrons, la présence d'un ion de position fixe provoque l'attraction d'électrons dans son voisinage. Cet amas de particules de charge négative induit alors l'écrantage du champ de l'ion.

Le terme d'écrantage fait donc intervenir deux potentiels électriques : ϕ^{ext} le potentiel provenant de la présence de l'ion et ϕ le potentiel total. Celui-ci vient de la présence de l'ion et du nuage électronique induit.

La transformée de Fourier de ces champs est reliée à la transformée de Fourier de la constante diélectrique :

$$\phi(\mathbf{q}) \quad = \quad \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q})}\phi^{ext}(\mathbf{q}), \tag{1.15}$$

et la densité de charge induite dans le gaz d'électrons par le potentiel total ϕ s'écrit :

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}) \quad = \quad \chi(\mathbf{q})\phi(\mathbf{q}), \tag{1.16}$$

où χ est la fonction de réponse des électrons à la présence d'un champ extérieur. Les équations de Poisson que satisfont chacun des champs ϕ et ϕ^{ext} et les deux équations précédentes permettent d'exprimer la constante diélectrique, une quantité expérimenta-

lement mesurable, en fonction de χ. Ainsi,

$$\epsilon(\mathbf{q}) \quad = \quad 1 - \frac{4\pi}{q^2}\chi(\mathbf{q}) = 1 - \frac{4\pi}{q^2}\frac{\rho^{ind}(\mathbf{q})}{\phi(\mathbf{q})}. \tag{1.17}$$

Ces calculs sont exacts. Cependant, déterminer la constante diélectrique nécessite quelques approximations.

Théorie de Thomas-Fermi

La théorie d'écrantage de Thomas-Fermi, qui correspond à la limite semi-classique de la théorie de Hartree, est très efficace si on suppose que le potentiel externe varie lentement avec la distance [54], [55]. Elle repose sur l'idée que l'équation de Schrödinger à un électron

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) \quad = \quad E_i\psi_i(\mathbf{r}), \tag{1.18}$$

est résolvable lorsque la relation de dispersion est de la forme :

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - e\phi(\mathbf{r}). \tag{1.19}$$

La constante diélectrique s'écrit alors :

$$\epsilon(\mathbf{q}) \quad = \quad 1 + \frac{k_0^2}{q^2}, \tag{1.20}$$

où k_0 est le vecteur d'onde de Thomas-Fermi.

Par exemple, si le potentiel externe s'écrit comme celui d'une charge ponctuelle $\phi^{ext}(\mathbf{r}) = Q/r$, le potentiel total est de la même forme que le potentiel de Yukawa $\phi(\mathbf{r}) = Qe^{-k_0 r}/r$. Cela signifie que les électrons écrantent le champ de la charge extérieure dont la distance caractéristique d'écrantage est reliée à k_0. Notons que cette théorie n'est valable que pour des moments $q \ll k_{\mathrm{F}}$.

Théorie d'écrantage de Lindhard

L'approche de Lindhard, contrairement à celle de Thomas-Fermi, repose sur un développement perturbatif de la densité induite au premier ordre en ϕ, le potentiel total [56]. Ainsi, $\chi(\mathbf{q})$ s'écrit :

$$\chi(\mathbf{q}) \quad = \quad -e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\hbar^2\mathbf{k}.\mathbf{q}/m}, \tag{1.21}$$

où $f_{\mathbf{k}}$ est la fonction de Fermi à l'équilibre : $f_{\mathbf{k}} = 1/\{exp[\beta((\hbar^2k^2/m) - \mu)] + 1\}$.

Le calcul du potentiel écranté ϕ d'une charge ponctuelle, aux grandes distances, n'est plus du type Yukawa. Il présente un caractère oscillant qui montre sa décroissance lente : $\phi(\mathbf{r}) \propto r^{-3}\cos(2k_{\mathrm{F}}r)$. Ces oscillations sont appelées oscillations de Friedel.

1.5 Théorie des liquides de Fermi

La théorie des liquides de Fermi a été introduite par L.D. Landau [21]. Elle permet, à partir de l'image simple et intuitive de quasi-particule, de tenir compte des interactions électron-électron dans un matériau en se basant sur l'approximation des électrons indépendants.

Jusqu'à présent, les modèles évoqués sont des extensions de la théorie des électrons indépendants et l'introduction des interactions entre électrons n'apporte qu'une modification de la relation de dispersion (cf. Eq. (1.19)). Les états électroniques du système restent des états stationnaires dont l'écriture est identique à celle en l'absence d'interaction. Seule leur forme peut se trouver changer.

1.5.1 Concept de *quasi-particule*

La théorie de Landau est également une extension de la théorie des électrons indépendants. Elle se base sur une correspondance continue des états propres et des particules en l'absence et en présence d'interactions entre électrons dans un système, à condition que ces dernières ne provoquent pas de transition de phase (*e.g.* la création de paires de Cooper).

Les excitations dans un système sans interaction sont des paires électron-trou de moment k et d'énergie $E(k)$ bien définis. Leur temps de vie est infini car ce sont des états propres du hamiltonien. En revanche, avec l'introduction adiabatique d'interactions électroniques, les excitations élementaires sont des quasi-particules. Il s'agit d'électrons habillés des fluctuations de densité les entourant. Ce nouvel état est donc régi par une statistique fermionique.

En toute rigueur, il faut également tenir compte des interactions entre quasi-particules dont le comportement est décrit par les paramètres de Landau. Cependant, l'image seule des quasi-particules suffit généralement pour obtenir une description correcte du système.

Ces quasi-particules évoluent autour du niveau de Fermi et, comme cela a déjà été énoncé, ont des propriétés correspondantes à celles d'électrons *nus*, *i.e.* elles possèdent le même nombre quantique que les électrons. Cependant, cette correspondance connaît des limites, les propriétés dynamiques de la quasi-particule étant renormalisées par les interactions. Ainsi, ce sont des excitations presque libres, leur temps de vie τ est donc

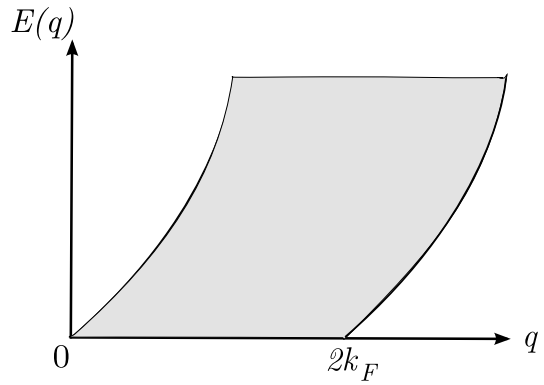


FIGURE 1.11 – *Spectre des excitations dans un liquide de Fermi.*

fini. Dans un métal à 3 dimensions, il s'écrit : $\tau \propto (E - E_{\mathrm{F}})^{-2}$. Lorsqu'on considère des excitations dont le moment est proche de k_{F}, c'est-à-dire, pour des énergies proches de celle de Fermi, le temps τ devient plus grand que l'inverse de l'énergie de l'excitation et donc la quasi-particule est un objet bien défini. En d'autres termes, la théorie de Landau est bien valide quand l'intérêt se porte sur les propriétés à basse énergie. Cette théorie est donc un outil puissant pour déterminer les propriétés de transport et thermodynamiques d'un métal.

1.5.2 Propriétés à l'équilibre

Afin de connaître les propriétés physiques à basse énergie d'un système en présence d'interaction, il est important d'obtenir des informations sur l'énergie des quasi-particules et de leur interactions.

Fonction de distribution et énergie d'une quasi-particule

L'état fondamental d'un gaz de particules en l'absence d'interaction est décrit par la fonction de distribution $n_0(k)$ qui présente une discontinuité d'amplitude égale à 1 à la surface de Fermi. Dans le cas d'un système en interaction, cette fonction du nombre d'occupation possède également une dicontinuité en k_{F} mais dont l'amplitude devient $Z < 1$. Cette quantité représente la partie des électrons qui se trouvent dans un d'état de quasi-particule (cf. Fig. (1.12)). La valeur de Z diminue avec l'augmentation de l'interaction entre les électrons.

Les excitations sont déterminées par les déviations qu'elles induisent dans la fonction de distribution par rapport à l'état fondamental : $\delta n(k) = n(k) - n_0(k)$ où le signe de $\delta n(k)$ est ± 1 selon qu'elle représente une quasi-particule ou un quasi-trou avec $n(k) = 1/(e^{\beta E(k)} + 1)$. L'expression des changements δE de l'énergie d'une quasi-

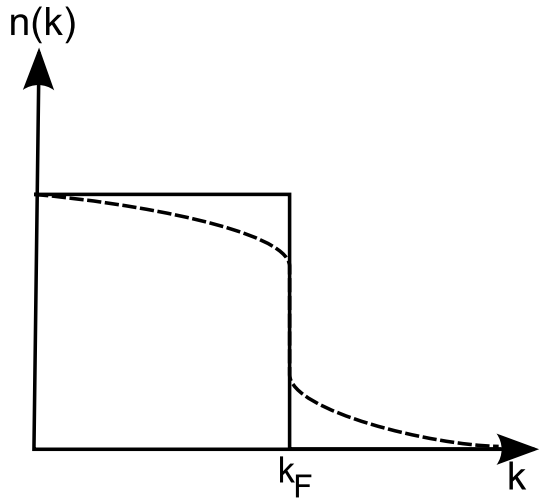


FIGURE 1.12 – *Comportement de la fonction de distribution en moment dans le cas d'un système en l'absence d'interaction (trait plein) et en présence d'interaction (tiret).*

particule est développée en puissance de $\delta n(k)$ [57] :

$$\delta E = \sum_k E_0(k)\delta n(k) + \frac{1}{2}\sum_{k,k'} f(k,k')\delta n(k)\delta n(k'), \tag{1.22}$$

où le premier terme représente l'énergie d'une quasi-particule et le deuxième correspond à l'interaction $f(k,k')$ entre quasi-particules.

Si on néglige le deuxième terme, l'énergie d'une quasi-particule, en respectant l'état fondamental, s'écrit :

$$E(k) = E_{\mathrm{F}} + \frac{k}{m^\star}(k - k_{\mathrm{F}}). \tag{1.23}$$

Cette relation, qui montre que l'énergie d'une quasi-particule n'est pas l'énergie d'un électron, définit la masse effective $m^\star$. Dans le cas d'un gaz d'électrons en l'absence d'interaction, $m = m^\star$. En revanche, en présence d'interaction et pour des énergies proches de celle de Fermi, la relation de dispersion (1.23) induit le remplacement de la masse de l'excitation m en $m^\star$. Par ailleurs, le moment k ne change pas car, d'après le théorème de Lüttinger, malgré les changements de la surface de Fermi induits par les interactions, le volume contenu reste un invariant [58].

Fonction spectrale d'une quasi-particule

La fonction spectrale, qui permet une caractérisation des excitations, se trouve également changée par la présence des interactions. La probabilité de trouver un état d'énergie $\hbar\omega$ avec un moment k s'écrit, dans le cas d'un gaz d'électron indépendant $A(k,\hbar\omega) = \delta(\hbar\omega - E(k))$. Il s'agit simplement d'un pic de Dirac reflétant le fait que les

excitations dans ce type de système sont bien définies (cf. Fig. (1.13)).

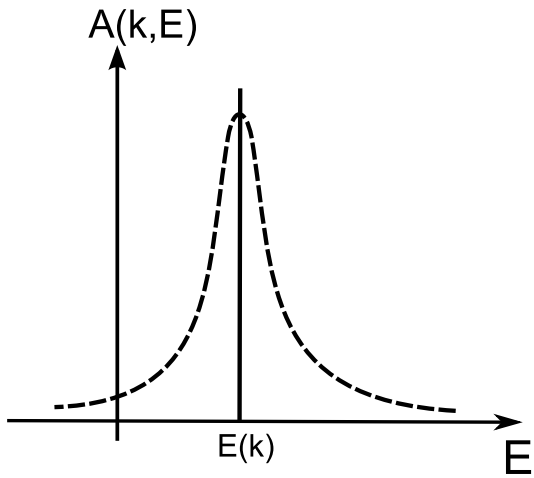


FIGURE 1.13 – *Allure de la fonction spectrale dans le cas d'un système en l'absence d'interaction (trait plein) et en présence d'interaction (tiret).*

En présence d'interaction, la fonction spectrale est une lorentzienne dont le pic, centré en $E(k)$, s'affine quand la valeur du moment k s'approche de k_{F}. Ceci s'explique par le fait que les quasi-particules sont des excitations, de mieux en mieux définies à l'approche du niveau de Fermi. Le poids de cette lorentzienne est le paramètre de renormalisation Z. Le reste $(1-Z)$ correspond à un fond continu d'excitations mal définies qui peut raisonnablement être ignoré à basse énergie.

Propriétés thermodynamiques

La chaleur spécifique à volume constant est définie comme la variation de l'énergie interne U du système en fonction de la température T :

$$C_v^F = \frac{1}{V}\frac{\partial U}{\partial T}. \tag{1.24}$$

La dépendance de l'énergie U par rapport à la température vient de l'excitation des quasi-particules par agitation thermique, déterminée par $n(k)$. Ainsi, la chaleur spécifique s'écrit [57] :

$$C_v^F = \frac{m^\star k_{\mathrm{F}}}{3} k_B^2 T. \tag{1.25}$$

La différence avec un gaz d'électron réside dans la substitution de la masse réelle par la masse effective $m^\star$.

La suceptibilité de spin à température nulle est définie par :

$$\chi_0 = \left(V\frac{\partial^2 E_0}{\partial M^2}\right)^{-1}, \tag{1.26}$$

où E_0 est l'énergie de l'état fondamental et M l'aimantation qui conduit à modifier le vecteur d'onde de Fermi en $k_\mathrm{F} + \delta k_\mathrm{F}$ pour les spins up et en $k_\mathrm{F} - \delta k_\mathrm{F}$ pour les spins down. A partir de l'équation (1.22), on obtient :

$$\chi_0 = \frac{\mu_B^2 k_\mathrm{F} m^\star}{\pi^2(1+F_0^a)}, \tag{1.27}$$

où μ_B est le magnéton de Bohr et F_0^a est un coefficient relié à l'interaction de charge entre les quasi-particules [57].

Enfin, la compressibilité est définie par :

$$\kappa_0 = \left(V\frac{\partial^2 E_0}{\partial V^2}\right)^{-1} = \frac{m^\star k_\mathrm{F}}{\pi^2\rho^2(1+F_0^s)}, \tag{1.28}$$

avec F_0^s un coefficient connecté aux interactions de spin entre les quasi-particules.

Chacune de ses quantités possèdent un comportement dépendant de la masse effective et donc des interactions.

Il n'a pas été nécessaire de spécifier la force du couplage entre les interactions et c'est là que réside la puissance de la théorie de Landau.

Notons, pour finir, que les états de quasi-particules sont également différents des états d'un gaz d'électrons indépendants. Les interactions provoquant un élargissement des états propres du système, certains d'entre eux finissent par fusionner en un seul état, celui de la quasi-particule.

1.6 Théorie de la diffusion : transport dans un système mésoscopique

La section 1.3 était dédiée à une série d'exemples de phénomènes directement reliés à la nature quantiques des porteurs de courant. Les sections 1.4 et 1.5, quant à elles, ont mis en lumière l'importance de la prise en compte des interactions électroniques dans la description des conducteurs. Forts de ces deux points et afin d'aller plus loin dans l'étude des systèmes mésoscopiques, nous nous focalisons sur la connaissance de leurs propriétés de transport, en empruntant la voie la plus naturelle et la plus ancienne, l'étude du courant moyen et de la conductance.

Cependant, comme nous le verrons par la suite, ce type d'observables renseigne

uniquement sur l'aspect moyen du transport. Le courant traversant un échantillon est rarement constant dans le temps. Il est alors naturel d'introduire de nouveaux outils de travail rendant compte du caractère fluctuant du courant autour de sa valeur moyenne. Ce sont précisemment les corrélations de courant (bruit et corrélations croisées), qui, à travers leur comportement, permettent l'obtention d'informations supplémentaires sur les porteurs de courant.

1.6.1 Courant et conductance

R. Landauer a, le premier, développé une théorie du transport dans un système mésoscopique, basée sur la seule connaissance des propriétés de diffusion de ce dernier [1]. Simples et intuitifs, les modèles issus de cette théorie se démarquent des modèles semi-classiques, comme ceux de Drüde ou de Sommerfeld, en s'appuyant directement sur la nature ondulatoire des électrons.

Le système

Le système mésoscopique considéré est connecté de part et d'autre à des conducteurs de taille macroscopique à l'équilibre thermique, communément appelés *réservoirs*. Ces derniers sont donc caractérisés par la température T et par leur potentiel chimique μ_α, où $\alpha = L$ désigne le réservoir de gauche et $\alpha = R$ celui de droite, supposé bien défini par la présence de processus de relaxation (cf. Fig. (1.14)).

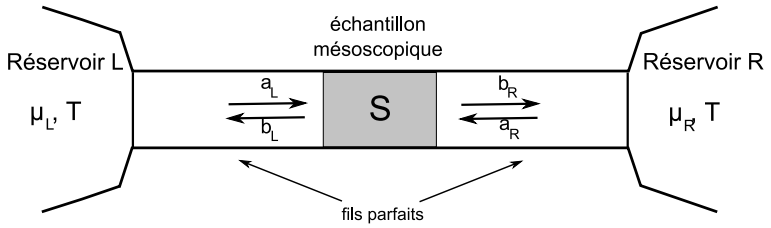


FIGURE 1.14 – *Exemple de système comportant un conducteur mésoscopique connecté par des fils à deux électrodes. Les amplitudes des ondes entrantes et sortantes de l'échantillon sont respectivement notées a_α et b_α.*

Il est assez difficile de tenir compte des processus possibles de dissipation des réservoirs dans le système. Aussi, il est d'usage d'ajouter des fils parfaits entre l'échantillon mésoscopique et les réservoirs. Ces fils, sans impuretés, peuvent être des fils quantiques unidimensionnels ou des systèmes quasi-unidimensionnels dont le nombre de canaux, déterminé par la section constante S du système, est de l'ordre de $2S/\lambda_F^2$, λ_F étant la longueur d'onde de Fermi. La seule propriété impérativement respectée par ces fils est que les électrons qui y circulent sont décrits par des ondes planes dans la direction lon-

gitudinale ne subissant aucune rétrodiffusion. Les contacts avec les réservoirs doivent être transparents, de telle sorte que les électrons sont absorbés parfaitement.

L'application aux bornes du système d'une tension d'énergie eV, qui n'est autre que la différence des potentiels chimiques des deux réservoirs, induit, dans le conducteur mésoscopique, l'injection d'électrons obéissant à la fonction de distribution de Fermi-Dirac :

$$f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu_\alpha}{k_B T}\right)+1}, \tag{1.29}$$

laquelle dépend de la température et des potentiels chimiques. Notons que l'état hors équilibre du conducteur, provoqué par l'application d'une différence de potentiel aux bornes du système nécessite, en principe, l'usage de la thermodynamique des systèmes hors équilibre. Cependant, en supposant une tension appliquée suffisament faible, il est possible d'utiliser le formalisme d'équilibre traditionnel.

La force de l'approche de R. Landauer réside dans la description de l'échantillon par ses seules propriétés de diffusion. Il se comporte ainsi comme une *boîte noire*, décrite par une matrice S, appelée matrice de diffusion, qui relie les états incidents des électrons provenant de chaque réservoir aux états réfléchis et transmis par l'échantillon (cf. Fig. (1.14)). Enfin, les interactions entre électrons sont négligés dans l'ensemble du système, comme dans la forme initiale du modèle.

Dans le système global que nous venons de présenter, on suppose que les réservoirs, en plus des fils, peuvent être décrits comme un système quasi-unidimensionnel de longueur infinie. Par cette hypothèse de travail, nous considérons l'existence de plusieurs canaux de conduction. Les électrons qui y circulent sont confinés dans la direction transverse notée $\mathbf{r}_\perp$ et libre dans la direction longitudinale x. Dans cette configuration, le confinement des électrons selon $\mathbf{r}_\perp$ induit une quantification des niveaux d'énergie, notés E_n. Ces états propres sont l'analogue des modes électromagnétiques dans les guides d'ondes et sont appelés canaux transverses. En revanche, dans la direction longitudinale, le système est caractérisé par un vecteur d'onde k évoluant de manière continu. L'énergie totale d'un électron s'écrit alors :

$$\begin{aligned} E &= E_n + E_x \\ &= E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \end{aligned} \tag{1.30}$$

Notons que, pour une énergie E donnée, la condition $E_x > 0$ implique l'existence d'un nombre fini de canaux de conduction. De plus, l'indice n qui apparaît dans cette relation

de dispersion permet d'identifier quel canal, équivalant à un système uni-dimensionnel parfait, sert de guide d'onde aux électrons.

Ce type de géométrie permet également d'imposer la séparabilité de la fonction d'onde d'un électron en une fonction de la variable $\mathbf{r}_\perp$ et une fonction de la variable longitudinale x. Par exemple, $\psi_{\alpha\sigma}$, l'opérateur d'annihilation d'une particule de spin σ dans le réservoir α est la somme de l'état incident se propageant vers le conducteur et des états diffusés par l'autre terminal et s'écrit :

$$\psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r},t) = \sum_\sigma \int dE e^{iEt/\hbar} \sum_{n=1}^{N_\alpha(E)} \frac{\chi_{\alpha n}(\mathbf{r}_\perp)}{2\pi\hbar v_{\alpha n}(E)} \left(a_{\alpha n\sigma} e^{ik_{\alpha,n}x_\alpha} + b_{\alpha n\sigma} e^{-ik_{\alpha,n}x_\alpha} \right). \tag{1.31}$$

$a_{\alpha n\sigma}$ et $b_{\alpha n\sigma}$ sont les amplitudes des ondes incidentes et réfléchies connectées entre elles via la matrice de diffusion S. La fonction $\chi_{\alpha n}$ est l'état propre normalisé des particules confinées dans la direction tranverse : $\int d\mathbf{r}_\perp \chi_{\alpha n}(\mathbf{r}_\perp)\chi^\star_{\alpha n}(\mathbf{r}_\perp) = 1$. N_α représente le nombre de canaux de conduction du terminal α et l'on a introduit la vitesse de propagation des électrons $v_{\alpha n}(E) = \hbar k_{\alpha n}/m$. Cette expression de la fonction d'onde est généralisable à une situation à réservoirs mutiples. Il suffit pour en tenir compte de rajouter une somme sur un indice β indiquant les réservoirs supplémentaires [59].

Calcul du courant

Le but de ce paragraphe est d'obtenir une expression du courant. Plusieurs méthodes existent pour y parvenir. Citons, par exemple, celle des paquets d'onde qui s'appuie sur une image très intuitive de comptage des particules aux contacts entre les fils et l'échantillon mésoscopique [60]. Cependant, la méthode de diffusion basée sur la seconde quantification, que nous utiliserons, reste un choix plus judicieux car elle est systématique et facilement généralisable [61], [62].

Cette méthode est appliquée au cas d'un système à deux réservoirs dans lequel plusieurs canaux de conduction sont occupés par les électrons.

La fonction d'onde des électrons du système, définie à l'équation (1.31), s'écrit en fonction des amplitudes des ondes incidentes $a_{\alpha n\sigma}$ et réfléchies $b_{\alpha n\sigma}$ qui parviennent ou sortent du conducteur. Afin d'utiliser la méthode de la diffusion par seconde quantification, ces amplitudes sont remplacées par les opérateurs de création ou d'annihilation $\hat{a}^{(\dagger)}_{\alpha n\sigma}$ et $\hat{b}^{(\dagger)}_{\alpha n\sigma}$ agissant dans un espace de Fock. Leur nature fermionique impose qu'ils

obéissent aux relations d'anticommutation :

$$\left[\hat{a}_{\alpha n\sigma}(E), \hat{a}^{\dagger}_{\alpha' n'\sigma'}(E')\right]_{+} = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(E-E'), \tag{1.32}$$

$$\left[\hat{a}^{(\dagger)}_{\alpha n\sigma}(E), \hat{a}^{(\dagger)}_{\alpha' n'\sigma}(E')\right]_{+} = 0. \tag{1.33}$$

Le passage en seconde quantification est un changement de point de vue de la situation dynamique du système (cf. Fig. (1.15)).

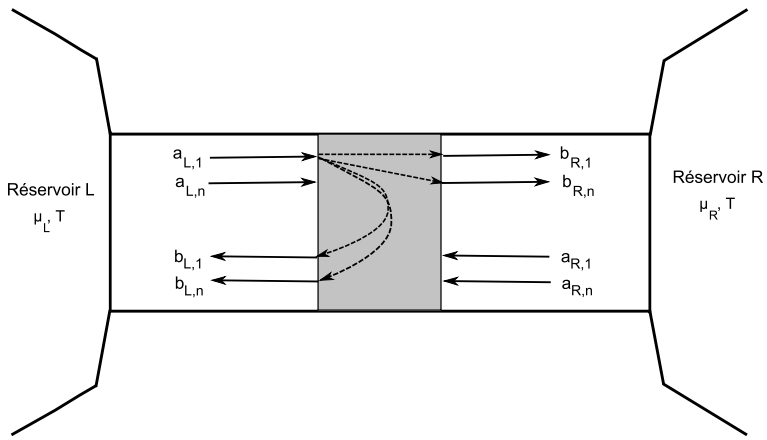


FIGURE 1.15 – *Exemple de système comportant un conducteur mésoscopique multicanaux indexés par n. Un électron incident dans le canal* 1 *peut être soit transmis dans un des canaux du réservoir opposé, soit réfléchi dans un des canaux du réservoir initial.*

En effet, à l'origine, la matrice de diffusion S fait intervenir des amplitudes de fonction d'onde alors qu'il est nécessaire qu'elle fasse intervenir les amplitudes de courant. Les opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{b}$ sont connectés via cette matrice de diffusion par :

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{L1\sigma} \\ \dots \\ \hat{b}_{LN_L\sigma} \\ \hat{b}_{R1\sigma} \\ \dots \\ \hat{b}_{RN_R\sigma} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \hat{a}_{L1\sigma} \\ \dots \\ \hat{a}_{LN_L\sigma} \\ \hat{a}_{R1\sigma} \\ \dots \\ \hat{a}_{RN_R\sigma} \end{pmatrix}. \tag{1.34}$$

La matrice S, qui est de dimension $(N_L + N_R) \times (N_L + N_R)$, peut s'écrire par blocs :

$$S = \begin{pmatrix} r(E) & t'(E) \\ t(E) & r'(E) \end{pmatrix}, \tag{1.35}$$

où les blocs diagonaux r et r' décrivent les réflexions subies par les électrons issus, respectivement, des réservoirs de gauche et de droite. Les matrices non diagonales re-

présentent les transmissions des électrons à travers l'échantillon. La conservation du courant implique que la matrice de diffusion soit unitaire, $SS^\dagger = 1$, qui se traduit par les relations $t'(E)t'^\dagger(E) = t(E)t^\dagger(E)$ et $r'(E)r'^\dagger(E) = r(E)r^\dagger(E)$. En d'autres termes, cela induit que les électrons ont la même probabilité d'être transmis du réservoir de gauche vers celui de droite que de passer à travers l'échantillon depuis le réservoir de droite vers celui de gauche. Ce constat, issu de la conservation du courant, est la conséquence directe de l'hypothèse de départ que les processus de diffusion sont entièrement élastiques, c'est-à-dire que les états incidents, transmis ou réfléchis ont la même énergie.

Il est maintenant possible de calculer le courant circulant dans le réservoir α. Celui-ci est défini de manière usuelle comme :

$$I_\alpha(x,t) = \frac{e\hbar}{2im}\sum_\sigma \int d\mathbf{r}_\perp \left[\hat{\psi}^\dagger_{\alpha\sigma}(\mathbf{r},t)\frac{\partial\hat{\psi}_{\alpha\sigma}(\mathbf{r},t)}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial\hat{\psi}^\dagger_{\alpha\sigma}(\mathbf{r},t)}{\partial x_\alpha}\hat{\psi}_{\alpha\sigma}(\mathbf{r},t)\right], \tag{1.36}$$

où $\mathbf{r} = (x, \mathbf{r}_\perp)$. En remplaçant la fonction d'onde $\hat{\psi}_{\alpha\sigma}$ par son expression en termes des opérateurs $\hat{a}_{\alpha n\sigma}$ et $\hat{b}_{\alpha n\sigma}$, le courant s'exprime comme une double intégrale sur l'énergie.

Les énergies E et E' qui interviennent dans cette double intégrale avec les opérateurs précedemment cités, coïncident ou sont très proches et ceci est vrai pour toutes les quantités physiques auxquelles nous sommes intéressés. Sur un tel domaine d'énergie, les vitesses $v_{\alpha n}$ ont une variation très lente en l'énergie qui permet de négliger leur dépendance. L'expression du courant devient alors :

$$I_\alpha(x,t) = \frac{e}{2\pi\hbar}\sum_{n,\sigma}\int dEdE' e^{i(E-E')t/\hbar}\left(\hat{a}^\dagger_{\alpha n\sigma}(E)\hat{a}_{\alpha n\sigma}(E') - \hat{b}^\dagger_{\alpha n\sigma}(E)\hat{b}_{\alpha n\sigma}(E')\right). \tag{1.37}$$

En utilisant la relation (1.34), l'expression du courant ne fait intervenir que les opérateurs $\hat{a}_{\alpha n\sigma}$:

$$I_\alpha(x,t) = \frac{e}{2\pi\hbar}\sum_{\beta,\gamma}\sum_{m,n,\sigma}\int dEdE' e^{i(E-E')t/\hbar}\hat{a}^\dagger_{\beta m\sigma}(E)A^{mn}_{\beta\gamma}(\alpha;E,E')\hat{a}_{\gamma m\sigma}(E), \tag{1.38}$$

où β et γ désignent les réservoirs (L ou R) et la matrice A est définie par :

$$A^{mn}_{\beta\gamma}(\alpha;E,E') = \delta_{mn}\delta_{\beta\alpha}\delta_{\gamma\alpha} - \sum_k s^\dagger_{\alpha\beta,mk}s_{\alpha\gamma,kn}, \tag{1.39}$$

avec $s_{\alpha\gamma,kn}$ l'élément de la matrice de diffusion permettant d'exprimer les opérateurs $\hat{b}$

en fonction des oprateurs $\hat{a}$ via la relation :

$$\hat{b}_{\alpha k\sigma}(E) = \sum_{\gamma n} s_{\alpha\gamma,kn}\hat{a}_{\gamma k\sigma}(E). \tag{1.40}$$

Calcul du courant moyen et de la conductance

L'expression de l'opérateur courant permet de définir celle du courant moyen. C'est dans ce but que l'on s'intéresse au nombre moyen d'électrons d'énergie E dans le réservoir α :

$$\langle \hat{a}^{\dagger}_{\alpha n\sigma}(E)\hat{a}_{\beta m\sigma}(E')\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{mn}\delta(E-E')f_{\alpha}(E), \tag{1.41}$$

où f_α est la distribution de Fermi-Dirac du réservoir de potentiel μ_α. En utilisant le fait que la somme sur les canaux du produit des élements de la matrice de diffusion puisse s'écrire en terme de trace :

$$\sum_{mn} s^{\dagger}_{\alpha\beta mn}(E)s_{\alpha\beta mn}(E) = \mathrm{Tr}\left[s^{\dagger}_{\alpha\beta mn}(E)s_{\alpha\beta mn}(E)\right], \tag{1.42}$$

le courant moyen circulant dans le réservoir α s'écrit :

$$\langle I_\alpha(x,t)\rangle = \frac{e}{\pi\hbar}\sum_{\beta,m,n}\int dE T_{\alpha\beta mn}\left[f_\alpha(E)-f_\beta(E)\right], \tag{1.43}$$

où $T_{\alpha\beta mn} = |s_{\alpha\beta mn}|^2$ repésente la probabilité de transmission d'un électron du canal m du terminal β vers le canal n du terminal α. La somme sur l'indice σ ayant été effectué, il s'agit de l'expression du courant moyen total au sens de spin.

D'une part, à température nulle, les états dont l'énergie est inférieure à l'énergie de Fermi sont pleins et ceux dont l'énergie est supérieure à E_F sont vides. Rendant compte de cette situation, les fonctions de distribution de Fermi-Dirac deviennent des fonctions de Heaviside. D'autre part, en supposant que la tension $V = \frac{\mu_\alpha-\mu_\beta}{e}$, avec $\alpha \neq \beta$, instaurée aux bornes du système ne soit pas trop élevée, il est raisonnable de faire l'hypothèse que la probabilité de transmission est indépendante de l'énergie. Dans cette situation, le courant moyen dans le réservoir α devient :

$$\langle I_\alpha(x,t)\rangle = \frac{e^2V}{\pi\hbar}\sum_{mn} T_{\alpha\beta mn}. \tag{1.44}$$

La conductance, quant à elle, s'obtient de l'expression précédente en la divisant par la

tension. Ainsi,

$$G_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{\pi\hbar}\sum_{mn} T_{\alpha\beta mn}, \tag{1.45}$$

où $\sum_{mn} T_{\alpha\beta mn}$ représente la transmission totale d'un des réservoirs vers l'autre. On remarque que la conductance dépend uniquement de la probabilité de transmission pour des canaux occupés confirmant le rôle fondamental de la matrice de diffusion pour comprendre la dynamique des électrons.

L'expression (1.45) est connue sous le nom de formule de Landauer. Une version généralisée de cette formule au cas d'un conducteur avec un nombre quelconque de contacts et de canaux a été obtenu par M. Büttiker [59]. De plus, certains modèles permettent d'étendre ce formalisme à un système d'électrons en interaction [63].

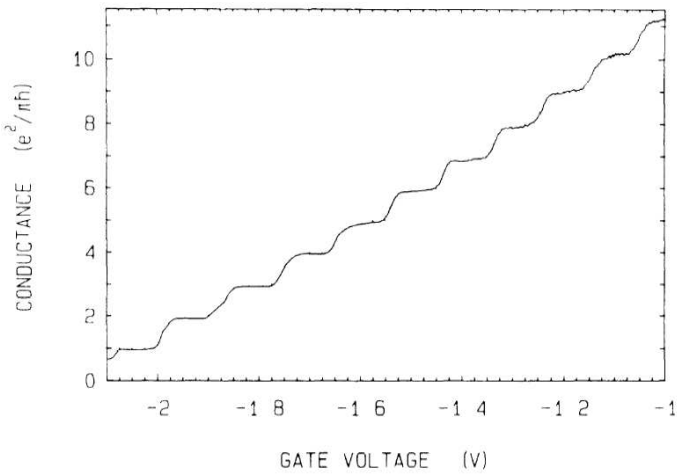


FIGURE 1.16 – *Comportement de la conductance à travers un point quantique en fonction de la tension de grille appliquée [3].*

Des expériences, dans lesquelles le nombre de canaux de l'échantillon est contrôlé par une tension de grille, sont très vite venues confirmer cette relation [3]. Ainsi que le montre la figure (1.16), pour chaque canal de probabilité de transmission proche de l'unité, la conductance présente un comportement en marche d'escalier dont la hauteur correspond à un quantum de conductance $2e^2/h$. L'augmentation de la tension de grille provoque l'ouverture d'un canal de conduction supplémentaire se traduisant par l'apparition d'un nouveau plateau.

La formule ou une formule de Landauer

Certes, l'équation (1.45) n'est pas exactement la formule de Landauer, telle qu'obtenue dans l'article initial [1], [2]. Pendant longtemps, la communauté s'est demandée

qu'elle était la *bonne* formule de Landauer. La réponse dépend de la manière dont la conductance est mesurée. Plus précisement, cela dépend du protocole expérimental utilisé, c'est-à-dire selon que le courant traversant l'échantillon soit mesuré aux bornes des réservoirs ou que des sondes soient plaçées de part et d'autre de l'échantillon mésoscopique [64]. Dans cette dernière situation, l'expression de la conductance devient :

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar}\sum_{mn}\frac{T_{mn}}{1-T_{mn}}. \tag{1.46}$$

Cette formule n'a jamais réellement été retrouvé par des calculs utilisant la théorie de la réponse linéaire, contrairement à l'équation (1.45). De plus, il est quasiment impossible expérimentalement de mesurer le courant directement en sortie du conducteur sans détruire la cohérence de phase du transport entre les réservoirs [65].

Nous finissons cette introduction aux calculs du courant moyen et de la conductance en revenant un instant sur la formule de Landauer (1.45) dans le cas d'un échantillon mésoscopique à un canal de conduction. En considérant ce conducteur parfait dont le coefficient de transmission T est 1, il paraît naturel de penser que la résistance est nulle. Mais l'expression (1.45) indique le contraire. Plus précisement, elle traduit la présence d'une résistance non négligeable égale à $h/2e^2$ soit environ $12.9k\Omega$.

La question qui se pose alors est de savoir d'où vient cette résistance et comment un conducteur parfait peut en avoir une. Ce problème a été le sujet de nombreux débats controversés [66]. Puisqu'aucune rétrodiffusion n'est autorisée dans le conducteur mésoscopique, cette résistance ne peut venir que des contacts entre réservoir et fil. En effet, la résistance peut être décomposée selon les différents élements du système, telle que :

$$R = \frac{h}{2e^2T} = \frac{h}{2e^2} + \frac{h(1-T)}{2^2T} = R_C + R_S, \tag{1.47}$$

où R_C est la résistance aux contacts de valeur $12.9k\Omega$ et R_S, la résistance intrinsèque de l'échantillon de valeur nulle pour une probabilité de transmission $T = 1$. Une expérience a d'ailleurs confirmé ces prévisions théoriques en mesurant ces deux résistances sur un conducteur balistique unidimensionnel [67].

1.7 Bruit et corrélations croisées dans un système mésoscopique

Si la conductance et le courant moyen permettent une bonne description d'un échantillon mésoscopique, ils ne réfèrent qu'à l'aspect moyen du transport. Or, les fluctuations du courant au cours du temps sont un outil supplémentaire efficace dont il nous faut tenir compte afin d'accéder à des informations sur les corrélations entre porteurs de

charge ou encore sur leur statistique. C'est justement la définition du bruit et des corrélations croisées.

1.7.1 Définition des corrélations de courant

Afin de caractériser l'amplitude et la fréquence des fluctuations du courant autour de sa valeur moyenne $\delta I(t) = I(t) - \langle I(t) \rangle$, où $I(t)$ est le courant stationnaire induit par l'application d'une tension constante aux bornes d'un conducteur, il est d'usage d'introduire une fonction de corrélation courant-courant, définie par :

$$C(\tau) = \langle \delta I(t) \delta I(t+\tau) \rangle, \tag{1.48}$$

soit, en termes de courant :

$$C(\tau) = \lim_{T \to +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle I(t) I(t+\tau) \rangle. \tag{1.49}$$

Cependant, il est préférable de travailler avec la densité spectrale de la fonction $C(\tau)$, obtenue en utilisant le théorème de Wiener-Khintchine. De manière générale, celui-ci stipule que, pour un processus aléatoire stationnaire $I(t)$, la densité spectrale $S(\omega)$ de ce processus est la transformée de Fourier de sa fonction de corrélation. Ainsi,

$$S(\omega) = \int d\tau \; C(\tau) e^{-i\omega\tau}. \tag{1.50}$$

Cette définition s'appuie, tout de même, sur une hypothèse d'érgodicité c'est-à-dire que les moyennes d'ensemble d'un processus aléatoire I s'identifient aux moyennes temporelles de chaque réalisation $I(t)$.

Le bruit $S(\omega)$ a pendant longtemps été considéré comme un effet parasite à éradiquer, les fluctuations du courant venant perturber la précision des mesures de ce dernier. Depuis une vingtaine d'années, le bruit a connu un regain d'intérêt car expérimentateurs et théoriciens ont réussi à en extraire de nouvelles informations, soit parce que non contenues dans le courant moyen, soit en raison de la difficulté de les obtenir autrement.

Le bruit trouve sa source dans la nature stochastique du transport et il en existe trois types différents : le bruit télégraphique ou en $1/f$ à basse fréquence produit par les fluctuations de la conductance, lesquelles sont causées par l'absorption ou l'émission d'une charge par une impureté ou un défaut cristallin dans un conducteur [68], [69], [70]. Ce bruit dépend de l'inverse de la fréquence et est proportionnel au carré de la tension. Le bruit de Johnson-Nyquist ou bruit thermique est causé par l'agitation des électrons dans un métal à température non nulle. Ce dernier est un bruit d'équilibre,

c'est-à-dire apparaissant également lorsqu'aucune source de tension n'est appliquée au système. Enfin, le bruit auquel nous nous intéressons dans cette thèse est de nature quantique.

L'extraction d'information sur un échantillon mésoscopique fait intervenir différentes échelles d'énergie : celle de la fréquence d'étude $\hbar\omega$, celle de la température du conducteur $k_B T$ et enfin celle de la tension appliquée eV à ses bornes. Le rapport entre ces échelles d'énergie caractérise le type de bruit en présence : bruit classique ($\hbar\omega < k_B T$) ou quantique ($\hbar\omega > k_B T$), bruit d'équilibre ($\hbar\omega > eV$) ou hors équilibre ($\hbar\omega < eV$).

1.7.2 Bruit à l'équilibre

A température non nulle, il est impossible, pour un conducteur, de ne pas abriter des fluctuations thermiques qui sont une source de bruit. Plus exactement, l'agitation thermique est responsable des fluctuations du nombre d'occupation des niveaux électroniques dans un échantillon. C'est ce qu'a observé J. B. Johnson [71], mettant en évidence la présence d'un bruit d'équilibre, et ce qu'a établit H. Nyquist [72] en interprétant ces fluctuations en termes d'échange d'énergie rayonnée.

Reprenons le système décrit par la figure (1.14), en ne considérant qu'un seul canal de conduction occupé. La manière la plus naturelle de s'intéresser au bruit d'équilibre est de considérer les états remplis à travers un nombre d'occupation n pouvant valoir 1 ou 0. Le nombre moyen d'occupation $\langle n \rangle$ est simplement déterminé par la distribution de Fermi-Dirac f.

Ainsi, à l'équilibre, la probabilité pour un état de se trouver inoccupé est, en moyenne, donnée par $1 - f$. Les fluctuations du nombre moyen d'occupation à l'équilibre sont alors définies par :

$$\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = f(1-f) \tag{1.51}$$

L'utilisation de la relation $f(1-f) = -k_B T \partial f / \partial E$ permet de retrouver l'expression du bruit de Johnson-Nyquist à fréquence nulle, telle que fréquemment énoncée dans la littérature :

$$S(\omega = 0) = 4 k_B T G. \tag{1.52}$$

Ce résultat, qui peut être obtenu par le théorème de fluctuation-dissipation, montre que mesurer le bruit thermique n'apporte pas d'informations supplémentaires sur le système que celles déjà fournies par la conductance. Par ailleurs, la mesure expérimentale du courant moyen reste plus facile à faire que mesurer ses fluctuations. Notons cependant, que dans le cas de système fortement désordonné, le théorème de

fluctuation-dissipation n'étant plus respecté, la mesure du bruit thermique peut être un outil efficace pour extraire des informations sur le transport électronique.

Lorsqu'une tension est appliquée aux bornes d'un conducteur, la situation est bien différente ainsi que nous allons le voir.

1.7.3 Bruit hors équilibre : limite classique

Bruit de grenaille

W. Schottky a, le premier, réussi à interpréter les fluctuations de courant observées dans des tubes à vide [4]. Il identifia deux termes distincts dans le bruit : l'un est associé au bruit thermique et l'autre au bruit de grenaille, dont la contribution est égale à $2eI$.

Contrairement au bruit de grenaille dans les conducteurs mésoscopiques cette contribution est issue des fluctuations de la statistique des porteurs de charge. Il s'agit donc d'un bruit classique.

A l'origine de l'interprétation du bruit dans les tubes à vides se trouve le calcul des corrélations de courant d'une source de particules émises de manière indépendante. Soit τ le temps moyen entre deux évenements tunnels ou entre deux émissions de particules classiques. En gardant à l'esprit que le transport classique comme quantique traduit le transfert d'un nombre important de particules, la probabilité d'avoir N évenements pendant un intervalle temporel t est définie par la loi de probabilité poissonienne :

$$P_N(t) = \frac{t^N}{\tau^N N!} e^{-t/\tau}. \tag{1.53}$$

Il est possible d'exprimer cette loi de Poisson en termes du nombre moyen de particules émises pendant le temps t : $\langle N \rangle = t/\tau$. Ainsi,

$$P_N(t) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{\langle N \rangle}. \tag{1.54}$$

Le courant moyen de particule de charge e étant proportionnel à cette charge et au nombre moyen $\langle N \rangle$, il s'écrit :

$$\langle I \rangle = e\frac{\langle N \rangle}{t} = \frac{e}{\tau}. \tag{1.55}$$

Les fluctuations de courant, en d'autres termes le bruit, sont proportionnelles à la variance du nombre de particules émises. Or, la variance d'une variable aléatoire suivant la loi de Poisson est égale à sa valeur moyenne. Finalement, le bruit poissonien s'écrit :

$$S_P(N) = 2e^2 \frac{var(N)}{t} = 2e\langle I \rangle. \tag{1.56}$$

Ce bruit est donc proportionnel au courant et à la charge des porteurs. Cette relation, connue sous le nom de formule de Schottky, est d'une grande importance car elle sert d'étalon pour les résultats du bruit à fréquence nulle dans les conducteurs mésoscopiques. Par exemple, elle a permis de mettre en évidence la fractionalisation de la charge des quasi-particules de Laughlin dans le régime d'effet Hall quantique fractionnaire [9], [10], [11], ou encore la charge $2e$ des paires de Cooper dans les supraconducteurs [5], [6], [7], [8]. Dans cette thèse, nous étudierons le comportement de cette relation de proportionnalité dans d'autres types de système, le nanotube de carbone et le fil quantique. Comme il est d'usage, nous introduisons le facteur de Fano afin de caractériser le type de bruit :

$$F = \frac{S(\omega = 0)}{2e\langle I \rangle}, \tag{1.57}$$

qui sera très utile afin d'observer la charge des excitations circulant à travers le nanotube de carbone.

1.7.4 Bruit hors équilibre : limite quantique

Nous continuons cette revue rapide des bruits hors équilibre avec le bruit de grenaille quantique. Les questions primordiales qui découlent de la description quantique des porteurs du courant sont : que signifie le bruit et comment le mesurer ?

Redéfinition des fonctions de corrélations

Des équations (1.49) et (1.50), les fluctuations d'un courant stationnaire sont redéfinies par :

$$S(\omega) = \lim_{T \to +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega\tau} \left(\langle I(t) I(t+\tau) \rangle - \langle I(t) \rangle \langle I(t+\tau) \rangle \right). \tag{1.58}$$

Dans le cas classique, la stationnarité du système implique que $\langle I(t) I(t+\tau) \rangle = \langle I(t+\tau) I(t) \rangle$ et de fait, induit la symétrisation du bruit classique :

$$S_c(\omega) = S_c(-\omega), \tag{1.59}$$

où l'indice c fait référence à la situation classique dans laquelle cette relation s'applique.

En revanche, dans un système mésoscopique où la nature quantique des porteurs de courant est à prendre en compte, les objets apparaîssant dans la formule des fluctuations sont des opérateurs et la question de la symétrisation du bruit intervient. En effet, les opérateurs courant pris à des temps différents ne commutent pas. Bien qu'ils soient chacun des opérateurs hermiticiens, le produit $I(t)I(t+\tau)$ ne l'est pas. Par contre, la

version symétrisée de ce produit $\frac{1}{2}(I(t)I(t+\tau)+I(t+\tau)I(t))$ possède cette propriété et assure à l'expression du bruit d'être réelle donc mesurable. Les fluctuations de courant symétrisées s'écrivent :

$$S_{sym}(\omega) = \frac{1}{2}\left(S_+(\omega)+S_-(\omega)\right), \tag{1.60}$$

où S_+ et S_- sont les densités spectrales non symétrisées. Ces corrélateurs peuvent être décrits en termes de taux d'émission ou d'absorption de particules, si les états initiaux $|i\rangle$ et finaux $|f\rangle$ sont connus :

$$S_+(\omega) = h\sum_{i,f} P_i|\langle f|I(t)|i\rangle|^2\delta(\hbar\omega+E_f-E_i), \tag{1.61}$$

$$S_-(\omega) = h\sum_{i,f} P_i|\langle f|I(t)|i\rangle|^2\delta(\hbar\omega+E_i-E_f), \tag{1.62}$$

où P_i est la distribution de probabilité des états initiaux. Les quantités S_+ et S_- peuvent s'interpréter comme suit. Le conducteur mésoscopique étant couplée à un environnement permettant la détection du bruit, la composante S_+ (resp. S_-), à fréquence positive (resp. négative), représente le taux d'émission de photons produits par le conducteur mésoscopique. A fréquence négative (resp. positive), S_+ (resp. S_-) correspond au taux d'absorption de photons de l'échantillon provenant de l'environnement.

Dans la littérature, l'argument précédemment invoqué suffit pour symétriser l'expression du bruit [73], [74]. Cependant, cette convention n'est pas justifiée car la non hermiticité de $I(t)I(t+\tau)$ n'est pas une condition rédibitoire pour que sa transformée de Fourier soit réelle. De plus, il apparaît, de la décomposition du bruit symétrisé, que $S_+(\omega)=S(\omega)$ et $S_-(\omega)=S(-\omega)$ sont des quantités physiques mesurables, en théorie, séparemment.

Nous choisissons donc d'utiliser la définition des fluctuations de courant non symétrisées, choix justifié expérimentalement, comme nous le verrons plus tard. Le problème de la symétrisation du bruit ne se pose pas dans les expériences à très basses fréquences ($\hbar\omega \ll eV,\ k_BT$), car les contributions S_+ et S_- sont les mêmes.

Bruit à fréquence nulle dans un conducteur mésoscopique

On considère de nouveau le système détaillé sur la figure (1.14). Le bruit dans l'un ou l'autre des réservoirs s'écrit [73] :

$$\begin{aligned} S_{L(R)}(0) &= \frac{e^2}{\pi\hbar}\sum_n\int dE\Big[T_n(E)\left(f_L(1-f_L)+f_R(1-f_R)\right) \\ &+ T_n(E)\left(1-T_n(E)\right)\left(f_L-f_R\right)^2\Big]. \end{aligned} \tag{1.63}$$

Le premier terme correspond à la contribution thermique du bruit et le deuxième correspond à la partie hors équilibre des corrélations de courant quantique.

Dans la limite des hautes températures $\hbar\omega \ll k_B T$ et lorsque la tension appliquée aux bornes du système est nulle, seul le bruit de Johnson-Nyquist est mesuré. En revanche, à température nulle et dans une situation hors équilibre ($eV \neq 0$), ce terme disparaît et les fonctions de distribution de Fermi-dirac se comportent comme des fonctions de Heaviside. Ainsi, le bruit dans le système mésoscopique est le bruit de grenaille, qui s'écrit [60], [61], [75] :

$$S_{L(R)}(0) \quad = \quad \frac{2e^2}{\pi\hbar} eV \sum_n T_n \left(1 - T_n\right). \tag{1.64}$$

En supposant une probabilité de transmission égale à 1, le bruit s'annule. Il s'agit de la même condition sur T_n qui a permis de montrer le comportement en marche d'escalier de la conductance. Ainsi, l'annulation du bruit correspond à une conductance multiple de $2e^2/h$ [76], [77], [78], [79], [80]. Au contraire, considérant une probabilité de transmission nulle, le bruit s'exprime comme le bruit poissonien de la formule de Schottky.

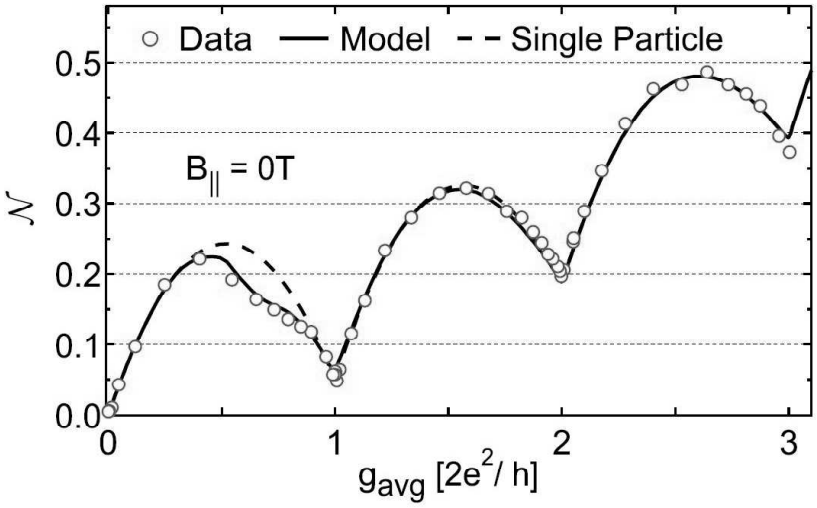


FIGURE 1.17 – *Comportement du bruit de grenaille en fonction de la conductance dans un point contact [79].*

Ce résultat apporte un autre aspect intéressant sur la charge des porteurs de courant. Dans le cas d'un système à un seul canal de conduction, le bruit devient :

$$S_{L(R)}(0) \quad = \quad 2e\langle I\rangle(1 - T). \tag{1.65}$$

La comparaison de ce résultat avec la formule de Schottky montre alors que, dans un conducteur mésoscopique où circulent des électrons sans prendre en compte leur in-

teraction, le bruit se trouve réduit. Il est dit sous-poissonien. Le facteur de Fano rend compte de ce changement de régime : $F = (1 - T)$. Ainsi, le coefficient de proportionnalité entre bruit et courant a changé.

Transition entre régime de bruit

En supposant les probabilités de transmission indépendantes de l'énergie, l'expression (1.63) devient [60], [61] :

$$S_{L(R)}(0) = \frac{2e^2}{\pi\hbar}\left[2k_BT\sum_n T_n^2 + eV\coth\left(\frac{eV}{2k_BT}\right)\sum_n T_n(1-T_n)\right]. \tag{1.66}$$

Cette formule est valable quelque soit la température ou la tension. Dans la limite de faible transmission, ce bruit devient alors :

$$S_{L(R)}(0) = 2e\langle I\rangle\coth\left(eV/2k_BT\right). \tag{1.67}$$

Des mesures expérimentales sont venues confirmer la validité de cette expression [81].

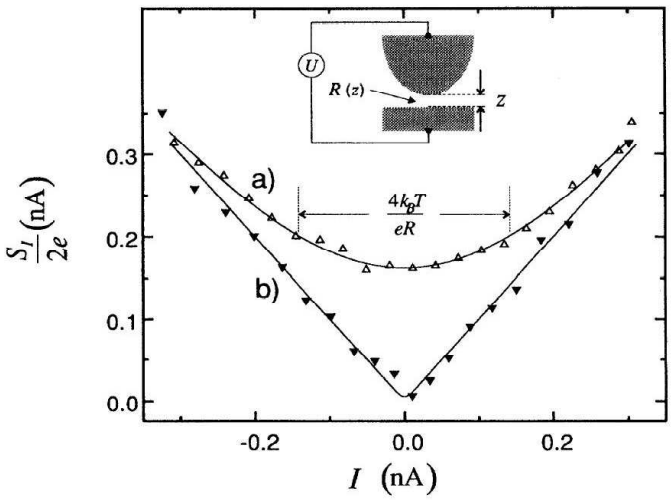


FIGURE 1.18 – *Comportement du bruit en fonction du courant dans deux régimes. La courbe (a) correspond à la limite haute température et faible tension appliquée, alors que la courbe (b) traduit une situation hors équilibre à basse température [81].*

La figure (1.18) obtenue en regardant le bruit à travers le système *pointe de STM + surface métallique* illustre la transition entre bruit thermique et bruit de grenaille en effectuant deux séries de mesures. La première, à haute température, montre que le bruit et le courant ne retrouve une relation de proportionnalité que lorsque ce dernier est important. La deuxième série, cette fois à basse température avec une tension forte

imposée aux bornes du système, met en évidence la linéarité du comportement du bruit en fonction du courant, telle qu'énoncée par la formule de Schottky.

Corrélations de bruit à fréquence nulle

Il existe une autre quantité importante en physique mésoscopique qui permet d'apporter des informations sur la statistique des porteurs de courant : les corrélations croisées ou corrélations de bruit. La définition de cette densité spectrale est la même que celle du bruit à ceci près que les courants pris en compte dans sa formulation sont mesurés dans des terminaux différents. En d'autres termes, la conservation du courant à travers le système imposant que $S_L = S_R = -S_{LR} = -S_{RL}$, l'expression (1.63) devient :

$$\begin{aligned} S_{LR(RL)}(0) &= -\frac{e^2}{\pi\hbar}\sum_n \int dE\Big[T_n(E)\left(f_L(1-f_L)+f_R(1-f_R)\right) \\ &+ T_n(E)\left(1-T_n(E)\right)\left(f_L-f_R\right)^2\Big]. \end{aligned} \tag{1.68}$$

Ce n'est pas tant la formule que son signe qu'il est intéressant d'analyser, car il permet de caractériser la statistique des excitations dans un conducteur. Comme cela a été fait dans l'expérience de Hanbury-Brown et Twiss [82] dans laquelle deux détecteurs collectent les photons émis par une source lumineuse monochromatique. Le faisceau créé par cette source, arrivant sur une lame semi-réfléchissante, se sépare en deux composantes qui se propagent chacune vers un des détecteurs. Ainsi les corrélations obtenues après analyse des résultats des détecteurs sont toujours positives. L'explication vient du fait que les photons sont des particules indiscernables obéissant à la statistique de Bose-Einstein. Ainsi, plusieurs photons en moyenne ont occupé les mêmes états transverses du faisceau initial. Une fois que celui-ci est scindé en deux par la lame semi-réfléchissante, la détection d'un ou plusieurs photons par un réservoir entraîne la détection de photons par l'autre réservoir (cf. Fig. (1.19) de gauche).

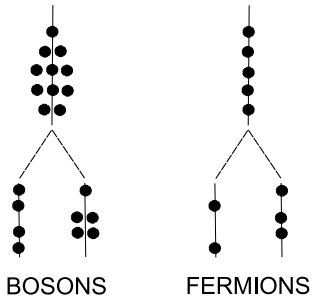


FIGURE 1.19 – *Illustration du bunching pour les bosons et de l'anti-bunching pour les fermions.*

Le même type d'expérience peut être mené avec des électrons mais à cause de la

difficulté de construire un faisceau dense d'électrons, les mesures sont effectuées dans un système mésoscopique à trois terminaux, comme cela a été suggéré [60].

Dans un dispositif à trois terminaux, également appelé jonction en Y, les électrons émis d'un premier réservoir ont la possibilité, au niveau de la séparation du faisceau, d'être réfléchis et de circuler vers un des détecteurs ou d'être transmis et de se propager jusqu'à l'autre détecteur. A cause du principe d'exclusion de Pauli, interdisant aux particules suivant une statistique fermionique d'occuper à plusieurs le même état, les corrélations croisées obtenues sont de signe négatif (cf. Fig. (1.19) de droite).

Plusieurs expériences ont permis de démontrer que le signe des corrélations croisées permettaient de déterminer la statistique des porteurs de courant et ce, dans différents systèmes. Ainsi, l'expérience du groupe de Stanford [83], qui repose sur une analogie du protocole de Hanbury-Brown et Twiss, utilise une fine grille métallique dans un gaz bidimensionnel comme séparateur de faisceau pour les électrons. Une autre expérience a été menée dans le régime de l'effet Hall quantique [84] : un point contact, placé au milieu de la barre de Hall joue le rôle du séparateur de faisceau pour les particules incidentes en deux états de bords transmis. Notons également que des corrélations de signe négatif ont été obtenu dans des expériences d'émission de champ [85].

Les corrélations croisées sont donc un moyen efficace d'obtenir des informations sur la statistique des particules circulant à travers un conducteur mésoscopique.

1.7.5 Dépendance du bruit en fréquence

L'étude de la dépendance en fréquence des corrélations de courant permet d'étudier une gamme plus large de bruit car les échelles d'énergies mises en jeu sont alors au nombre de trois. Comme nous l'avons évoqué dans la partie introductive de cette section, le rapport entre les énergies liées à la température ($k_B T$), à la tension appliquée (eV) et à la fréquence de mesure ($\hbar\omega$) va permettre la mise en évidence de transitions entre différents régimes de bruit. Cependant, quelques précautions, liées justement à ces échelles d'énergie, sont à prendre en considération. D'une part, à travers la prise en compte des interactions électroniques, ce sont maintenant deux types de courant qui interviennent dans les équations dynamiques de la densité de charge et du potentiel : le courant de particules et le courant de déplacement $\epsilon_0 \partial \mathbf{E}/\partial t$. Dans le cas dynamique, le courant total est conservé ce qui n'est plus le cas du courant de particules [62]. Les équations précédentes ont été obtenues dans la limite où la fréquence d'étude est nulle, c'est-à-dire en ne considérant que la conservation du courant de particules, celui de déplacement étant inexistant. Ainsi, le raisonnement précédent n'est plus valide. Cependant, l'étude du transport à fréquence finie peut être rendue possible en restreignant l'échelle d'énergie de telle manière que la matrice de diffusion ne dépende pas de l'énergie, la dépendance

en fréquence du bruit à travers $\hbar\omega$ provenant exclusivement des fonctions de Fermi-Dirac.

Bruit à basse fréquence

Dans le régime que nous venons d'évoquer, la formule (1.63) reste valable à condition d'être généralisée à une situation de dépendance en fréquence dans laquelle nous regardons l'expression du bruit S_+. Elle s'écrit, pour une tension V appliquée :

$$\begin{aligned} S_{L(R)}(\omega) &= \frac{e^2}{\pi\hbar}\Bigg\{ \sum_n T_n^2 \int dE\,(f_L(E,\omega)(1-f_L(E,\omega)) + f_R(E,\omega)(1-f_R(E,\omega))) \\ &+ \sum_n T_n(1-T_n) \int dE\,(f_L(E,\omega)(1-f_R(E,\omega)) + f_R(E,\omega)(1-f_L(E,\omega))) \Bigg\}, \end{aligned} \tag{1.69}$$

qui devient, après intégration sur les énergies :

$$\begin{aligned} S_{L(R)}(\omega) &= \frac{e^2}{\pi\hbar}\Bigg\{ \frac{2\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1} \sum_n T_n^2 \\ &+ \left[\frac{\hbar\omega+eV}{e^{(\hbar\omega+eV)/k_BT}-1} + \frac{\hbar\omega-eV}{e^{(\hbar\omega-eV)/k_BT}-1} \right] \sum_n T_n(1-T_n) \Bigg\}. \end{aligned} \tag{1.70}$$

Telle est donc l'expression de la densité spectrale non symétrisée dans un conducteur mésoscopique connecté à deux réservoirs. Rappelons qu'elle traduit la présence de phénomènes d'émission à fréquence positive et d'absorption à fréquence négative. La version symétrisée de cette formule a également été obtenue [86], [87]. Une autre formulation de cette expression existe et l'équivalence entre les deux versions tient au choix du corrélateur [19]. Nous avons choisi ici de s'intéresser à S_+.

Plusieurs remarques découlent de l'expression (1.70). Tout d'abord, considérer la situation $\omega = 0$ permet de retrouver les formules de la section précédente. Ensuite, le bruit à l'équilibre, soit pour $V = 0$, s'exprime comme :

$$S_{L_{eq}(R_{eq})}(\omega) = \frac{2\hbar\omega G}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}, \tag{1.71}$$

qui n'est autre que le bruit thermique obtenue par le théorème de fluctuation-dissipation. Dans la limite $\omega \to 0$, on retrouve le résultat (1.52). Enfin, à température nulle, les fluctuations de courant à fréquence finie s'écrivent :

$$S_{L(R)}(\omega) = \frac{2e^2\hbar\omega}{\pi\hbar} \sum_n T_n^2 + \begin{cases} \frac{2e^2(eV-\hbar|\omega|)}{\pi\hbar} \sum_n T_n(1-T_n), & \hbar|\omega| < eV \\ 0, & \hbar|\omega| > eV \end{cases} \tag{1.72}$$

Le premier terme de cette expression correspond à un bruit à l'équilibre. Ainsi, la différence dans le comportement du bruit aux fréquences positives et négatives est linéaire en ω. La dépendance en fréquence du bruit est donc représentée par deux droites qui caractérisent trois régimes distincts :

- pour $\hbar|\omega| = eV$, la dérivée du bruit présente une discontinuité, différenciant les deux autres régimes,
- lorsque $\hbar|\omega| > eV$, le bruit total se réduit au bruit d'équilibre, lequel est déterminé par les fluctuations quantiques du vide,
- tant que $\hbar|\omega| < eV$, le bruit obtenu est le bruit total.

Il est d'usage d'introduire alors le bruit d'excès défini par :

$$S_{exces}(\omega) \quad = \quad S(\omega) - S_{eq}(\omega), \tag{1.73}$$

soit :

$$S_{L_{exces}(R_{exces})}(\omega) \quad = \quad \begin{cases} \frac{2e^2(eV-\hbar|\omega|)}{\pi\hbar} \sum_n T_n(1-T_n), & \hbar|\omega| < eV \\ 0, & \hbar|\omega| > eV \end{cases} \tag{1.74}$$

Les comportements des bruits totaux et d'excès sont schématisés sur la figure (1.20).

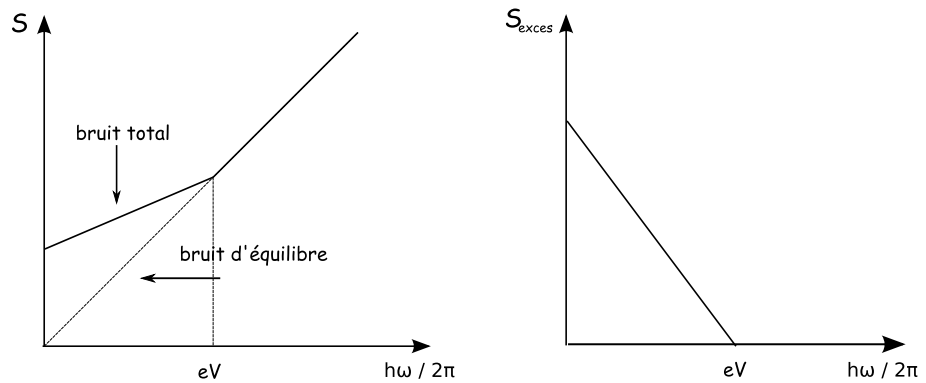


FIGURE 1.20 – *La figure de gauche présente le comportement du bruit dépendant de la fréquence à température nulle. Dans la limite $\hbar\omega > eV$, seul le bruit d'équilibre subsiste. Le schéma de droite illustre le comportement du bruit d'excès. Pour des fréquences plus grandes que la tension appliquée, il est nul.*

1.7.6 Discussion sur la convention du bruit

Reprenons, à présent, la discussion sur la convention à choisir dans la définition de la densité spectrale. En d'autres termes, la question est : lequel des corrélateurs S_+, S_- ou S_{sym} est accessibles par des mesures expérimentales et avec quel mode de détection ?

L'équation (1.71) représente le bruit d'équilibre en fréquence. Cette expression est issue du choix de ne pas symétriser le bruit. Dans le cas où la température dans le système est non nulle, elle est composée d'un terme représentant le bruit thermique et d'un autre terme traduisant le principe d'incertitude de Heisenberg, les fluctutations de point zéro. D'ailleurs, cette contribution est responsable de la brisure de la symétrie entre fréquences négatives et positives (cf. Fig. (1.21)).

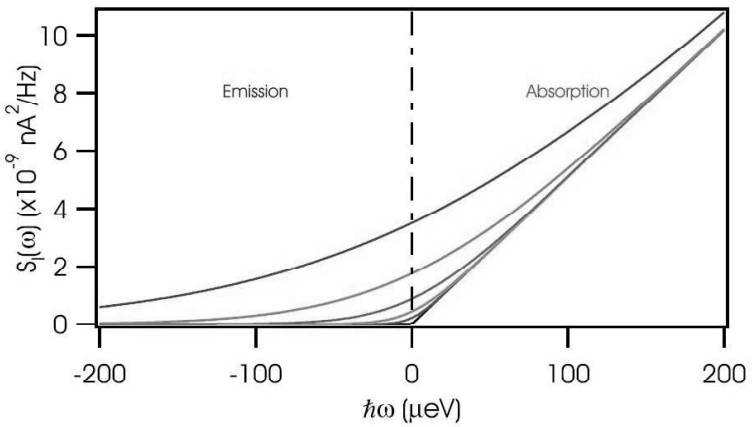


FIGURE 1.21 – *Comportement du bruit non symétrisé S_- d'une résistance de $1k\Omega$ à l'équilibre thermique en fonction de la fréquence d'étude et pour différentes valeurs de la température : de $0mK$ à $800mK$ avec l'augmentation de la valeur des courbes à $\hbar\omega = 0$. On observe que le bruit d'émission est nul à température nulle, mais pas celui d'absorption. La raison en est la contribution permanente des fluctuations de point zéro [88].*

Il a été montré qu'un détecteur passif, c'est-à-dire dans son état fondamental, ne permet pas de mesurer les fluctuations de point zéro car ce type de détecteur fonctionne sur la réception de l'énergie fournie par le système mésoscopique. Or, en mode passif, il lui est impossible d'interagir avec l'échantillon en lui cédant de l'énergie [89]. Il faudrait alors utiliser un détecteur actif, tel qu'un circuit résonnant, qui fournirait de l'énergie au conducteur mésoscopique et par là même permettrait d'accéder aux fluctuations de point zéro.

Certaines expériences ont essayé d'accéder à ces fluctuations quantiques du vide. Citons par exemple l'expérience du groupe de Yale [16], dans laquelle la dépendance du bruit dans un fil d'or diffusif est établie et bien que le comportement de la dérivée du bruit par rapport à la tension V appliquée montre une singularité aux bornes du conducteur lorsque $\hbar\omega = eV$, aucune information n'est obtenue sur les fluctuations de point zéro. Basée sur un autre type d'électronique, l'expérience du groupe de Berkeley [15] mesure le bruit et non sa dérivée aux bornes d'une jonction Josephson (cf. Fig. (1.22)). Outre la mise en évidence de la transition entre régime classique et quantique,

il s'agit d'une des rares expériences à avoir mis en lumière les fluctuations de point zéro.

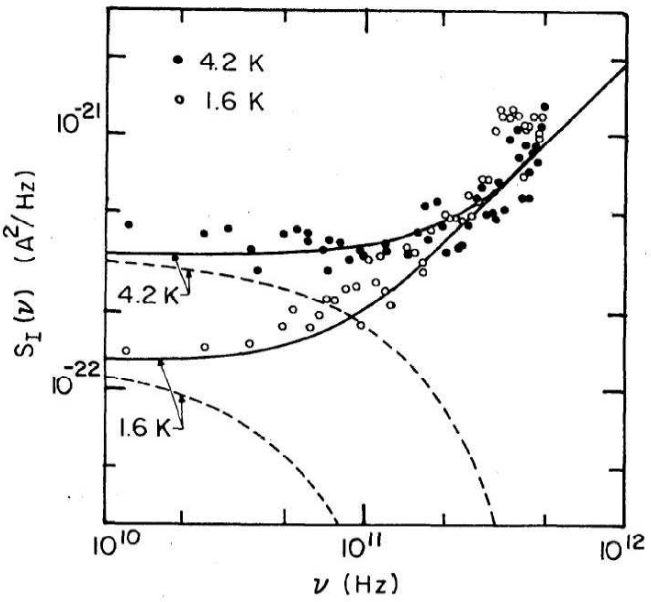


FIGURE 1.22 – *Comportement du bruit d'équilibre en fonction de la fréquence pour deux valeurs de la température. La valeur du rapport entre $\hbar\omega$ et k_BT traduit la transition entre bruits classique et quantique [15].*

Mesurer le bruit non symétrisé revient à être capable de distinguer l'émission d'énergie de l'échantillon vers le détecteur (à fréquence négative) de l'absorption d'énergie par l'échantillon (à fréquence positive). Dans les expériences, il est assez difficile de distinguer bruit symétrisé et non symétrisé tout simplement parce que l'objet de la mesure est le bruit d'excès, lequel est symétrique en l'absence d'interaction électronique. En effet, dans cette situation, les bruits d'excès correspondant aux spectres d'émission et d'absorption sont identiques. De plus, la réponse à ce problème dépend du mode de détection. En effet, l'utilisation d'un amplificateur, comme c'est le cas dans l'expérience du groupe de Yale, semble ne permettre la détection que d'un corrélateur symétrisé. Cependant, une expérience récente a montré qu'il était possible de mesurer séparement les contributions S_+ et S_- du bruit dans une jonction Josephson [17]. Le problème semble donc se cristalliser dans la question du protocole de détection.

Notons que des travaux théoriques, qui se sont intéressés au bruit d'excès non symétriques dans des systèmes mésoscopiques à faible dimension ont montré que ce bruit à haute fréquence portait la signature des interactions coulombiennes, visible grâce à l'analyse du spectre non symétrique du bruit d'excès [90], [91].

Il y a quelques années, G.B. Lesovik et R. Loosen ont proposé une procédure de mesure afin de déterminer quel corrélateur est obtenu [18], dans laquelle le système

mésoscopique est couplé de manière inductive à un détecteur (passif). Le bruit est alors mesuré non pas de manière directe mais à travers les fluctuations de charges détectées dans le circuit LC [20]. Cependant, le bruit mesuré par cette quantité est un mélange des corrélateurs non symétrisés. Une autre proposition consiste à coupler le détecteur et le système de manière capacitive [19]. Cette solution présente l'avantage de permettre la séparation des processus d'émission et d'absorption en utilisant les différents processus inélastiques présents dans un double points quantiques. L'amplitude du courant photo-assisté est relié au bruit du système couplé au détecteur, en s'appuyant sur la théorie du blocage dynamique de Coulomb [92].

Conclusion

Cette thèse s'inscrit pleinement dans le cadre de la physique mésoscopique. La définition de la cohérence de phase, condition nécessaire pour étudier le transport quantique, ainsi que l'importance de la prise en compte des interactions entre électrons ont tout d'abord été établies. Puis, à travers le cas standard d'un conducteur connecté à deux réservoirs et dans lequel des électrons circulent via un ou plusieurs canaux de conduction, l'intérêt de l'étude du courant moyen et de la conductance a été présenté. Afin d'aller plus loin dans l'analyse du transport quantique, les fluctuations de courant ont également été définies et leur utilisation justifiée.

En effet, les corrélations de courant sont un outil indispensable de la physique mésoscopique. En complément des informations fournies par le courant moyen, elles permettent de déterminer la charge des excitations circulant dans l'échantillon conducteur, via l'étude du facteur de Fano, ainsi que leur statistique à travers le signe des corrélations croisées. Dans cette thèse, nous travaillerons sur le bruit en nous basant sur la définition du corrélateur S_-.

Cependant, les systèmes mésoscopiques auxquels nous allons nous intéresser sont de faible dimension, de telle sorte que les interactions entre électrons ne peuvent être négligées. La théorie de la diffusion qui vient d'être présentée ne peut donc suffire pour décrire les propriétés de ces systèmes. Il est donc nécessaire d'utiliser la théorie des liquides de Lüttinger, présentée dans le chapitre suivant.

2

La théorie des liquides de Lüttinger

Sommaire

2.1 Linéarisation du spectre 53
2.2 Bosonisation 56
2.2.1 Introduction de nouveaux champs bosoniques 59
2.3 Expression bosonisée du hamiltonien du système 60
2.3.1 Hamiltonien cinétique 60
2.3.2 Hamiltonien d'interaction 60
2.4 Expression bosonisée du lagrangien et de l'action 63
2.5 Exemples de propriétés d'un liquide de Lüttinger 64
2.5.1 Propriétés thermodynamiques 64
Conclusion 66

Dans les années 50 et 60, un modéle a été construit par Tomonaga [22] et Lüttinger [23] afin de décrire le comportement d'un liquide de Fermi en interaction à une dimension. Ce modèle répondait à la nécessité de traiter correctement les systèmes à basse dimension, dans lesquels apparaissent de nouveaux phénomènes (séparation spin-charge, distorsion de Peierls, ...) qui ne peuvent être décrits correctement par la théorie de Landau. La résolution de ce modèle a été obtenue par Mattis et Lieb [93] mais c'est finalement Haldane [94] qui codifira le concept de liquides de Lüttinger en l'étendant aux systèmes de fermions en interaction et aux bosons à cœur dur sous certaines conditions.

Le modèle des liquides de Lüttinger repose sur deux idées fondamentales : la linéarisation du spectre au voisinage de l'énergie de Fermi et la description des fermions en interaction en termes de bosons libres. Ce passage s'effectue en utilisant la technique dite de bosonisation.

2.1 Linéarisation du spectre

Nous considérons un système unidimensionnel de fermions en interaction formant un fil de longueur L. Le hamiltonien qui le décrit se décompose en un terme cinétique et un terme d'interaction :

$$\mathrm{H} = \mathrm{H}_0 + \mathrm{H}_{\mathrm{int}}. \tag{2.1}$$

Les propriétés à basses énergies et à basse température sont déterminées par les états dont l'énergie est proche de celle de Fermi et nous avons vu à la section 1.5 que l'introduction d'interaction de manière adiabatique provoque l'apparition de paires électron-trou dont l'énergie se situe au voisinage de celle de Fermi. Cela signifie que, dans une bande d'énergie de largeur $\Lambda \ll E_F$ où Λ est le *cut-off* ultraviolet, le spectre est linéarisable.

Par ailleurs, l'analyse spectrale du hamiltonien nécessite de spécifier les conditions aux bords du système. Elles n'influent pas sur les propriétés physiques de la région intermédiaire du système dans la limite thermodynamique. Par commodité, nous choisissons des conditions périodiques, tout en considérant la limite où L est très grand.

Avant de linéariser le spectre, il est important d'énoncer les propriétés qu'il doit satisfaire. Celui-ci doit être sans gap et symétrique. Comme la surface de Fermi se résume à deux points, l'énergie de Fermi est définie par $E(k_{\mathrm{F}}) = E(-k_{\mathrm{F}}) = E_{\mathrm{F}}$. Il existe plusieurs modèles qui remplissent ces conditions, comme le modèle $t - J$ ou encore celui de Hubbard, par exemple.

La linéarisation a pour première conséquence la redéfinition du spectre en deux branches que nous indexons par $r = \pm$ et qui correspondent soit aux électrons se déplaçant de gauche à droite du fil ($r = +$, $k > 0$) soit à ceux circulant de la droite vers la gauche du fil ($r = -$, $k < 0$) (cf. Fig. (2.1*a*)).

Si l'on pose $v_{\mathrm{F}} = \hbar^{-1}\partial_k E(k)$ la vitesse de Fermi, on obtient comme relation de dispersion pour chaque branche :

$$E_r(k) = r\hbar v_{\mathrm{F}}(k - rk_{\mathrm{F}}). \tag{2.2}$$

Cela signifie que l'énergie de telles excitations devient indépendante de k :

$$E(k+q) - E(k) = \hbar r v_{\mathrm{F}} q. \tag{2.3}$$

Le second effet de la linéarisation porte sur la description des excitations (2.2). Pour un transfert d'impulsion q tel que $|q| \ll k_{\mathrm{F}}$, et donc où la dispersion est linéaire, il y a une

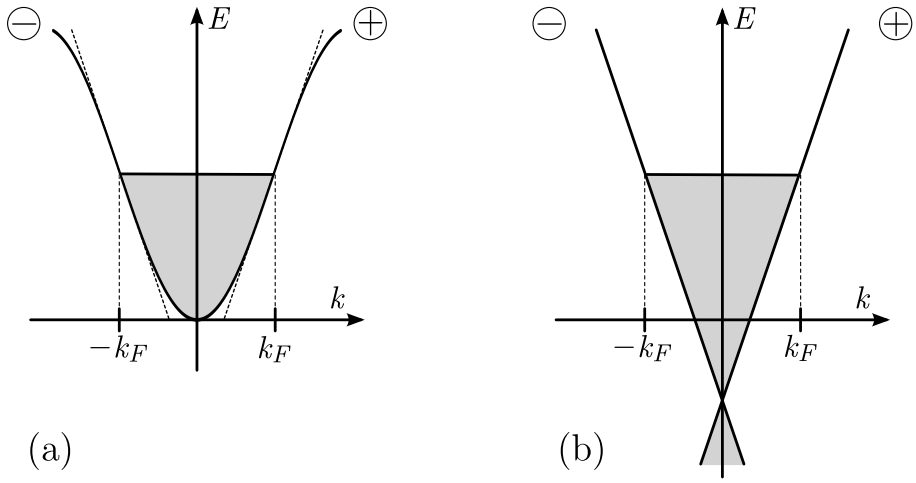


FIGURE 2.1 – *Linéarisation du spectre au voisinage du niveau de Fermi dans le modèle (a) des liquides de Tomonaga et (b) des liquides de Lüttinger. Création de deux branches correspondant aux électrons se déplacant vers la gauche ($r = -$) ou vers la droite ($r = +$).*

forte dégénérescence des paires électron-trou $c^\dagger_\sigma(k-q)c_\sigma(k)$ autour d'un même point de Fermi, où $c^\dagger_\sigma$ (resp. c_σ) est un opérateur fermionique de création (resp. d'annihilation) qui obéit aux relations d'anticommutation $[c_\sigma(q), c^\dagger_{\sigma'}(q')]_+ = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{q,q'}$. σ est relatif au spin du fermion considéré.

On s'intéresse alors à la combinaison de ces excitations :

$$\rho_{r\sigma}(q) \quad = \quad \sum_{rk>0} c^\dagger_\sigma(k-q)c_\sigma(k), \tag{2.4}$$

avec $E(k) \in [E_\mathrm{F} - \Lambda, E_\mathrm{F} + \Lambda]$.

L'opérateur de densité $\rho_{r\sigma}$ possède la même énergie que les excitations qui le composent. Il traduit donc la formation de particules sur chaque branche par superposition de paires électron-trou.

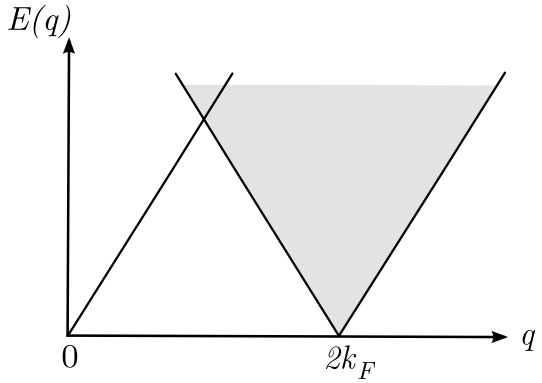


FIGURE 2.2 – *Spectre des excitations particule-trou pour le modèle linéarisé.*

Rappelons que jusqu'ici, la linéarisation du spectre ainsi que ses conséquences sont valables tant que k et $k-q$ appartiennent au domaine de validité défini par Λ autour de l'énergie de Fermi.

Le modèle des liquides de Lüttinger [23] s'obtient en relâchant cette contrainte, c'est-à-dire en prolongeant la linéarisation. On étend le domaine de validité des moments de $k \in [0, +\infty[$ à $k \in]-\infty, +\infty[$ pour la branche $r = +$ et de $k \in]-\infty, 0]$ à $k \in]-\infty, +\infty[$ pour la branche $r = -$ (cf. Fig. 2.1*b*). Cette procédure introduit une infinité d'états d'énergie négative qui n'ont évidemment aucun sens physique. Cependant, leur présence n'ayant aucune incidence sur les propriétés à basse énergie du système, le prolongement de la linéarisation est valable et permet l'utilisation de la technique de bosonisation.
Chaque branche étant maintenant indépendante l'une de l'autre, l'indice r apparaît dans les opérateurs fermioniques de création et d'annihilation ainsi que dans leurs champs associés dans l'espace réel, afin de préciser leur espèce :

$$\psi_{r\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} a_{r\sigma}(k). \tag{2.5}$$

Ces champs obéissent à la relation d'anticommutation $[\psi_{r\sigma}(x), \psi^\dagger_{r'\sigma'}(x')]_+ = \delta_{r,r'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(x-x')$.

L'opérateur de densité est défini en position à partir de ces champs fermioniques $\rho_{r\sigma}(x) = \psi^\dagger_{r\sigma}(x)\psi_{r\sigma}(x)$ et la relation de commutation entre cet opérateur et ce champ est :

$$[\psi_{r\sigma}(x), \rho_{r\sigma'}(x')]_- = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta(x-x')\psi_{r\sigma}(x). \tag{2.6}$$

Ce résultat montre que l'ajout d'un électron au point x se traduit par un pic de Dirac au même point dans la densité. Avec le prolongement de la linéarisation sur toutes les impulsions, la transformée de Fourier de l'opérateur densité s'écrit en fonction des opérateurs fermioniques propres à chaque branche $a_{r\sigma}$:

$$\rho_{r\sigma}(q) = \sum_k a^\dagger_{r\sigma}(k-q) a_{r\sigma}(k), \tag{2.7}$$

$$\rho^\dagger_{r\sigma}(q) = \rho_{r\sigma}(-q). \tag{2.8}$$

Cette dernière propriété est une conséquence du fait que $\rho_{r\sigma}(x)$ est réel. Notons ici qu'on définit les modes zéro, c'est à dire les modes pour $q = 0$, dans cette expression.

Les opérateurs d'espèces différentes commutent et de manière générale, la relation de commutation s'écrit :

$$[\rho_{r\sigma}(q), \rho_{r'\sigma'}(q')]_- = \frac{rq}{2\pi}\delta_{r,r'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{q,-q'}, \tag{2.9}$$

avec, comme conséquence du choix de conditions périodiques $q = 2\pi n/L$, n entier. Ce résultat vérifie l'algèbre $U(1)$ de Kac-Moody [95] c'est pourquoi il est au cœur de la bosonisation. En effet, dans le cadre du modèle des liquides de Lüttinger, il est exact et signifie qu'à cause de la présence d'un nombre infini d'états d'énergie négative (états occupés), les opérateurs de densité suivent des relations similaires à celle d'opérateurs de Bose, qui vérifient également l'algèbre de Kac-Moody. On retrouve alors l'intuition initiale que les fluctuations de densité se comportent comme des opérateurs bosoniques de création et d'annihilation. Ainsi, sur l'état fondamental noté $|0\rangle$, ils agissent comme créateur ou annihilateur d'excitations collectives électron-trou, selon le signe de q. Par exemple :

$$\rho^\dagger_{-\sigma}(q > 0)|0\rangle = 0, \tag{2.10}$$

$$\rho^\dagger_{+\sigma}(q < 0)|0\rangle = 0. \tag{2.11}$$

2.2 Bosonisation

La bosonisation est une procédure technique qui permet la description de fermions en interaction dans un système unidimensionnel en termes de bosons sans interaction et repose sur l'idée suivante : les excitations particule-trou ont un caractère bosonique et sont bien définies à basse énergie. Elle a fait l'objet de nombres d'articles [96], [57], [97], [98], [99], [100].

Comme nous venons de le voir, les excitations élementaires qui existent dans les systèmes unidimensionnels sont collectives et s'écrivent en termess d'opérateurs de densité. De ce constat, nous introduisons de nouveaux opérateurs bosoniques qui ne dépendent pas des branches :

$$b^\dagger_\sigma(q) = i\Big(\frac{2\pi}{|q|}\Big)^{1/2}\big[\Theta(q)\rho_{+\sigma}(-q) + \Theta(-q)\rho_{-\sigma}(-q)\big], \tag{2.12}$$

$$b_\sigma(q) = -i\Big(\frac{2\pi}{|q|}\Big)^{1/2}\big[\Theta(q)\rho_{+\sigma}(q) + \Theta(-q)\rho_{-\sigma}(q)\big], \tag{2.13}$$

où Θ est la fonction de Heaviside. Ces définitions traduisent la situation suivante : l'opérateur de création $b^\dagger_\sigma(q)$ représente la sommation faite sur toutes les paires électron-trou créées par l'action des opérateurs densité de chaque branche.

Ces opérateurs de Bose obéissent aux relations de commutation :

$$\left[b_\sigma(q), b^\dagger_{\sigma'}(q')\right]_- = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{q,q'}, \tag{2.14}$$

qui sont, contrairement aux relations (2.9), sans dimension. Ces opérateurs laissent cependant le nombre de particules sur chaque branche inchangé.

A partir de ces opérateurs de Bose, comme des opérateurs de densité, nous introduisons le champ bosonique suivant :

$$\begin{aligned}\varphi_{r\sigma}(x) &= \frac{-i}{\sqrt{L}}\sum_{rq>0}\left(\frac{2\pi}{|q|}\right)\left[\rho_{r\sigma}(q)e^{iqx} - \rho_{r\sigma}(-q)e^{-iqx}\right]e^{-a|q|/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{rq>0} r\left(\frac{2\pi}{|q|}\right)^{1/2}\left[b_\sigma(q)e^{iqx} + b^\dagger_\sigma(q)e^{-iqx}\right]e^{-a|q|/2}.\end{aligned} \tag{2.15}$$

La constante a est un artefact mathématique introduit afin d'assurer, lorsque $a \to 0$, l'obtention de quantités définies. Cela est nécessaire pour compenser la présence d'états d'énergie négative dans le spectre linéarisé. Cependant, il est plus commode de garder a finie et de la considérer comme une constante du réseau, c'est à dire de l'ordre de Λ^{-1} [101]. Notons qu'il existe d'autres méthodes pour régulariser la théorie des champs comme la procédure d'ordre normal, la technique *point-splitting*, etc ..., méthodes qui donnent toutes des résultats similaires.

En utilisant les relations de commutation (2.9) ou (2.14), on déduit que :

$$\left[\varphi_{r\sigma}(x), \varphi_{r\sigma'}(x'))\right]_- = ir\pi\delta_{\sigma,\sigma'}\mathrm{sgn}(x-x'). \tag{2.16}$$

Par ailleurs, l'opérateur densité s'exprime très simplement en fonction de la dérivée de ce champ bosonique :

$$\rho_{r\sigma}(x) = \frac{r}{2\pi}\partial_x\varphi_{r\sigma}(x). \tag{2.17}$$

Cette formule, associée à l'équation (2.6), signifie qu'introduire un électron à la position x_0 crée un pic de Dirac dans la densité ainsi qu'une marche d'amplitude 2π dans le comportement du champ $\varphi_{r\sigma}(x)$, comme le montre le schéma (2.3), c'est à dire la phase que vont acquérir les autres particules pour s'accommoder de la nouvelle [96], [100].

Or, les opérateurs de densité et les champs bosoniques sont canoniquement conjugués :

$$\left[\varphi_{r\sigma}(x), \rho_{r\sigma'}(x')\right]_- = -ir\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(x-x'). \tag{2.18}$$

Cela permet d'utiliser l'identité suivante. Soient p et q deux opérateurs conjugués cano-

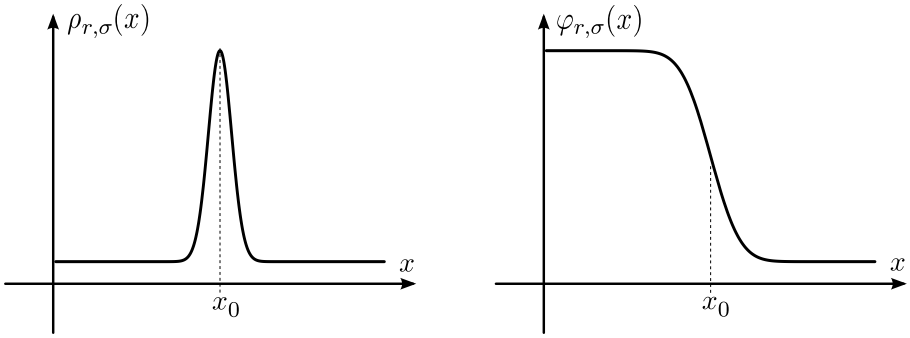


FIGURE 2.3 – *Image du comportement de la densité $\rho_{r\sigma}(x)$ (à gauche) et du champ bosonique $\varphi_{r\sigma}(x)$ (à droite) lors de l'injection d'un électron.*

niques :

$$\left[p(x), q(x')\right] = -i\delta(x - x') \quad \Rightarrow \quad \left[e^{ip(x)}, q(x')\right] = e^{ip(x)}\delta(x - x'). \tag{2.19}$$

La combinaison de cette identité avec la relation (2.6) permet de définir autrement le champ fermionique :

$$\psi_{r\sigma}(x) = A_{r\sigma}(x)e^{i\varphi_{r\sigma}(x)}. \tag{2.20}$$

La fonction $A_{r\sigma}$ se détermine en calculant la valeur moyenne du produit de champ fermionique de même espèce pour un système de fermions sans interaction [102]. En effet, à température nulle, les fonctions de distribution sur chaque branche $n_{r\sigma}$ sont des fonctions de Heaviside telles que $n_{r\sigma}(k) = \Theta(k_{\mathrm{F}} - rk)$. En utilisant cette propriété et l'équation (2.5), il apparaît que :

$$\langle \psi^{\dagger}_{r\sigma}(x)\psi_{r\sigma}(x')\rangle = \frac{1}{L}\sum_k e^{-ik(x-x')}n_{r\sigma}(k) \tag{2.21}$$

$$= \frac{ir}{2\pi}\frac{e^{-rik_{\mathrm{F}}(x-x')}}{(x - x' + ria)}. \tag{2.22}$$

En prenant la limite $a \to 0$, le champ fermionique devient :

$$\psi_{r\sigma}(x) = \frac{F_{r\sigma}}{\sqrt{2\pi a}}e^{irk_{\mathrm{F}}x + i\varphi_{r\sigma}(x)}. \tag{2.23}$$

où l'opérateur $F_{r\sigma}$ est un facteur de Klein. Il s'agit d'un opérateur d'échelle qui, par son action, ajoute ou enlève une particule sur la branche r, ce qu'aucune combinaison d'opérateur bosonique ne peut faire. Il assure ainsi aux champs fermioniques des relations d'anticommutation correctes. Cet opérateur commute par ailleurs avec les opérateurs de Bose et préserve donc les paires électron-trou dans chaque état. Enfin, il obéit

aux relations suivantes :

$$[F_{r\sigma}, F^{\dagger}_{r'\sigma'}]_+ = 2\delta_{r,r'}\delta_{\sigma,\sigma'}, \tag{2.24}$$

$$[F_{r\sigma}, F_{r'\sigma'}]_+ = 0\,, \qquad [F^{\dagger}_{r\sigma}, F^{\dagger}_{r'\sigma'}]_+ = 0. \tag{2.25}$$

Nous venons donc de réexprimer le champ fermionique $\psi_{r\sigma}$ en termes de champ bosonique $\varphi_{r\sigma}$. Cette écriture dans une nouvelle base est l'idée maîtresse de la bosonisation.

2.2.1 Introduction de nouveaux champs bosoniques

La séparation spin-charge est une des caractéristiques propre aux systèmes unidimensionnels. Pour des raisons de praticité, il est d'usage de définir les champs bosoniques par secteur de charge ou de spin plutôt qu'en termes de canaux de conduction. Introduisons alors de nouveaux champs ϕ_{j} et θ_{j} tels que :

$$\varphi_{r\sigma}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_j h_\sigma(\mathrm{j}) \Big(\phi_{\mathrm{j}}(x) + r\theta_{\mathrm{j}}(x)\Big), \tag{2.26}$$

où l'indice j désigne le secteur de charge ($j = c$) ou le secteur de spin ($j = s$). La fonction h_σ permet le passage entre les deux expressions avec $h_\sigma(c) = 1$ et $h_\sigma(s) = \sigma$. Elle possède les propriétés suivantes :

$$h^2_\sigma(\mathrm{j}) = 1\,, \tag{2.27}$$

$$h_\sigma(-\mathrm{j}) = \sigma h_\sigma(\mathrm{j}). \tag{2.28}$$

Les nouveaux champs bosoniques ainsi définis obéissent à la relation de commutation suivante :

$$\big[\phi_{\mathrm{j}}(x), \theta_{\mathrm{j}'}(x')\big]_- = \left(\frac{i}{2}\right)\delta_{\mathrm{j},\mathrm{j}'}\mathrm{sgn}(x - x'). \tag{2.29}$$

2.3 Expression bosonisée du hamiltonien du système

2.3.1 Hamiltonien cinétique

D'après l'équation (2.2), une fois le spectre linéarisé, l'expression de la partie cinétique du hamiltonien du système est :

$$\mathrm{H}_0 = \hbar v_{\mathrm{F}} \sum_{r,k,\sigma} rk a^{\dagger}_{r\sigma}(k) a_{r\sigma}(k). \tag{2.30}$$

Afin de formuler ce hamiltonien comme opérateur bilinéaire d'opérateurs bosoniques, nous nous intéressons à la relation de commutation suivante [93] :

$$\left[\mathrm{H}_0, \rho_{r'\sigma'}(q)\right]_- = r'\hbar v_{\mathrm{F}} q \rho_{r'\sigma'}(q). \tag{2.31}$$

Ce résultat, qui est le fruit de la linéarisation du spectre, signifie que les états créés par l'action de l'opérateur de densité sur un état sont états propres de H_0 d'énergie $r'\hbar v_{\mathrm{F}} q$. Dès lors, en utilisant l'identité de Kronig [103], ce hamiltonien devient :

$$\begin{aligned} \mathrm{H}_0 &= \pi\hbar v_{\mathrm{F}} \sum_{q,r,\sigma} \rho_{r\sigma}(q)\rho_{r\sigma}(-q) \\ &= \pi\hbar v_{\mathrm{F}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_{r,\sigma} \left[\rho_{r\sigma}(x)\right]^2. \end{aligned} \tag{2.32}$$

Nous venons donc d'écrire le hamiltonien cinétique dans deux représentations différentes mais équivalentes. Par une transformation de la base des états propres, les excitations collectives, dont la description était la première motivation, sont maintenant décrites comme les excitations élementaires d'une collection d'oscillateurs harmoniques libres.

Cependant, la technique de bosonisation devient réellement un outil puissant lorsque les interactions sont introduites.

2.3.2 Hamiltonien d'interaction

La forme générale d'un hamiltonien décrivant une interaction instantanée entre deux corps est :

$$\mathrm{H}_{\mathrm{int}} = \frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx' V(x-x') \rho_{\mathrm{fil}}(x) \rho_{\mathrm{fil}}(x'). \tag{2.33}$$

Nous supposons ici, que les interactions sont invariantes d'une part par translation spatiale et à courte portée : $V(x-x') = V_0 \delta(x-x')$ et d'autre part, par rotation de spin.

ρ_{fil} est l'opérateur de densité totale du système unidimensionnel, défini par :

$$\rho_{\text{fil}}(x) \quad = \quad \sum_{r,r',\sigma} \psi^{\dagger}_{r\sigma}(x)\psi_{r'\sigma}(x). \tag{2.34}$$

Les champs fermioniques de cette expresion ont le même indice σ en raison de l'invariance par rapport au spin des particules.

Le développement des sommes sur r et r' fait apparaître, si on ignore les facteurs de Klein, les opérateurs de densité sur chaque branche $\rho_{r\sigma}(x)$ ainsi que des termes croisés de produits de champs fermioniques $\psi^{\dagger}_{r\sigma}(x)\psi_{-r\sigma}(x)$.

Le produit des opérateurs de densité totale dans l'expression du hamiltonien d'interaction se traduit par plusieurs termes qui correspondent chacun à des processus de diffusion auxquels on peut associer une constante de couplage. En référence à la terminologie de la g-ologie [101], nous attribuons les constantes g_4 et g_2 aux processus de diffusion vers l'avant qui font intervenir des transferts d'impulsion très faible $q \ll 2k_{\text{F}}$. Cela correspond respectivement aux produits $\rho_{r\sigma}\rho_{r\sigma}$ et $\rho_{r\sigma}\rho_{-r\sigma}$.

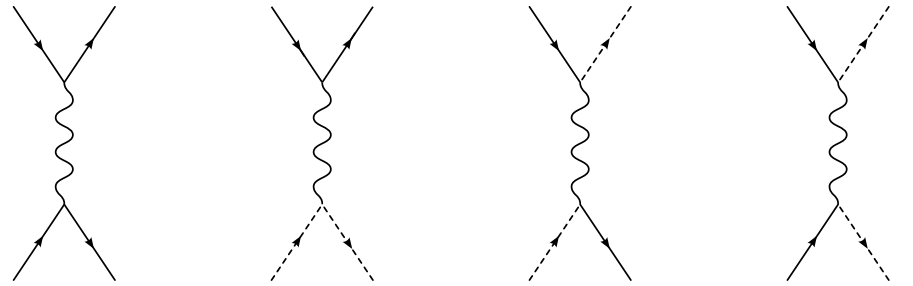


FIGURE 2.4 – *Processus de diffusion entre électrons dans le modèle de g-ologie. Les traits continus et les tirets correspondent à des électrons appartenant, respectivement, aux branches contenant* $-k_{\text{F}}$ *et* k_{F}.

Il existe d'autres processus de diffusion comme celui de rétrodiffuson, noté g_1, dont le transfert d'impulsion qui intervient est de l'ordre de $2k_{\text{F}}$. Il s'exprime comme le produit non réductible en termess d'opérateurs densité de quatre champs femioniques. Enfin, il existe le processus *Umpklapp*, noté g_3, pour lequel q est de l'ordre de $4k_{\text{F}}$, mais qui n'est pertinent qu'à remplissage commensurable. Pour des interactions à longue portée, cette remarque n'est plus exacte [12].

Dans le cas d'un fil de longueur infini ($L \rightarrow \infty$), le processus g_1 est négligeable. Des équations (2.17) et (2.26), on déduit alors l'expression de l'opérateur de densité totale en fonction de champs bosoniques :

$$\rho_{\text{fil}}(x) \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{\pi}}\partial_x\theta_{\text{c}}(x) + \rho_{2k_{\text{F}}}(x), \tag{2.35}$$

où

$$\rho_{2k_F}(x) \quad = \quad \frac{2k_F}{\pi}\cos\left(2k_F + \sqrt{2\pi}\theta_c(x)\right)\cos\left(\sqrt{2\pi}\theta_s(x)\right), \tag{2.36}$$

dont la présence vient des interférences entre électrons de chaque branche se déplaçant dans un même canal. Lorsque nous nous plaçons dans le cas d'un système unidimensionnel de longueur infinie, cette contribution peut être négligée.

Une fois cette expression reportée dans la définition du hamiltonien d'interaction, nous obtenons :

$$H_{int} \quad = \quad \frac{\hbar\tilde{V}}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\Big(\partial_x\theta_c(x)\Big)^2, \tag{2.37}$$

où $\tilde{V} = V(q \sim 0)$ est le potentiel correspondant aux processus faisant intervenir un transfert de moment nul. Ainsi, en sommant les hamiltoniens cinétique et d'interaction, on obtient la formule du hamiltonien total d'un liquide de Lüttinger :

$$H \quad = \quad \sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\hbar v_j}{2}\Big[K_j\big(\partial_x\phi_j(x)\big)^2 + K_j^{-1}\big(\partial_x\theta_j(x)\big)^2\Big] \tag{2.38}$$

où on définit le paramètre d'interaction coulombienne par secteur

$$K_j = \left(1 + \frac{2V_0}{v_F\pi}\delta_{cj}\right)^{-1/2} \Leftrightarrow \begin{cases} K_s & = 1 \\ K_c & = \left(1 + \frac{2V_0}{v_F\pi}\right)^{-1/2} \end{cases}$$

et la vitesse des excitations par secteur

$$v_j \quad = \quad v_F/K_j.$$

H ne dépend alors que de ces deux paramètres qui dépendent, eux-mêmes, du potentiel d'interaction et du secteur (c ou s) des excitations.

Ainsi, en l'absence d'interaction, le paramètre d'interaction coulombienne K_j est égal à 1 dans chaque secteur et les excitations élementaires se propagent à la même vitesse v_F.

Si les interactions sont répulsives ($K_c < 1$), les excitations de charge ou *holons* vont se propager à une vitesse v_c superieure à celle de Fermi. A l'opposé, pour des interactions attractives, la vitesse de déplacement des holons sera inferieure à v_F. En revanche, puisque nous avons supposé des interactions invariantes par rotation de spin ($K_s = 1$), les excitations de spin, ou *spinons*, se déplacent à la vitesse de Fermi sans subir d'influence de l'environnement.

De manière synthétique, la présence d'interaction dans un système unidimensionnel provoque une totale dissociation des excitations en holons (excitations de charge) et

spinons (excitations de spin) se déplaçant à des vitesses différentes.
Des fluctuations de densité de charge et de spin se propageant à des vitesses différentes existent également dans des modèles en dimension supérieures, notamment dans des liquides de Fermi. Le caractère remarquable des systèmes unidimensionnels réside dans le fait qu'il est impossible pour ces modes collectifs de se désintégrer en quasi-particules stables et l'ajout d'un fermion ne génère que des excitations élementaires de charge et de spin.

Nous posons désormais $\hbar = 1$.

2.4 Expression bosonisée du lagrangien et de l'action

Nous terminons cette introduction à la théorie des liquides de Lüttinger par la formulation du lagrangien et de l'action du système d'électrons fortement corrélés à une dimension. En effet, la dynamique des excitations qui circulent dans le système est codée par les fonctions de Green qui sont déterminées par l'action euclidienne.

Définissons un nouveau champ bosonique $\Pi_j(x) = -\partial_x \phi_j(x)$. La relation de commutation (2.29) montre que ce nouveau champ est le conjugué canonique du champ θ_j :

$$\left[\theta_j(x), \Pi_{j'}(x')\right]_- = i\delta_{jj'}\delta(x - x'). \tag{2.39}$$

Au regard de la nature quadratique du hamiltonien total et en utilisant la relation précédente, une analogie avec des variables p et q permet de déduire l'expression du lagrangien $\mathrm{L} = \int dx\{p\dot{q}\} - \mathrm{H}$:

$$\left.\begin{array}{ll} q \rightarrow & \theta \\ p \rightarrow & \Pi_\phi \end{array}\right\} \Rightarrow \mathrm{L}_{\mathrm{fil}} = \sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx\{-\partial_t\theta_j(x)\partial_x\phi_j(x)\} - \mathrm{H}_{\mathrm{fil}}. \tag{2.40}$$

Avant d'introduire l'expression bosonisée du hamiltonien dans celle du lagrangien, nous déterminons, à partir de l'équation d'évolution de Heisenberg et en utilisant la relation (2.29), les équations du mouvement pour les champs ϕ_j et θ_j :

$$\partial_t\theta_j(x,t) \quad = \quad -v_j K_j \partial_x\phi_j(x,t)\ , \ \ \partial_t\phi_j(x,t) = -\frac{v_j}{K_j}\partial_x\theta_j(x,t). \tag{2.41}$$

A partir de ces relations, le lagrangien s'écrit en fonction des dérivées spatiale et temporelle du champ bosonique ϕ_j (la représentation en fonction du champ θ_j s'obtient par le même principe) :

$$\mathrm{L}_{\mathrm{fil}} \quad = \quad \sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{2K_j}\left[v_j^{-1}\left(\partial_t\theta_j(x)\right)^2 - v_j\left(\partial_x\theta_j(x)\right)^2\right]. \tag{2.42}$$

L'action $S = \int dt L$ se déduit de l'expression précédente :

$$S_{\text{fil}} = \sum_j \int dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{2K_j} \left[v_j^{-1} \left(\partial_t \theta_j(x)\right)^2 - v_j \left(\partial_x \theta_j(x)\right)^2 \right]. \tag{2.43}$$

Cette action décrit un oscillateur harmonique dont la vitesse de phase v_j est renormalisée par la présence d'interaction et où θ_j est un champ de déplacement. Ceci montre clairement les avantages de la représentation bosonisée des opérateurs.

Utilisée avec la représentation des intégrales de chemin de Feynman, cette fonctionnelle est le point de départ que nous prendrons, au chapitre suivant, pour des calculs de mécanique quantique.

2.5 Exemples de propriétés d'un liquide de Lüttinger

Une fois les bases de la bosonisation introduites, il est intéressant de voir comment elles peuvent simplifier le calcul de certaines informations d'un liquide de Lüttinger. Les propriétés les plus simples à obtenir d'un point de vue calculatoire aparraissent à travers les quantités thermodynamiques.

2.5.1 Propriétés thermodynamiques

Le système unidimensionnel de fermions en interactions est maintenant décrit par un modèle de bosons libres. Rappelons sa relation de dispersion :

$$E(k) = \hbar \sum_j v_j |k|. \tag{2.44}$$

Nous nous intéressons ici à la chaleur spécifique, la compressiblité et la susceptibilité de spin.

Chaleur spécifique

Elle est définie par la variation de l'énergie en fonction de la température, à pression constante [100] :

$$C_v(T) = \frac{d}{dT} \Big(E(p) f_{B,F}(E(p)) \Big), \tag{2.45}$$

où $f_{B,F}(E(p))$ est la fonction de distribution d'une statistique bosonique ou fermionique.

L'introduction de l'expression de l'énergie dans celle de la chaleur spécifique

conduit, pour un système de bosons libres, à :

$$C_v^B = \Big(\frac{\pi k_B}{3}\Big) k_B T \sum_j \frac{1}{v_j}, \tag{2.46}$$

qui dépend des secteurs de charge et de spin, lesquels contiennent les deux branches du spectre, caractéristique d'un liquide de Lüttinger. Cette expression est à comparer à la chaleur spécifique d'un gaz de fermions unidimensionnel :

$$C_v^F = 2\Big(\frac{\pi k_B}{3}\Big) \frac{k_B T}{v_F}, \tag{2.47}$$

où le facteur 2 qui apparaît ici vient de la prise en compte des deux branches du spectre.

Nous remarquons que chaque chaleur spécifique dépend linéairement de la température. Il s'agit, en effet, du comportement standard d'un gaz de fermions à n'importe quelle dimension et que, comme cela a été montré au chapitre précédent, le modèle de bosons libres peut être vu comme celui d'une chaîne d'oscillateurs.

Le rapport de ces chaleurs spécifiques s'écrit alors, dans le cas d'invariance par rotation de spin ($K_s = 1$) :

$$\frac{C_v^B}{C_v^F} = \frac{\gamma}{\gamma_0} \quad , \qquad \frac{\gamma}{\gamma_0} = \frac{1}{2}\Big(\frac{v_F}{v_c} + 1\Big). \tag{2.48}$$

Il ne dépend que des paramètres K_j et v_j.

Compressibilité et susceptibilité de spin

La compressibilité définit la variation de volume, de surface, ou comme ici de longueur d'un solide sous l'effet d'une pression. Cependant, nous choisissons de la définir comme une fonction de l'énergie de l'état fondamental par rapport à la densité totale [96] :

$$\kappa^{-1} = \frac{\partial^2 E_0(\rho)}{\partial \rho_{\text{fil}}^2}. \tag{2.49}$$

En se limitant aux contributions à variation lente de l'opérateur densité (premier terme de l'équation (2.35)), nous obtenons pour le rapport entre compressibilité de système de bosons libres et de gaz de fermions :

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = \frac{v_F K_c}{v_c} = K_c^2, \tag{2.50}$$

qui ne dépend que du paramètre d'interaction coulombienne du secteur de charge K_c. Par ailleurs, il s'agit du seul secteur affecté car c'est le seul apparaissant dans l'opérateur

densité. Nous pouvons également nous intéresser à la susceptibilité de spin définie par :

$$\chi^{-1} = \frac{\partial^2 E(\sigma)}{\partial \sigma_{fil}^2}, \tag{2.51}$$

où σ_{fil} est l'opérateur de densité de spin. Cependant, comme nous l'avons évoqué précédemment, les interactions sont invariantes par rotation de spin. Le secteur de spin n'y est donc pas sensible et ses paramètres ne sont pas renormalisés. Nous trouvons alors un rapport des susceptibilités de spin égal à l'unité.

Notons cependant que des mesures expérimentales de la chaleur spécifique, de la compressibilité ou encore de la susceptibilité de spin, peuvent permettre de déterminer les valeurs des paramètres K_j et v_j pour n'importe quel modèle. Cela permet de déterminer les interactions dans un liquide de Lüttinger.

Cependant, toutes ces propriétés sont identiques à celle obtenues dans le cas d'un liquide de Fermi. La présence des paramètres K_j et v_j n'a qu'un effet renormalisant sur les quantités propres à un système sans interaction. Ce constat permet de mettre en lumière la difficulté à distinguer un liquide de Lüttinger d'un liquide de Fermi par la présence d'une séparation spin-charge ou de comportement en loi de puissance de certaines propriétés du système.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté et utilisé la technique de bosonisation afin de rendre quadratique et donc diagonalisable le hamiltonien d'un système de fermions en interaction en une dimension, en le décrivant par un modèle de bosons libres. Le modèle ainsi obtenu est résoluble pour des interactions, même très fortes. En revanche, la solution reste limitée à des processus de diffusion vers l'avant.

Cette technique nous a également permis de déterminer les expressions bosonisées du lagrangien et de l'action euclidienne qui sont nécessaires pour la détermination des fonctions de Green, lesquelles portent les informations pertinentes pour l'étude des propriétés d'un système.

De manière générale, nous avons retrouvé une correspondance systémique entre les opérateurs d'un système fermionique et ceux d'un système bosonique, déjà bien connue et très utilisée.

3

Transport hors équilibre et propriétés d'un liquide de Lüttinger

Sommaire

3.1 Fonctions de corrélations 69
3.1.1 De l'intérêt des fonctions de corrélations retardées 69
3.2 Fonctions de Green hors équilibre 69
3.2.1 Théorie des perturbations usuelle 70
3.2.2 Formalisme de Keldysh 72
3.2.3 Expression des fonctions de Green fermioniques et bosoniques 75
3.3 Propriétés spectrales d'un liquide de Lüttinger 77
3.3.1 La densité d'états du fil quantique 77
3.3.2 La fonction spectrale 79
3.3.3 Fonctions de corrélations à n-particules 86
Conclusion 87

Les propriétés thermodynamiques ne montrent pas clairement le caractère propre à un liquide de Lüttinger, comme la séparation spin-charge ou un comportement en loi de puissance. Il paraît nécessaire de s'intéresser à d'autres quantités s'appuyant sur le calcul de fonctions de corrélations. Elles peuvent être reliées aux propriétés du spectre, comme la fonction spectrale ou la densité d'états, ou propres aux phénomènes de transport tels que le courant, le bruit, la conductance, etc ...

Le choix du modèle d'un liquide de Lüttinger simplifie le calcul des fonctions de corrélations d'un système d'électrons fortement corrélés. En effet, la représentation bosonique des opérateurs nous assure que leur valeur moyenne est donnée par une moyenne

de fonctions gaussiennes et la détermination des fonctions de corrélations est alors exacte. Nous en verrons quelques applications dans ce chapitre.

3.1 Fonctions de corrélations

3.1.1 De l'intérêt des fonctions de corrélations retardées

Les fonctions de Green retardées ou avançées sont reliées à des quantités mesurables et jouent un rôle essentiel en matière condensée. Les deux premières sections de ce chapitre sont consacrées à leur calcul.

Commençons par les fonctions de corrélations retardées comme la conductivité ou la susceptibilité. Dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, nous considérons un système perturbé par une source extérieure dépendante du temps. Le hamiltonien de ce système se décompose en un terme d'équilibre H_0 et un terme de perturbation $H_{pert} = \sum_k \alpha_k(t) A_k(t)$ où $\alpha_k(t)$ est une source extérieure (champ magnétique, champ électrique, pression, ...) et A_k est une observable du système qui lui est couplée (aimantation, courant, densité, ...). La moyenne temporelle de l'opérateur $A_k(t)$ s'exprime grâce à la formule de Kubo [47], [48] :

$$\langle A_k \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_l G_{kl}^R(t-t')\alpha_l(t')dt', \tag{3.1}$$

où $G^R(t-t')$ est la fonction de réponse retardée définie par

$$G_{kl}^R(t-t') = -i\Theta(t-t')\langle [A_k(t), A_l(t)] \rangle. \tag{3.2}$$

La fonction de Heaviside Θ exprime le principe de causalité qui traduit le fait qu'une mesure au temps t ne peut dépendre que de la perturbation aux temps antérieurs.

Dans ce chapitre, nous sommes particulièrement intéressés par les fonctions de Green retardée ou avancée à une particule. Il existe plusieurs méthodes pour les obtenir. Nous en utiliserons deux. La première consiste à calculer la fonction de Matsubara en fréquence imaginaire puis de la prolonger analytiquement. Une autre méthode utilise la théorie des perturbations en temps réel [102].

3.2 Fonctions de Green hors équilibre

Au chapitre 1, pour un liquide de Fermi, le courant et le bruit étaient étudiés dans le cadre du formalisme de Landauer qui repose sur la théorie des perturbations. Celle-ci permet l'étude de systèmes où le déséquilibre provoqué par l'introduction adiabatique de perturbations n'est pas suffisant pour empêcher le retour du système à son état fondamental.

Or, nous cherchons à calculer des quantités physiques dans un système perturbé de manière importante où il n'est pas assuré que le système retrouve son état d'équilibre même après un temps asymptotiquement grand.

Au début des années 60, une méthode développée en théorie des champs a été proposée pour calculer des fonctions de corrélations d'un système hors de l'équilibre. Cette méthode est une extension directe de la théorie des perturbations, communément appelée formalisme de Schwinger-Keldysh [26]. Elle repose sur la transcription de la théorie perturbative à l'équilibre aux situations hors de l'équilibre. Pour cette raison, elle permet d'aller au-delà de la théorie de la réponse linéaire. Le formalisme de Keldysh est très utile dans le traitement de systèmes hors de l'équilibre thermique, de phénomènes de transport ou encore de problèmes à l'équilibre où le prolongement analytique de Matsubara devient difficile à mettre en œuvre. Cette méthode a été présenté dans plusieurs articles de revue auquel on pourra se référer pour une présentation complète [102], [104], [105].

Avant d'arriver à la description du formalisme de Keldysh et de ses applications, rappelons brièvement comment décrire un système à l'équilibre à travers la détermination de fonctions de Green.

3.2.1 Théorie des perturbations usuelle

La théorie des perturbations usuelle traite de systèmes dont l'évolution est réversible. Pour avoir accès à ses propriétés, il est nécessaire de calculer les moyennes d'opérateurs ordonnés dans le temps. Le système est décrit par le hamiltonien $\mathrm{H} = \mathrm{H}_0 + \mathrm{H}_{\mathrm{int}}$. Les situations où la thermodynamique à l'équilibre peut être utilisée sont appelées situations d'équilibre où l'on définit la fonction de Green à une particule à température nulle [102] :

$$G(x,t;x',t') = -i\frac{\langle\Psi_0|\mathrm{T}(\psi_H(x,t)\psi_H^\dagger(x',t'))|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}, \tag{3.3}$$

où $|\Psi_0\rangle$ est l'état fondamental exact c'est-à-dire état propre de H et $\psi_H(x,t)$ est un opérateur écrit en représentation de Heisenberg. L'opérateur T ordonne les opérateurs dans le temps. Ainsi, son action sur deux opérateurs $A(t)$ et $B(t)$ est donnée par :

$$\mathrm{T}(A(t)B(t')) = \begin{cases} A(t)B(t') & \text{si } t > t', \\ \pm B(t')A(t) & \text{si } t < t', \end{cases}$$

où le signe ($\pm$) traduit la nature bosonique ou fermionique des opérateurs.

Il est plus commode d'écrire ces opérateurs et ces états en représentation d'interaction lorsqu'une perturbation dépendante du temps est appliquée au système. Ainsi,

$$\widetilde{\Psi}(x,t) = U(t)\Psi(t=0), \tag{3.4}$$

$$\widetilde{A}(t) = e^{i\mathrm{H}_0 t}A(0)e^{-i\mathrm{H}_0 t}, \tag{3.5}$$

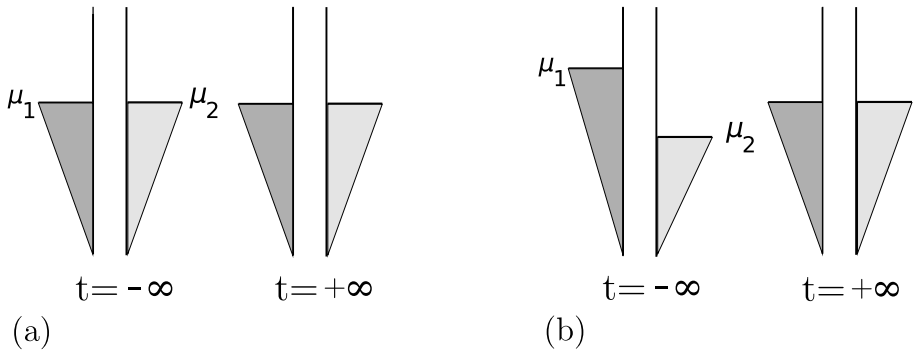


FIGURE 3.1 – *Exemple de systèmes dont l'évolution est (a) réversible, où les états initial et final sont les mêmes à une phase près et (b) irréversible, où ces états sont différents. μ_1 et μ_2 font références aux potentiels chimiques de deux réservoirs avec une barrière isolante entre eux.*

où $U(t) = e^{i\mathrm{H}_0 t} e^{-i\mathrm{H}t}$ est l'opérateur d'évolution. Cette transformation simplifie le problème en le réduisant à une série de perturbations.

Introduisons à présent la matrice $S(t,t') = U(t)U^\dagger(t')$ qui est un produit ordonné dans le temps [102], [106]. Elle obéit à la propriété $S(t,t'') = S(t,t')S(t',t'')$. En effet, le comportement de cette matrice est régi par l'équation différentielle

$$\partial_t S(t,t') \quad = \quad \partial_t U(t)U^\dagger(t') = -i\mathrm{H}_{\mathrm{pert}}(t)S(t,t'), \tag{3.6}$$

qui admet comme solution

$$S(t,t') \quad = \quad \mathrm{T}\left(\exp\left(-i\int_{t'}^{t} \widetilde{\mathrm{H}}_{\mathrm{pert}}(t_1)dt_1\right)\right). \tag{3.7}$$

Cet opérateur décrit l'évolution du système induite par le hamiltonien de perturbation.

Ainsi que le montre l'équation (3.3), le calcul de la fonction de Green nécessite de définir l'état fondamental exact $|\Psi_0\rangle$ qui est, rappelons-le, état propre de H. Nous n'avons aucune connaissance directe sur cet état. En revanche, il est possible de l'exprimer en fonction d'une quantité connue, l'état fondamental sans perturbation $|\Phi_0\rangle$, qui est l'état propre de H_0. La connection entre $|\Phi_0\rangle$ et $|\Psi_0\rangle$ s'obtient en utilisant le theorème de Gell-Mann et Low [107] :

$$|\Psi_0\rangle \quad = \quad S(0,-\infty)|\Phi_0\rangle, \tag{3.8}$$

$$\langle\Psi_0| \quad = \quad \langle\Phi_0|S(\infty,0). \tag{3.9}$$

Ainsi, la fonction de Green définie à l'équation (3.3) devient :

$$G(x,t;x',t') \quad = \quad -i\frac{\langle\Phi_0|\mathrm{T}(S(\infty,-\infty)\psi(x,t)\psi^\dagger(x',t'))|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle}. \tag{3.10}$$

L'idée qui sous-tend cette nouvelle formulation est que, partant au temps $t \to -\infty$ de l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ d'un système non perturbé, on arrive, au temps $t \to +\infty$ à un état que l'on note $|\Phi(\infty)\rangle$. Le point crucial ici est que cet état final est unique, indépendant de la manière dont les perturbations sont introduites, et est toujours un état fondamental du système (cf. Fig. (3.1.*a*)). C'est pourquoi, états initial et final sont les mêmes à une phase près qui s'écrit :

$$\begin{aligned} e^{i\alpha} &= \langle\Phi_0|\Phi(\infty)\rangle \\ &= \langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle. \end{aligned} \tag{3.11}$$

3.2.2 Formalisme de Keldysh

Les phénomènes que nous cherchons à décrire dans des liquides de Lüttinger (fil quantique, nanotube de carbone) apparaissent suite à l'introduction d'un autre type de perturbation. Le meilleur exemple est le transport issu de l'application d'une différence de potentiel entre deux matériaux (cf. Fig. (3.1.*b*)). Cette perturbation provoque l'irréversibilité de l'évolution du système.

Définitions et outils

Partant d'un état hors équilibre, introduire ou enlever la perturbation ne change rien au fait que le système évolue vers un état final inconnu (cf. Fig. (3.1.*b*)). En effet, l'état fondamental dans lequel se trouve le système au bout d'un temps asymptotiquement grand n'est pas état propre du hamiltonien H_0 dont on connaît le spectre. Cela se traduit, dans la valeur moyenne d'une fonction de corrélations à n-particules, par un produit d'opérateurs partiellement ordonnés dans le temps.

Le principe sous-jacent à la théorie traitant les situations hors équilibre, traduite dans le formalisme de Keldysh, consiste à laisser le système évoluer de $t \to -\infty$ à $t \to +\infty$ puis de renverser cette évolution c'est-à-dire de $t \to +\infty$ à $t \to -\infty$.

Pour mettre en œuvre cette idée, L. V. Keldysh a introduit un contour temporel dans le plan complexe, présenté sur la figure (3.2) [26].

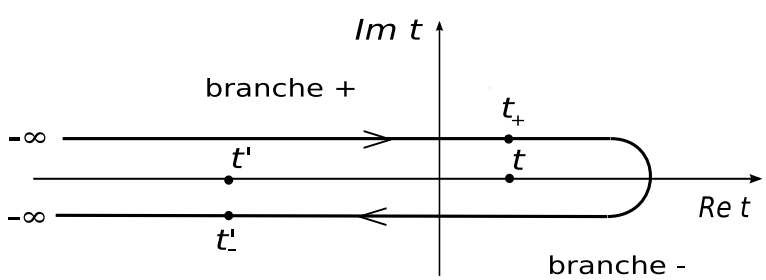


FIGURE 3.2 – *Contour temporel de Keldysh. Les branches sont indexées par $\eta = \pm$.*

L'utilisation de ce contour engendre d'importantes modifications. Pour mettre en valeur ces changements, nous utilisons la même notation pour les opérateurs décrivant l'évolution irréversible d'un système mais indexés par la lettre K. Par exemple, l'opérateur d'évolution devient un opérateur identité : $U_K \equiv 1$. La nouvelle matrice S_K est alors définie par :

$$\begin{aligned} S_K &= S(-\infty,\infty)S(\infty,-\infty) && (3.12)\\ &= \mathrm{T}_K\left(\exp\Big(-i\int_K \widetilde{\mathrm{H}}_{\mathrm{pert}}(t_1)dt_1\Big)\right). && (3.13)\end{aligned}$$

Le prix à payer pour se passer des informations au temps $t \to +\infty$ est l'apparition de degrés de liberté supplémentaires. En effet, le nouvel opérateur d'ordre temporel T_K doit maintenant ordonner sur le contour de Keldysh des opérateurs dont les temps peuvent se trouver sur la branche supérieure ($\eta = +$) ou sur la branche inférieure ($\eta = -$). Nous définissons T_K pour deux opérateurs quelconques $A(t)$ et $B(t)$ comme :

$$\mathrm{T}_K(A(t)B(t')) = \begin{cases} A(t)B(t') & \text{si } t >_K t' \\ \pm B(t')A(t) & \text{si } t <_K t' \end{cases}$$

où $>_K$ et $<_K$ stipulent la relation d'ordre entre deux temps sur le contour Keldsyh. Prenons l'exemple de la figure (3.2) : $t' >_K t$ signifie que t' arrive après t selon ce contour même si dans l'absolu, t' arrive avant t.

Avec ces nouvelles définitions, les valeurs moyennes qui apparaissent dans l'équation (3.10) deviennent :

$$G(x,t;x',t') = -i\frac{\langle\Phi_0|T_K(\psi(x,t)\psi^\dagger(x',t')S_K)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|S_K|\Phi_0\rangle}. \qquad (3.14)$$

Fonctions de Green Keldysh

Selon la position des temps de chaque opérateur sur le contour Keldysh, on définit quatre fonctions de Green différentes. En effet,

$$G^{\eta\eta'}(x,t_\eta;x',t'_{\eta'}) = -i\langle\Phi_0|\mathrm{T}_K(\psi(x,t_\eta)\psi^\dagger(x',t'_{\eta'}))|\Phi_0\rangle, \qquad (3.15)$$

où $\eta^{(')} = \pm$ indexe la branche du contour sur laquelle se trouve le temps de l'opérateur. Ainsi, lorsque les deux temps considérés se trouvent sur la branche supérieure du contour, on obtient la fonction de Green ordonnée dans le temps :

$$\begin{aligned} G^{++}(x,t_+;x',t'_+) &= -i\langle\Phi_0 \mid \mathrm{T}(\psi(x,t_+)\psi^\dagger(x',t'_+) \mid \Phi_0\rangle, \\ &= -i\langle\Phi_0 \mid \mathrm{T}(\psi(x,t)\psi^\dagger(y,t') \mid \Phi_0\rangle. && (3.16)\end{aligned}$$

Lorsque les deux temps se trouvent sur des branches différentes,

$$\begin{aligned} G^{+-}(x,t_+;x',t'_-) &= \pm i\langle\Phi_0 \mid \mathrm{T}(\psi(x,t_+)\psi^\dagger(x',t'_-) \mid \Phi_0\rangle, \\ &= i\langle\Phi_0 \mid \psi^\dagger(x',t')\psi(x,t) \mid \Phi_0\rangle. \end{aligned} \tag{3.17}$$

et

$$\begin{aligned} G^{-+}(x,t_+;x',t'_-) &= -i\langle\Phi_0 \mid \mathrm{T}(\psi(x,t_-)\psi^\dagger(x',t'_+) \mid \Phi_0\rangle, \\ &= -i\langle\Phi_0 \mid \psi(x,t)\psi^\dagger(x',t') \mid \Phi_0\rangle. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Enfin, lorsque les temps se trouvent sur la même branche inférieure, il faut introduire l'opérateur $\overline{\mathrm{T}}$ adapté au contour Keldysh et qui anti-ordonne les temps.

$$\begin{aligned} G^{--}(x,t_+;x',t'_-) &= -i\langle\Phi_0 \mid \mathrm{T}(\psi(x,t_-)\psi^\dagger(x',t'_-) \mid \Phi_0\rangle, \\ &= -i\langle\Phi_0 \mid \overline{\mathrm{T}}(\psi(x,t)\psi^\dagger(x',t')) \mid \Phi_0\rangle. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Ces fonctions ne sont pas indépendantes et satisfont la relation [102] :

$$G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+}. \tag{3.20}$$

Il est possible de définir une matrice 2×2 dont chaque élement est une fonction de Green définie ci-dessus :

$$\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix}.$$

Il est souvent plus efficace d'introduire un nouvel ensemble de fonctions de Green. Cette nouvelle matrice s'obtient par la transformation unitaire suivante :

$$\begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix} = \frac{\mathbf{1} - i\boldsymbol{\sigma}_\mathbf{y}}{2} \begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

où $\boldsymbol{\sigma}_\mathbf{y}$ est la matrice de Pauli,

$$\boldsymbol{\sigma}_\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.22}$$

G^R et G^A sont les fonctions de Green retardée et avancée qui apparaissent déjà dans la théorie des perturbations usuelle et sont définies par :

$$G^R(x,t;x',t') = -i\Theta(t-t')\langle\Phi_0|[\psi(x,t),\psi^\dagger(x',t')]_\mp|\Phi_0\rangle, \tag{3.23}$$

$$G^A(x,t;x',t') = i\Theta(t-t')\langle\Phi_0|[\psi(x,t),\psi^\dagger(x',t')]_\mp|\Phi_0\rangle. \tag{3.24}$$

G^K est la fonction de Green de Keldysh, spécifique aux systèmes hors équilibre, qui s'écrit :

$$G^K(x,t;x',t') = -i\langle\Phi_0|[\psi(x,t),\psi^\dagger(x',t')]_\mp|\Phi_0\rangle. \tag{3.25}$$

Avec ces définitions, la relation (3.20) devient :

$$G^A - G^R = G^{+-} - G^{-+}. \tag{3.26}$$

L'intérêt du formalisme de Keldysh est qu'il ne dépend que de l'intensité de la perturbation qu'un système subit. Les méthodes employées sont donc valables quelle que soit la dimension de ce dernier.

3.2.3 Expression des fonctions de Green fermioniques et bosoniques

A l'aide de ce formalisme, les techniques de calcul propres à la théorie des perturbations usuelle, comme le théorème de Wick, restent utilisables. Nous pouvons alors calculer l'expression de la fonction de Green retardée, qui, rappelons le, donne accès aux quantités physiques mesurables (cf. Sec. 3.1.1). D'après les équations (3.17), (3.18) et (3.23), celle-ci s'écrit via les fonctions de Green fermioniques $\mathcal{G}^{-+}$ et $\mathcal{G}^{+-}$:

$$\mathcal{G}^R(x,t;x',t') = \Theta(t-t')\Big(\mathcal{G}^{-+}(x,t;x',t') - \mathcal{G}^{+-}(x,t;x',t')\Big). \tag{3.27}$$

L'utilisation de l'identité de bosonisation (cf. Eq. (2.23)) permet d'exprimer ces fonctions de Green en termes de champs bosoniques $\varphi_{r\sigma}$. Par exemple :

$$\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(x,t;x',t') = -\frac{ie^{irk_{\mathrm{F}}(x-x')}}{2\pi a}\langle F_{r\sigma}F^\dagger_{r\sigma}e^{i\varphi_{r\sigma}(x,t_-)}e^{-i\varphi_{r\sigma}(x',t'_+)}\rangle. \tag{3.28}$$

L'état $|\Phi_0\rangle$ est maintenant noté $|\rangle$ par commodité. Les facteurs de Klein $F_{r\sigma}$ sont des opérateurs agissant sur cet état mais dans un espace différent de celui des champs $\varphi_{r\sigma}$. La valeur moyenne de cette fonction de Green est séparable en deux termes.
Cependant, en prenant la limite thermodynamique $L \to \infty$, l'ajout d'une particule ou d'un trou au système n'a pas d'importance. Ce constat implique l'égalité $\langle F_{r\sigma}F^\dagger_{r\sigma}\rangle = 1$. D'autre part, en remplaçant le champ $\varphi_{r\sigma}$ par sa définition (2.26), la fonction de Green $\mathcal{G}^{-+}$ devient :

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(x,t;x',t') &= -i\frac{e^{irk_{\mathrm{F}}(x-x')}}{2\pi a} \\ &\times \langle e^{i\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sum_j h(j)\left[\phi_{\mathrm{j}}(x',t'_-)+r\theta_{\mathrm{j}}(x',t'_-)\right]}e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sum_j h(j)\left[\phi_{\mathrm{j}}(x,t_+)+r\theta_{\mathrm{j}}(x,t_+)\right]}\rangle.\end{aligned} \tag{3.29}$$

Nous réécrivons ces produits d'exponentielles d'opérateurs en utilisant une formulation dérivée du théorème de Baker-Hausdorff. Celui-ci stipule que, pour deux opérateurs A et B qui commutent avec $[A, B]$, le produit s'écrit $e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$. La conséquence de cette relation est l'apparition dans la fonction de Green $\mathcal{G}^{-+}$ de produits de champs bosoniques. Afin de calculer cette valeur moyenne, nous faisons appel à une version simplifiée du théorème des bosons indépendants : $\langle e^A \rangle = e^{\langle A^2 \rangle/2}$ [108].

Finalement, la fonction de Green fermionique s'exprime en terme de fonctions de Green bosoniques :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(x,t;x',t') &= -i\frac{e^{irk_{\mathrm{F}}(x-x')}}{2\pi a} \\
&\times \exp\Big\{\frac{\pi}{2}\sum_j G_j^{\phi\phi,-+}(x,t;x',t') + \frac{\pi}{2}\sum_j G_j^{\theta\theta,-+}(x,t;x',t') \\
&+ \frac{\pi}{2}\sum_j rG_j^{\phi\theta,-+}(x,t;x',t') + \frac{\pi}{2}\sum_j rG_j^{\theta\phi,-+}(x,t;x',t')\Big\}. \qquad (3.30)
\end{aligned}$$

où les fonctions de Green bosoniques sont définies par :

$$G_j^{\phi\phi,-+}(x,t;x',t') = \langle\phi_{\mathrm{j}}(x,t)\phi_{\mathrm{j}}(x',t')\rangle - \frac{1}{2}\langle\phi_{\mathrm{j}}^2(x,t)\rangle - \frac{1}{2}\langle\phi_{\mathrm{j}}^2(x',t')\rangle, \qquad (3.31)$$

$$G_j^{\phi\theta,-+}(x,t;x',t') = \langle\phi_{\mathrm{j}}(x,t)\theta_{\mathrm{j}}(x',t')\rangle - \frac{1}{2}\langle\phi_{\mathrm{j}}^2(x,t)\rangle - \frac{1}{2}\langle\theta_{\mathrm{j}}^2(x',t')\rangle. \qquad (3.32)$$

L'expression de ces fonctions dans le cas d'un liquide de Lüttinger de longueur infinie, à température nulle, est calculée dans l'Annexe A. En injectant ces expressions dans celle de la fonction de Green fermionique $\mathcal{G}^{-+}$, elle devient :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(x,t;x',t') &= -i\frac{e^{irk_{\mathrm{F}}(x-x')}}{2\pi a}\prod_j \Bigg[\frac{1}{\left(1+i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{j}}}\left(1+i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}-i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{j}}}} \\
&\times \frac{1}{\left(1+i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}-i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{(1+r)/4}\left(1+i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{(1-r)/4}}\Bigg], \qquad (3.33)
\end{aligned}$$

où $\gamma_{\mathrm{j}} = \frac{1}{8}(\frac{1}{K_{\mathrm{j}}} + K_{\mathrm{j}} - 2)$ est le paramètre non universel.

Les relations entre les fonctions de Green permettent d'en déduire de nouvelles égalités. Ainsi, $\mathcal{G}^{+-}(x,t;x',t') = \mathcal{G}^{-+}(x',t';x,t)$. Cela implique que :

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{+-}_{r\sigma}(x,t;x',t') &= i\frac{e^{irk_{\mathrm{F}}(x-x')}}{2\pi a}\prod_j\left[\frac{1}{\left(1-i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{j}}}\left(1-i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}-i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{j}}}}\right.\\ &\times\left.\frac{1}{\left(1-i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}-i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{(1-r)/4}\left(1-i\frac{(t-t')v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{K_{\mathrm{j}}(x-x')}{a}\right)^{(1+r)/4}}\right].\end{aligned} \tag{3.34}$$

Comme nous pouvons le voir dans l'équation (3.33), les fonctions de corrélations d'un liquide de Lüttinger ont une décroissance en loi de puissance non universelle en x et t et donc montrent des singularités non universelles en q et ω. Ce type de comportement traduit la dimension anormale des fermions [96] et a des conséquences importantes sur les proriétés spectrales du système.

3.3 Propriétés spectrales d'un liquide de Lüttinger

Nous nous intéressons aux propriétés spectrales d'un fil quantique décrit par le modèle de Lüttinger avec spin et où la longueur du système est considérée comme la distance caractéristique la plus grande ($L \to \infty$). Les conditions d'homogénéité du système et d'adiabaticité des interactions impliquent que les fonctions de Green sont invariantes par translation spatiale et temporelle. Cela permet de simplifier leur écriture :

$$\begin{aligned}G(x,t;x',t') &= G(x-x',t-t')\\ &= G(\tilde{x},\tilde{t}).\end{aligned}$$

Deux quantités mesurables sont étudiées dans cette section en vue d'obtenir des informations sur le spectre : la densité d'états et la fonction spectrale.

3.3.1 La densité d'états du fil quantique

La densité d'états (DOS) donne accès au nombre d'états moyen disponible du système indépendamment du remplissage de ces niveaux d'énergies. Elle est un exemple simple des propriétés spectrales et correspond à un balayage du spectre en énergie en un point x fixé. La DOS est définie par [97] :

$$\rho(x,E) = 2\pi\sum_n|\langle n|\Psi^\dagger(x)|0\rangle|\delta(E_n-E_0-E), \tag{3.35}$$

avec E_0 l'énergie de l'état fondamental et E_n l'énergie d'un état excité.

Nous choisissons comme point de départ une définition équivalente :

$$\rho_{r\sigma}(x,\Omega) \quad = \quad -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t}e^{i\Omega\tilde{t}}\mathcal{G}^R_{r\sigma}(x,x,\tilde{t})\right], \tag{3.36}$$

où $\mathcal{G}^R$ est la transformée de Fourier en temps de la fonction de Green retardée qui dépend du spin σ et de la branche r.

La DOS est calculable analytiquement et, dans le cas d'un liquide de Lüttinger de longueur infinie, devient :

$$\rho_{r\sigma}(x,\Omega) \quad = \quad \frac{1}{2\pi\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1)v_F}\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_c}|\Omega|^{2\gamma_c}\Theta(|\Omega|)e^{-a|\Omega|/v_F}. \tag{3.37}$$

$\mathbf{\Gamma}$ est la fonction gamma et $\gamma_c = \frac{1}{8}(K_c + K_c^{-1} - 2)$ est le paramètre non universel du secteur de charge. Les interactions sont supposées invariantes par rotation de spin, donc $\gamma_s = 0$. Le rapport v_F/a définit la fréquence de coupure ω_c. La présence de $e^{-a|\Omega|/v_F}$ s'explique par le fait que nous prenons une valeur finie du cut-off a.

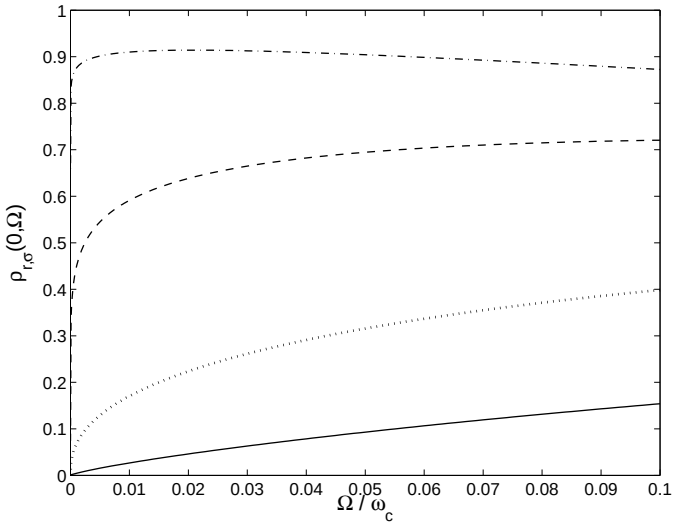


FIGURE 3.3 – *Densité d'états d'un liquide de Lüttinger de longueur infinie pour différentes valeurs du paramètre d'interaction coulombienne :* $K_c = 0.15$ *(trait plein),* $K_c = 0.3$ *(pointillé),* $K_c = 0.5$ *(tiret),* $K_c = 0.75$ *(tiret-pointillé).*

Du fait de l'homogénéité du système, la densité d'états est indépendante de la position le long du fil ainsi que de la branche du spectre considérée.

La figure (3.3) montre le comportement en loi de puissance de la densité d'états, comportement qui dépend de la force des interactions dans le système. Deux points importants sont à remarquer. D'une part, les valeurs de la densité d'états augmentent lorsque le couplage dû aux interactions est moins fort. Pour un balayage en fréquence loin du niveau de Fermi, la hausse du paramètre d'interaction coulombienne induit un

changement dans son profil : elle passe d'un comportement très légèrement parabolique ($K_c = 0.15$) à un comportement quasi-constant ($K_c = 0.75$). En se référant à l'équation (3.37), ce phénomène s'explique par le fait que l'exposant $2\gamma_c$ diminue pour tendre vers 0 quand K_c augmente pour tendre vers 1.

D'autre part, sans s'intéresser précisement à son comportement asymptotique ($|\Omega| \to 0$), la densité d'états tend vers 0 quand on s'approche de E_F. Ceci est totalement différent du comportement d'un liquide de Fermi ("système unidimensionnel sans interaction"). En effet, lorsque $K_c = 1$, la DOS est constante et de valeur 1 sur toute la plage de fréquence étudiée car les branches du spectre sont linéaires (cf. Eq. (2.2)). Ce constat montre qu'aucune excitation individuelle ne survit dans un liquide de Lüttinger. La densité d'états met en évidence la dimension anormale des opérateurs fermioniques. Cependant, la particularité des systèmes unidimensionnels de fermions en interaction réside dans le comportement en loi de puissance de ces fonctions de corrélations et dans la séparation spin-charge. Une voie pour décrire la propagation découplée de spinons et de holons est de s'intéresser au comportement de fonctions de corrélations dynamiques, c'est-à-dire possédant une dépendance en moment et en énergie (resp. en position et en temps) telle que la fonction spectrale.

3.3.2 La fonction spectrale

La spectroscopie d'un matériau par photo-émission est devenu l'outil central pour observer ses propriétés spectrales. En effet, elle permet de connaître directement la structure électronique à travers la fonction spectrale [109]. Les techniques les plus souvent employées sont l'ARPES (angle resolved photo-emission spectroscopy) et la PES (photo-emission spectroscopy) dont le principe est le suivant [110], [111] : un électron est arraché au système par effet photo-électrique. L'analyse de son énergie et de sa direction permet de reconstruire la structure du matériau et de recueillir des informations sur ses propriétés.

En revanche, les IPES (inverse photo-emission spectroscopy) et BIS (bremsstrahlung isochromat spectroscopy) mesurent la réponse du matériau à l'injection d'un électron. La combinaison des deux permet ainsi de mesurer la fonction spectrale. Les aspects expérimentaux et techniques des méthodes de spectroscopie ont été traités dans plusieurs livres et articles de revue [110], [112], [113].

L'intérêt principal de la photo-émission dans les systèmes d'électrons fortement corrélés réside dans le fait que la forme des spectres obtenus contient des informations sur la nature des interactions. Cet aspect est donc essentiel dans l'étude de systèmes unidimensionnels où l'importance des intéractions est forte et modifie la nature des excitations.

D'une manière plus théorique, la fonction spectrale peut être interprétée comme

la probabilité qu'un électron ait un moment q et une énergie $\hbar\omega$ [96], [102] et permet de comprendre le comportement des excitations d'un matériau lorsqu'une particule est ajoutée ou enlevée à celui-ci. Elle est définie par :

$$A_{r\sigma}(q,\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,\mathcal{G}^R_{r\sigma}(q,\omega). \tag{3.38}$$

Explicitement, la fonction spectrale devient :

$$\begin{aligned} A_{r\sigma}(q,\omega) &= -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left(\mathcal{G}^R_{r\sigma}(q,\omega) - \mathcal{G}^A_{r\sigma}(q,\omega)\right) \\ &= A^{-+}_{r\sigma}(q,\omega) - A^{+-}_{r\sigma}(q,\omega). \end{aligned} \tag{3.39}$$

Chaque partie de cette fonction est indexée en référence aux fonctions de Green $\mathcal{G}^{-+}$ et $\mathcal{G}^{+-}$ dont elle dépend,

$$A^{-+}_{r\sigma}(q,\omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t}e^{i(\omega\tilde{t}-q\tilde{x})}\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(\tilde{x},\tilde{t})\right]. \tag{3.40}$$

Comme cela est montré dans l'Annexe B, seul le calcul de $A^{-+}_{r\sigma}(q,\omega)$ est nécessaire, car sur une même branche, les deux parties de la fonction spectrale sont connectées via :

$$A^{-+}_{r\sigma}(q,\omega) = A^{+-}_{r\sigma}(-q,-\omega). \tag{3.41}$$

Finalement, dans le cas d'un liquide de Lüttinger où les interactions sont invariantes par rotation de spin ($K_s = 1$), les propriétés spectrales se déduisent de l'expression suivante

après substitution des équations (3.33) et (3.34) dans l'expression (3.40) :

$$
\begin{aligned}
A_{r\sigma}(q,\omega) &= \left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_c} \frac{(1+K_c^{-1})^{1/2}}{(1-K_c^2)^{\gamma_c}} \frac{1}{(1-K_c)^{1/2}} \frac{1}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)} \\
&\times \left\{ \left(\omega - r\tilde{k}_r v_F\right)^{2\gamma_c-1/2} \Theta\left(\omega - r\tilde{k}_r v_F\right) \exp\left\{ \frac{-a\omega}{v_c+v_F}\left(1+K_c^{-1}\right)\right\} (\omega + r\tilde{k}_r v_c)^{-1/2} \right. \\
&\times \left[\frac{\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)}{\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1/2)} \Theta\left((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c) - 2(\omega - r\tilde{k}_r v_F)\right) \right. \\
&\times \; {}_2F_1\Big(1/2, \gamma_c+1/2; 2\gamma_c+1/2; \frac{2(\omega - r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}\Big) \\
&+ \; \Theta((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))\Theta(2(\omega - r\tilde{k}_r v_F) - (1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)) \frac{\sqrt{\pi}\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)}{\mathbf{\Gamma}(1+\gamma_c)} \\
&\times \left(\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega - r\tilde{k}_r v_F)}\right)^{\gamma_c+1/2} {}_2F_1\Big(\gamma_c+1/2, 1-\gamma_c; 1+\gamma_c; \frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega - r\tilde{k}_r v_F)}\Big) \Bigg] \\
&+ \; \left. (\tilde{k}_r \to -\tilde{k}_r, \omega \to -\omega) \right\}. \qquad (3.42)
\end{aligned}
$$

où $\omega_c = v_F/a$ est la fréquence de coupure, ${}_2F_1(a,b;c;z)$ la fonction hypergéométrique confluente, $\gamma_c = \frac{1}{8}(K_c + K_c^{-1} - 2)$ le paramètre non universel du secteur de charge et où $\tilde{k}_r = q - rk_F$ est la différence entre le moment de la particule (trou) injectée et le moment de Fermi de la branche r [114].

La formule (3.42) met en évidence la présence de points critiques en $\omega \to -r\tilde{k}_r v_c$, $\omega \to r\tilde{k}_r v_F$ et $\omega \to r\tilde{k}_r v_c$. Des produits de fonctions de Heaviside, on déduit que la fonction spectrale est segmentée en quatre zones sur la plage de fréquence étudiée :

1) $\Theta\left(-\omega + r\tilde{k}_r v_F\right)\Theta((K_c-1)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))\Theta(-2(\omega - r\tilde{k}_r v_F) + (1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)) = 1$ correspondant à $\omega < -r\tilde{k}_r v_c$,

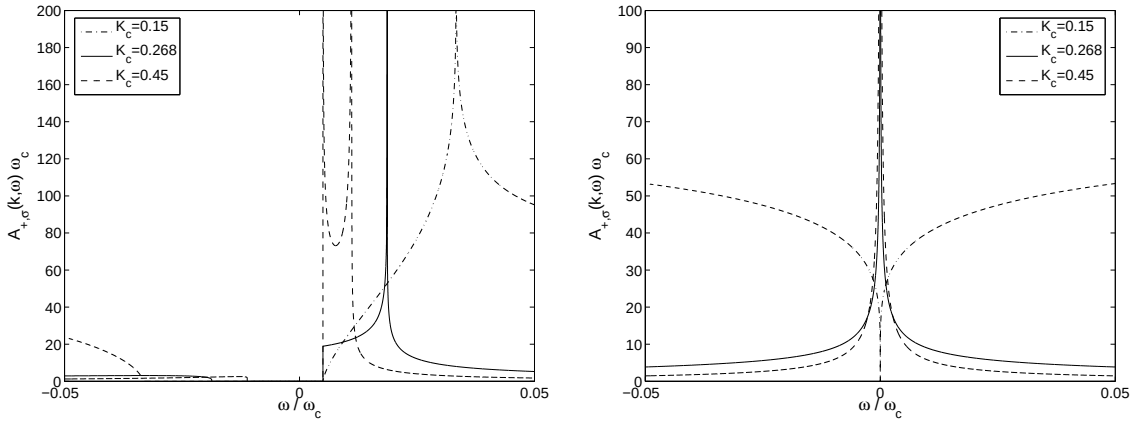
2) $\Theta\left(-\omega + r\tilde{k}_r v_F\right)\Theta\left((K_c-1)(\omega+r\tilde{k}_r v_c) + 2(\omega - r\tilde{k}_r v_F\right) = 1$ soit, $-r\tilde{k}_r v_F < \omega < \tilde{k}_r v_F$ où la fonction spectrale est nulle,

3) $\Theta\left(\omega - r\tilde{k}_r v_F\right)\Theta\left((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c) - 2(\omega - r\tilde{k}_r v_F\right) = 1$ qui traduit la condition $r\tilde{k}_r v_F < \omega < r\tilde{k}_r v_c$,

4) $\Theta\left(\omega - r\tilde{k}_r v_F\right)\Theta((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))\Theta(2(\omega - r\tilde{k}_r v_F) - (1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))$ qui signifie que $\omega > r\tilde{k}_r v_c$.

L'étude du spectre peut se résumer à analyser le comportement de la fonction spectrale propre à la branche $r = +$ lorsque $q > k_F$. $\omega < 0$ correspond au spectre de photo-émission et $\omega > 0$ au spectre de photo-émission inverse. La restriction $\tilde{k}_+ > 0$ ne limite pas les informations sur le spectre car les branches $r = \pm$ sont symétriques (cf. Fig. (2.1.*b*)). Cela signifie que regarder la fonction spectrale de la branche $r = -$ pour une particule (trou) injectée avec un moment $q < -k_F$ montre le même comportement que celui que nous présentons. Par ailleurs, les situations, que l'on pourrait appeler les situations croisées, donnent accès à des informations qui sont déjà décrites lorsque $q > k_F$ et $r = +$ en pratiquant une réflexion par rapport à $\omega = 0$ [115].

Les courbes présentées sur la figure (3.4.*a*) montrent le comportement de la fonction spectrale pour différentes valeurs du potentiel d'interaction à partir de l'injection d'un électron dans le système de moment q et d'énergie $\tilde{k}_+ v_F/\omega_c = 0.005$.



(a) $\tilde{k}_+ v_F/\omega_c = 0.005$ (b) $\tilde{k}_+ v_F/\omega_c = 0$

FIGURE 3.4 – *Fonction spectrale d'un liquide de Lüttinger de longueur infinie en fonction de ω/ω_c pour différentes valeurs du paramètre K_c. L'échelle des valeurs de la fonction spectrale pour $K_c = 0.268$ a été multipliée par 2 et celle de $K_c = 0.15$ par 100.*

On remarque immédiatement la présence de deux singularités dans le spectre de photo-émission inverse aux points critiques $\omega \to \tilde{k}_+ v_F$ et $\omega \to \tilde{k}_+ v_c$ traduisant la présence d'excitations de spin et de charge. En comparaison avec le cas d'un gaz ou d'un liquide Fermi où la fonction spectrale est un Dirac ou une Lorentzienne, le poids spectral principal se trouve entre ces deux pics. L'existence même de ces deux singularités traduit l'absence d'excitations élementaires de type quasi-particules dans le système. En effet, une particule injectée se décompose automatiquement en spinons et en holons.

La force des interactions joue un rôle important dans la séparation spin-charge. Dans l'expression spectrale, elle apparaît à travers l'exposant γ_c. Ainsi, en augmentant la force du couplage, la divergence en $v_F \tilde{k}$ tend à disparaître et un étalement du poids spectral

sur la plage de fréquence plus importante apparaît. Celui-ci s'écarte vers des énergies plus grandes en valeur absolue. La disparition de la divergence en $v_F\tilde{k}$ s'explique par le fait qu'autour de cette fréquence, la fonction spectrale dépend principalement de $\Theta(\omega - rv_F\tilde{k})(\omega - rv_F\tilde{k})^{2\gamma_c - 1/2}$. Ainsi, lorsque K_c diminue, l'exposant de cette expression devient positif. D'ailleurs, pour $K_c = 0.15$, la fonction spectrale ne présente plus de singularité, le transfert du poids spectral sur une plage de fréquence plus importante ayant obscurci la manifestation de la séparation spin-charge. Par contre, les effets de la dimension anormale des fermions qui dominent alors sont visibles.

Le potentiel d'interaction règle également la largeur du poids spectral principal qui diminue lorsque les interactions diminuent. Les deux singularités se rapprochent pour n'en former qu'une unique pour $K_c = 1$. D'autres phénomènes, liés à l'absence de quasi-particules dans le système, sont à remarquer, par exemple la présence inédite d'un poids spectral faible mais non nul dans le spectre de photo-émission. Ce phénomène est spécifique aux liquides de Lüttinger avec spin et à deux branches [115], [116].

Notons également que la singularité ou la divergence qui apparaît pour une valeur de l'énergie égale à $\tilde{k}_+ v_F$ représente la création de spinons suite à l'injection d'un électron dans le système. La position de ce point critique est indépendante de la force des interactions seulement parce qu'elles sont invariantes par rotation de spin ($v_s = v_F$), c'est-à-dire que le secteur de charge est le seul touché par le couplage.

Le phénomène le plus intéressant, montré par la figure (3.4.*b*), est la mise en évidence du caractère unique d'un liquide de Lüttinger. En effet, quand un sysème de fermions sans interaction présente une fonction spectrale en Dirac, un liquide de Lüttinger montre une divergence en $\omega = 0$ et un poids spectral faible mais non nul lorsqu'on s'éloigne de cette limite. On remarque que l'augmentation de la valeur du paramètre d'interaction coulombienne provoque un affinement de la fonction spectrale.
Cette courbe, à défaut de montrer clairement la séparation spin-charge, met en valeur l'effet des interactions sur la fonction spectrale. A $K_c = 0.15$ (couplage très fort), il n'y a plus de divergence. Le poids spectral provenant principalement de la formule $|\omega|^{2\gamma_c - 1}$, le passage d'une divergence à un creux avec la diminution du paramètre d'interaction coulombienne se déduit du passage d'une valeur négative à une valeur positive de l'exposant. Cette même expression permet également de comprendre pourquoi, même lorsque $q = k_F$ c'est-à-dire que spinons et holons possèdent le même moment, on ne retrouve pas le comportement d'un liquide de Fermi avec interaction mais une divergence en loi de puissance dont l'exposant est controlé par le paramètre d'interaction coulombienne K_j.

Le mécanisme qui génère le poids spectral est schématisé par les figures (3.5.a) et (3.5.*b*). De manière qualitative, la séparation spin-charge s'explique par le fait qu'un électron injecté dans le système avec un moment q se décompose de manière auto-

matique en excitations de charge de moment $q - p$ et de spin de moment $q + p$, avec $-q \leq p \leq q$. Cela peut se voir à travers la superposition des relations de dispersion de chaque type d'excitations : deux branches pour les holons où l'énergie s'écrit $E_r = r\hbar v_c \tilde{k}_r$ et deux branches pour les spinons avec $E_r = r\hbar v_F \tilde{k}_r$ (cf. Fig. (3.5.*a*)). L'énergie du système à $N + 1$ particules est alors :

$$E^{N+1} = \frac{1}{2}\Big[v_c(q-p) + v_F(q+p)\Big], \tag{3.43}$$

et $v_F q \leq E^{N+1} \leq v_c q$. Cela explique que le poids spectral maximal se situe aux fréquences comprises entre $v_F \tilde{k}$ et $v_c \tilde{k}$. Mais il faut également prendre en compte les processus de diffusion (*forward scattering*) dus aux interactions coulombiennes pour expliquer les valeurs faibles mais non nulles de la fonction spectrale à des fréquences telles que $\omega > v_c \tilde{k}$. En effet, une fois l'électron injecté et décomposé en holons et spinons, ces processus provoquent la création d'excitations particule-trou sur chaque branche du spectre et ceci à partir des excitations de charge nouvellement créées, comme le montre le schéma (3.5.*a*).

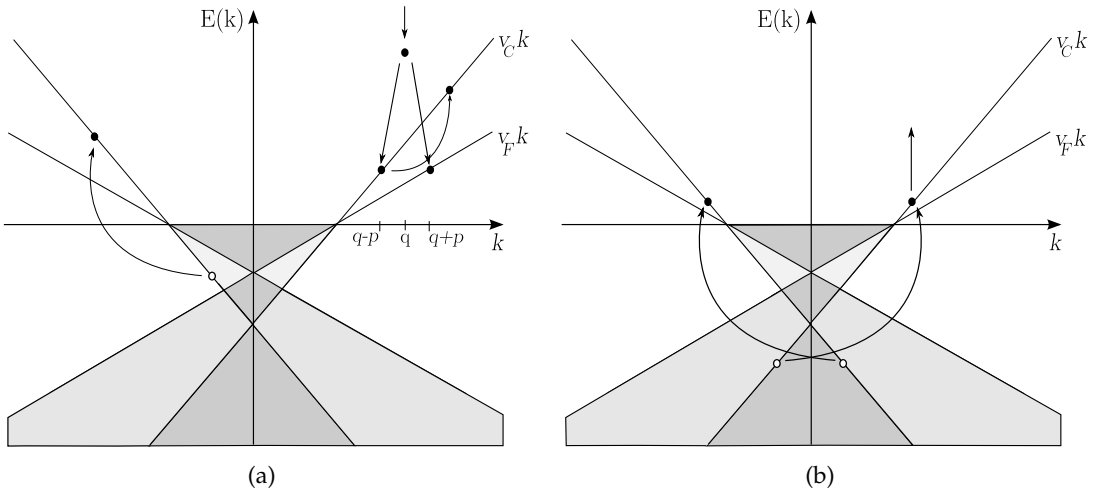


FIGURE 3.5 – *Schémas décrivant les processus générant le poids spectral pour $\tilde{k}_+ > 0$. (a) : décomposition d'une particule en holons et spinons puis boost des excitations de charge par processus de diffusion. (b) : processus inverse, l'injection d'un trou (ou l'éjection d'une paticule) succède aux processus de diffusion.*

En ce qui concerne le spectre de PE (fréquence négative), il ne s'agit plus de l'injection mais de l'éjection d'un électron du système (ou de l'injection d'un trou) de moment q et d'énergie $\hbar\omega$, le processus est simplement inversé. Comme le montre la figure (3.5.*b*), les processus de diffusion apparaissent avant l'extraction de l'électron. En effet, il y a tout d'abord création d'excitations électron-trou dont le moment est supérieur à celui du trou injecté afin d'avoir un électron au dessus de l'énergie de

Fermi, puis extraction de cette particule par effet photo-électrique. Cette partie de la fonction spectrale pour $r = +$ n'existe que parce que le modèle considéré tient compte de deux branches dans le spectre, la branche *fantôme* $r = -$ ayant une influence sur le spectre des excitations.

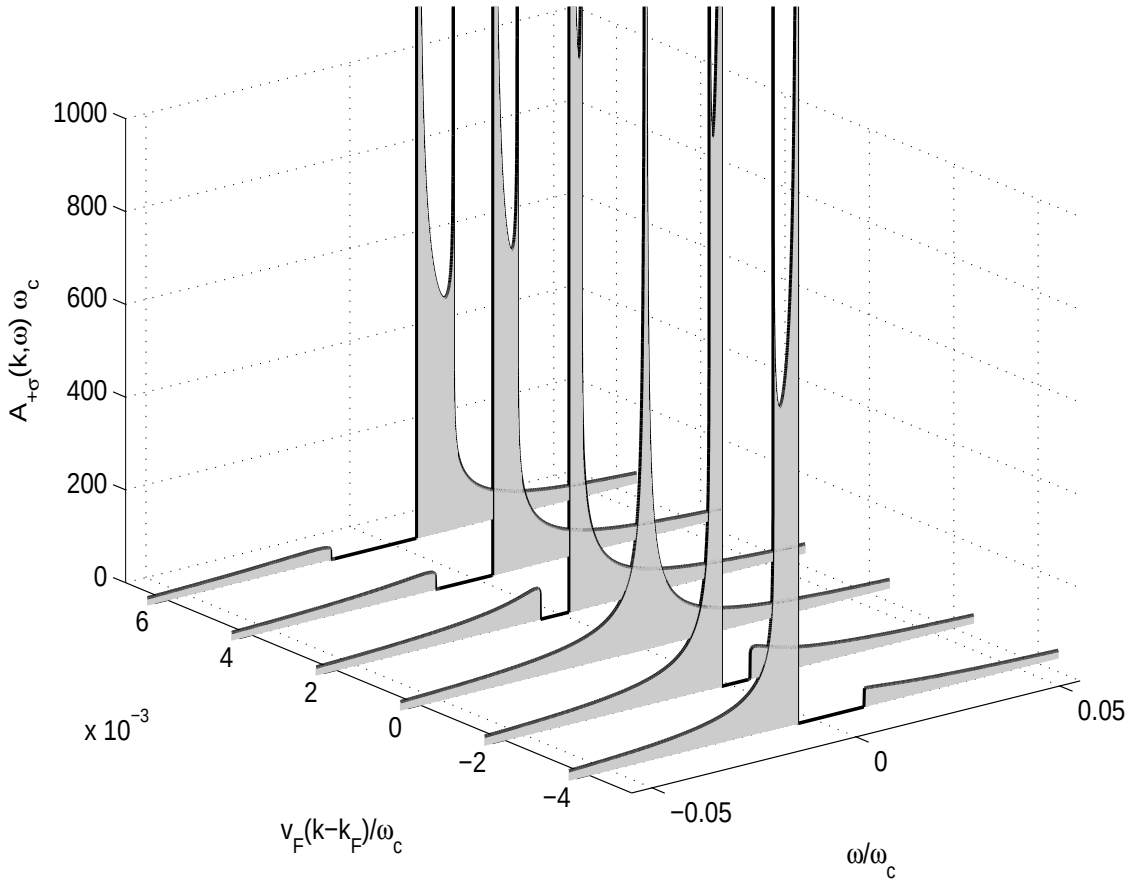


FIGURE 3.6 – *Comportement de la fonction spectrale pour* $K_c = 0.4$, *en fonction de* ω/ω_c *et de* $\tilde{k}v_F/\omega_c$.

La figure (3.6) montre clairement le transfert du poids spectral principal de la partie PEI ($\omega > 0$) à la partie PE ($\omega < 0$) lorsque le moment de la particule injectée est supérieur à k_F ($\tilde{k} > 0$) ou inférieur à k_F ($\tilde{k} < 0$).

La fonction spectrale a été calculée et son comportement analysé sur la base d'un spectre linéarisé. Il existe cependant des études théoriques sur la fonction spectrale qui tiennent compte de la courbure réelle du spectre [117].

3.3.3 Fonctions de corrélations à n-particules

Il est légitime de s'intéresser, dans le cadre des propriétés spectrales d'un liquide de Lüttinger, aux fonctions de corrélations à plusieurs particules. Par exemple, la fonction de corrélations densité-densité fait intervenir une série de termes qui correspondent aux vecteurs d'onde $q \approx 0$, $q \approx \pm 2k_{\mathrm{F}}$, $q \approx 4k_{\mathrm{F}} \ldots$, telle que [57], [96] :

$$O_\rho = \rho_0(x) \overset{2.35}{=} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \partial_x \theta_{\mathrm{c}}(x), \tag{3.44}$$

$$O_{CDW} = \sum_\sigma \psi^\dagger_{+,\sigma}(x)\psi_{-,\sigma}(x) \overset{2.36}{=} \rho_{2k_{\mathrm{F}}}(x), \tag{3.45}$$

$$O_{SDW} = \sum_\sigma \psi^\dagger_{+,\sigma}(x)\psi_{-,-\sigma}(x) = \sigma_{2k_{\mathrm{F}}}(x), \tag{3.46}$$

où $\sigma_{2k_{\mathrm{F}}}(x) = \frac{2k_{\mathrm{F}}}{\pi} \cos\left(2k_{\mathrm{F}} + \sqrt{2\pi}\theta_{\mathrm{c}}(x)\right) \cos\left(\sqrt{2\pi}\phi_{\mathrm{s}}(x)\right)$ est l'opérateur de fluctuations de densité de spin.

Dans le cas d'interaction invariante par rotation de spin ($K_{\mathrm{s}} = 1$), les fonctions de corrélations de charge et de spin présentent un comportement en loi de puissance. Nous reprenons ici les notations de H.J. Schulz [57] :

$$\begin{aligned} \langle \rho(x)\rho(0)\rangle &= \frac{K_{\mathrm{c}}}{\pi x^2} + A_1 \cos(2k_{\mathrm{F}}x) x^{-(1+K_{\mathrm{c}})} \ln(x)^{-3/2} \\ &+ A_2 \cos(4k_{\mathrm{F}}x) x^{-4K_{\mathrm{c}}} + \ldots , \end{aligned} \tag{3.47}$$

$$\langle \sigma(x)\sigma(0)\rangle = \frac{1}{\pi x^2} + B_1 \cos(2k_{\mathrm{F}}x) x^{-(1+K_{\mathrm{c}})} \ln(x)^{1/2} + \ldots , \tag{3.48}$$

où les facteurs A_i et B_i caractérisent le modèle choisi.

La transformée de Fourier de ces quantités donne accès aux susceptibilités de charge et de spin en $2k_{\mathrm{F}}$ et $4k_{\mathrm{F}}$ qui sont des lois de puissance [115]. En effet, des singularités apparaissent aux points critiques $\pm v_{\mathrm{F}} q$ et $\pm v_{\mathrm{c}} q$. Cependant, même si les quantitiés CDW et SDW sont sensibles à la séparation spin-charge, elles possèdent une structure symétrique contrairement à la fonction spectrale car elles font intervenir des mélanges d'opérateurs fermioniques des branches $r = +$ et $r = -$. En revanche, la fonction de corrélations en $4k_{\mathrm{F}}$ diverge aux points $\pm v_{\mathrm{c}} q$, ce qui exclut toute interprétation de son comportement en terme de séparation spin-charge. Cette différence se comprend en se référant aux identités obtenues à l'équation (3.44).

Conclusion

Le formalisme Keldysh, introduit en début de chapitre, a permis l'obtention des fonctions de Green à température nulle nécessaires aux calculs des fonctions de corréla-

tions. L'expertise des propriétés spectrales d'un liquide de Lüttinger de longueur infinie s'est appuyée su l'étude de la densité d'états et de la fonction spectrale. Ces quantités ont mis en évidence les deux grandes caractéristiques d'un système unidimensionnel avec spin, à savoir,

- les fonctions de corrélations présentent un comportement en loi de puissance (dimension anormale des fermions) dont l'exposant ne dépend que d'un paramètre, celui des interactions coulombiennes K_c ;
- la séparation spin-charge : les excitations existant dans un tel système sont collectives et, selon qu'elles soient de charge ou de spin, se déplacent à des vitesses différentes.

L'existence impossible de quasi-particules dans un système d'électrons fortement corrélés est alors montrée. La question de l'expérience dans ces systèmes se pose alors. Comment observer le caractère *liquide de Lüttinger* d'un métal ? D'un point de vue théorique, il est légitime de décrire les excitations en termes de holons et de spinons. Cependant, ces objets sont non invariants par transformation de jauge. En d'autres termes, ce ne sont pas des quantités physiques.

Nous faisons ici une brève revue des expériences qui ont conduit à montrer le caractère *liquide de Lüttinger* d'un métal. Citons, par exemple, les études menées sur des fils et des points quantiques [118], [119]. Les mesures obtenues par spectroscopie Raman ont montré la linéarité de la dispersion des plasmons, caractéristiques d'un gaz d'électrons unidimensionnel, et la valeur de la vitesse de propagation des modes de charge est en accord avec les prévisions théoriques [120].

En revanche, les résultats obtenus par PE ou par ARPES sur des conducteurs quasi-unidimensionnel ne sont pas aussi clairs [121], [122], [123], [113], [124]. Nombre d'expériences menées sur des matériaux inorganiques ont révélé une faible intensité de la photo-émission traduisant l'absence de saut à l'énergie de Fermi pour la fonction de distribution. Le caractère *liquide de Lüttinger* pourrait donc être validé si certains paramètres étaient maitrisés, comme le couplage électron-phonon.

Cependant, ces expériences sont souvent en accord avec l'analyse théorique. Notons tout de même que d'autres pistes théoriques ont été explorées pour expliquer les phénomènes observés, tels les liquides de Fermi marginaux [125].

4

Transport dans un nanotube de carbone connecté à deux électrodes

Sommaire

4.1 Présentation des nanotubes de carbone 91
4.1.1 Méthodes de fabrication 91
4.1.2 Propriétés électroniques d'un nanotube de carbone 91
4.1.3 Dispositifs expérimentaux et étude des propriétés de transport 93
4.1.4 Présentation du modèle 95
4.2 Liquides de Lüttinger dans les nanotubes de carbone 96
4.2.1 Théorie effective à basse énergie 97
4.2.2 Propriétés de transport d'un nanotube de carbone 100
4.2.3 Cas d'un nanotube de longueur infinie 103
4.3 Propriétés de transport dans un nanotube connecté à des électrodes 108
4.3.1 Modèle 108
4.3.2 Courant moyen et corrélations de courant à fréquence nulle 109
4.3.3 Analyse des résultats 110
4.3.4 Corrélations courant-courant à fréquence finie 113
4.4 Transport photo-assisté 117
Conclusion 121

Depuis leur découverte par S. Iijima en 1991 dans des résidus de synthèse de fullerènes [126], les nanotubes de carbone n'ont cessé de faire l'objet d'études théoriques et expérimentales, afin de comprendre leur structure et de développer leur utilisation. En effet, élastique et creux, ils sont deux fois plus léger que l'aluminium et dix fois plus

résistant que l'acier. Ils présentent une meilleure conductivité électronique que le cuivre et une conductivité thermique supérieure à celle du diamant. Leur intérêt scientifique ne vient pas seulement du fait qu'ils présentent les mêmes caractéristiques que le graphite mais également de leur comportement électronique unidimensionnel.

4.1 Présentation des nanotubes de carbone

4.1.1 Méthodes de fabrication

Les nanotubes de carbone sont obtenus par différentes méthodes de fabrication comme la technique de l'arc électrique, l'ablation laser, le dépot chimique en phase vapeur ou encore la conversion de monoxyde de carbone à haute pression.

La production de nanotube de carbone par décharge d'arc consiste à appliquer un fort courant entre deux électrodes de graphite dans une enceinte remplie de Helium [127]. L'anode, dopée au nickel [128], au fer [129] ou encore au cobalt [130] se consume, formant un plasma qui se condense sur l'autre électrode. Les atomes de carbone s'agglutinent alors sur ce catalyseur métallique et croissent sur quelques micromètres de longueur. Cette technique produit une large gamme de nanotube, principalement des multi-feuillets.

La méthode d'ablation au laser, qui suit un principe similaire, repose sur la destruction d'une électrode composite graphite-métal par l'utilisation d'un rayonnement laser très intense pulsé ou continu [131]. Les nanotubes de carbone mono-feuillets obtenus sont souvent structurés en *fagot* par la présence des interactions de Van der Waals. Il est alors possible de les connecter à des électrodes afin de réaliser des mesures de transport.

Dans la déposition chimique en phase vapeur, des catalyseurs métalliques décomposent un gaz hydrocarboné à haute température. Les atomes de carbone provenant de la phase saturée en particules métalliques précipitent sur le substrat, formant des structures tubulaires solides.

Enfin, la conversion de CO à haute pression permet la fabrication de nanotube de carbone mono-feuillet dont la taille et le diamètre peuvent être controlés précisement. L'oxyde de carbone en phase gazeuse est mélangé en faible quantité à un précurseur métallique de type $Fe(CO)_5$ dans une chambre à réaction [132]. Le processus d'obtention des nanotubes est similaire aux techniques d'évaporation chimique.

4.1.2 Propriétés électroniques d'un nanotube de carbone

Ces objets tubulaires de taille nanoscopique peuvent être vus comme issus de l'enroulement en cylindre d'un ou de plusieurs plans de graphène. Il existe donc une infinité de géométrie possible pour les nanotubes de carbone qui sont différentiables par leur diamètre mais également par l'orientation de l'axe du cylindre donnée par $\vec{T}$. L'enroulement se fait selon un vecteur du réseau $\vec{C_h} = m\ \vec{a_1} + n\ \vec{a_2}$ appelé vecteur chiral qui s'exprime en fonction des vecteurs du réseau de Bravais $\vec{a_1}$ et $\vec{a_2}$ et de deux indices entiers n et m tels que $0 \leqslant m \leqslant n$ (cf. Fig. (4.1)).

Un nanotube de carbone est donc caractérisé par la valeur de ces indices qui sont

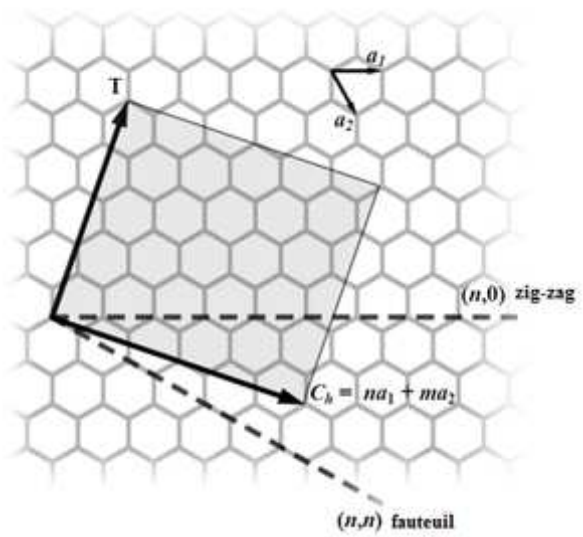


FIGURE 4.1 – *Plan de graphène : $\vec{C}_h$ est le vecteur chiral, $\vec{a_1}$ et $\vec{a_2}$ sont les vecteurs du réseau de Bravais et $\vec{T}$ est le vecteur indiquant l'axe du tube (basée sur [133]).*

reliés au diamètre d et à l'angle chiral θ :

$$d = \frac{a}{\pi}(m^2 + mn + n^2)^{1/2}, \tag{4.1}$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{\sqrt{3}m}{(m+2n)}\right), \tag{4.2}$$

où a est la constante du réseau du graphène et θ est l'angle formé par le vecteur $\vec{T}$ et le vecteur perpendiculaire à la direction *fauteuil* (cf. Fig. (4.1)). La valeur des indices m et n décrit trois types d'enroulement et donc permet une classification des nanotubes de carbone en *zig-zag* lorsque $m = 0$, en *fauteuil* pour $n = m$ et chiraux pour tous les autres.

Le couple (n, m) détermine également la nature métallique, semi-conductrice ou isolante du nanotube [131]. La condition de métallicité d'un nanotube de carbone s'écrit : $2n + m = 3I$ où I est un entier, mais la courbure du cylindre peut provoquer l'apparition d'un gap très étroit qui implique un comportement semi-conducteur du nanotube. Cependant, les nanotubes *fauteuil* sont pourvus d'une forte symétrie assurant leur caractère métallique.

L'utilisation des nanotubes de carbone dépend de leur structure et donc des indices n et m. D'un point de vue expérimental, cela nécessite une résolution spatiale suffisante pour permettre leur identification. Plusieurs techniques existent à cet effet. Citons par exemple, l'utilisation de STM (Scanning Tunneling Microscopy) [135] ou de SAED (Selected Area Electron Diffraction) afin de déterminer le diamètre d et l'angle chiral θ [126], [129].

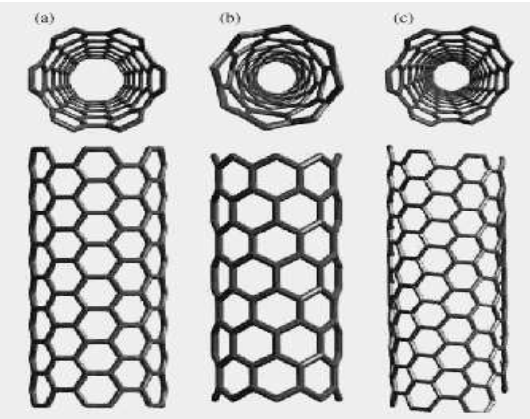


FIGURE 4.2 – *Trois exemples de nanotube de carbone mono-feuillet. (a) fauteuil, (b) zig-zag et (c) chiral [134].*

4.1.3 Dispositifs expérimentaux et étude des propriétés de transport

Les nanotubes de carbone mono-feuillet métalliques sont des conducteurs unidimensionnels à plusieurs canaux de conduction et les interactions coulombiennes y jouent donc un rôle important [25], [136]. De tels systèmes ont été étudiés expérimentalement et théoriquement à travers des dispositifs qui diffèrent par la pureté des échantillons, la transparence des interfaces ainsi que la géométrie

Que le système se trouve connecté à deux réservoirs ou plus, la question des contacts entre le conducteur unidimensionnel et les électrodes est centrale dans la mise en évidence du caractère original des liquides de Lüttinger. Ainsi, plusieurs articles expérimentaux rapportent que les résultats de mesure dépendent fortement de la transparence des interfaces. Citons, par exemple, les travaux de M. Bockrath et al. qui portent sur le transport à travers un nanotube de carbone mono-feuillet dans une géométrie à deux terminaux. La conductance est alors regardée en fonction de la tension de grille et son comportement, dépendant de la température, est régi par une loi de puissance, typique d'un liquide de Luttinger. Il est à noter que l'écriture de l'exposant de cette loi de puissance dépend de l'endroit où les électrons sont injectés dans le nanotube [25]. D'autres expériences, lorsque les contacts sont suffisamment transparents, ont également pu rendre compte du comportement en loi de puissance de la caractéristique courant-tension [136].

Dans le régime opposé, l'opacité des contacts provoque l'isolement du nanotube de carbone et, par là même, l'apparition d'un phénomène de blocage de Coulomb qui se manifeste dans les mesures de transport. Le nanotube se conduisant comme un îlot, le transport est assuré par effet tunnel entre les électrodes et le conducteur. Ainsi, les résultats de plusieurs expériences sont dominés par ces effets de charge, dus aux résistances aux interfaces qui sont plus grandes que le quanta de résistance $R = h/e^2$ [137]. Avec

une faible transmission, le courant varie par palier et une structure en diamant apparaît avec la variation des tensions de grille et source-drain [138].

Il est important de noter que le couplage, en plus de la propreté des contacts jouent un rôle très important sur le transport. En effet, de son intensité dépend fortement le caractère invasif de l'électrode qui peut écranter les interactions coulombiennes dans le système unidimensionnel et lui faire perdre sa nature liquide de Lüttinger [139], [140]. Une solution, pour diminuer ces effets qui modifient aussi bien les propriétés de transport que thermodynamiques du conducteur, réside dans la diminution de la taille des contacts.

La possibilité d'un transport ballistique dans un nanotube de carbone métallique, qui permet une mise en évidence claire du caractère liquide de Lüttinger d'un conducteur unidimensionnel, a été montrée dans l'expérience de W. Liang et al.. Dans le dispositif proposé, les électrons injectés depuis la source se déplacent librement dans le conducteur unidimensionnel et subissent des réflexions partielles aux interfaces avec les électrodes [141]. Ces processus, rappelant ceux à la base de l'interféromètre de type Fabry-Pérot, conduisent à la formation de résonances, en conséquence de quoi, la conductance présente un comportement oscillatoire en fonction de la tension de grille. Des travaux théoriques sont venus compléter cette étude en s'intéressant à la conductance à température nulle ainsi qu'au bruit de grenaille [142], [143].

Néanmoins, d'autres phénomènes, comme la diffusion par des impuretés, peuvent produire ces caractéristiques en loi de puissance. En effet, la présence d'impureté dans ces nano-objets n'est pas rare et peut trouver sa source dans des imperfections structurelles comme des substitutions atomiques, des défauts de charge dans le substrat, des défauts topologiques .... Ainsi, des dislocations peuvent provoquer le remplacement d'un hexagone par un pentagone ou un heptagone menant à une transition métal-isolant dans le nanotube [144]. En présence d'impuretés, des effets plus prononcés des interactions coulombiennes sont attendus. Citons par exemple l'augmentation des contributions du courant et du bruit de rétrodiffusion qui se traduit dans la caractéristique courant-tension par une suppression plus importante du courant à basse tension [145], [146], [147].

Des études théoriques ont montré qu'une mesure de la conductance d'un conducteur unidimensionnel sans défaut, connecté à deux terminaux par des contatcs parfaits, ne permettait pas l'extraction d'informations sur les interactions en son sein [139]. En revanche, la présence d'une impureté dans ce type de système permet de retrouver, dans les propriétés de transport, une dépendance en fonction du paramètre des interactions coulombiennes.

Ces résultats ont motivé l'exploration de systèmes à géométries très variées, pour lesquels les propriétés de transport dépendent des interactions coulombiennes, y compris en l'absence d'impuretés. Le dispositif le plus courant expérimentalement est celui

à trois terminaux, basé sur l'utilisation d'une pointe de STM ou d'AFM [14], [148], [149]. De par la distance séparant cette électrode et le conducteur, le couplage est considéré comme faible et le transport résulte de processus tunnels entre eux. Le recours à une pointe de STM ou d'AFM pour sonder ou injecter des électrons dans le nanotube, présente l'avantage d'avoir des contacts moins invasifs que ceux des dispositifs expérimentaux précédemment cités [150], [151]. En outre, ce type de système en Y, faisant référence à l'expérience de Hanbury-Brown et Twiss [82], est également un moyen de mesurer ou de calculer les corrélations de bruit, lesquelles mettent en évidence la nature bosonique des excitations se propageant dans ce type de conducteur, et par là même, le caractère liquide de Lüttinger de l'échantillon unidimensionnel.

4.1.4 Présentation du modèle

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude des propriétés de transport d'un nanotube de carbone mono-feuillet de type *fauteuil* où les effets des interactions coulombiennes sont prononcés et pour lesquels des tests expérimentaux ont été effectués [152], [153].

Le nanotube de carbone est déposé sur un substrat et connecté à ses extrémités à deux électrodes métalliques reliées à la masse. Une pointe de STM (Scanning Tunneling Microscope) soumise à une tension V quelconque est placée au-dessus du nanotube de carbone. Des électrons sont alors injectés au coeur de ce conducteur unidimensionnel par effet tunnel. Le système complet est schématisé sur la figure (4.3).

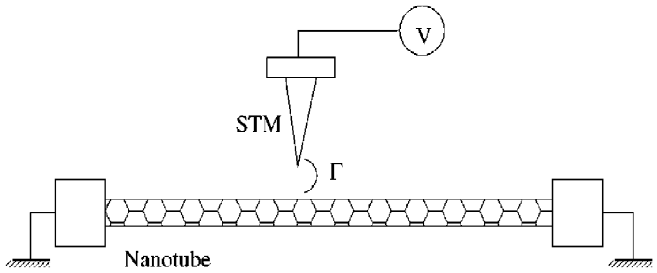


FIGURE 4.3 – *Schéma de l'injection d'électrons dans le nanotube de carbone connecté à deux électrodes.*

Le système ainsi étudié présente une configuration en Y. Cette terminologie désigne les dispositifs expérimentaux à trois terminaux et fait référence à l'expérience de Hanbury-Brown et Twiss dans laquelle la statistique bosonique des photons se déduit de la mesure des faisceaux provenant de la décomposition d'une source cohérente de lumière sur une lame semi-réfléchissante [82].

Suivant les conventions de la figure (4.4), l'injection de particules se fait via le réservoir de potentiel électrochimique μ_1. Le faisceau se sépare en direction des deux réservoirs avec une probabilité dépendant de la valeur de leur potentiel $\mu_{2,3}$.

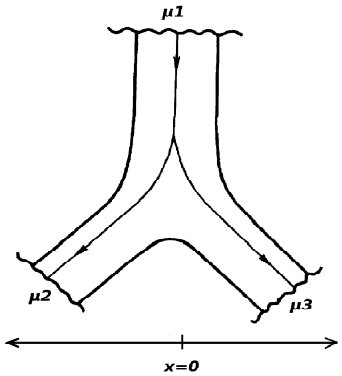


FIGURE 4.4 – *Schématisation d'une jonction métallique en* Y *à trois terminaux.*

Dans la situation qui nous intéresse, cette géométrie à trois terminaux permet la détermination de la valeur des interactions coulombiennes du nanotube de carbone. Les effets des tensions source-drain et/ou de grille ne sont pas étudiés ici ($\mu_2 = \mu_3$). Le réservoir de potentiel électrochimique μ_1 correspond à la pointe de STM et le flux d'électrons est injecté au cœur du nanotube de carbone. Notons qu'un article récent traite cependant d'une géométrie à trois terminaux, comme celle que nous présentons, mais dans laquelle les électrodes sont soumises à des potentiels chimiques distincts [149]. La situation que les auteurs étudient est, de plus, enrichie par la possibilitéde considérer des amplitudes tunnels asymétriques entre les électrons se déplaçant vers la gauche de ceux se mouvant vers la droite du liquide de Luttinger.

La comparaison entre les résultats obtenus pour ce système et ceux trouvés dans le cadre d'une jonction Y métallique avec un grand nombre de canaux de conduction permet de déterminer les particularités du transport électronique dans un nanotube de carbone. Cela nécessite de tenir compte des interactions coulombiennes et des contacts aux extrémités du nanotube.

La relation de Schottky $S(x, \Omega = 0) = e^* \langle I(x,t) \rangle$, qui fait intervenir le courant moyen et le bruit à fréquence nulle, détermine la charge effective e^* des porteurs de courant et les corrélations croisées renseignent sur leur nature [4]. De plus, l'intérêt porté à cette géométrie réside dans l'étude de possibles effets de taille finie provoqués par la présence des contacts à chaque extrémité du nanotube.

4.2 Liquides de Lüttinger dans les nanotubes de carbone

Les nanotubes de carbone mono-feuillets sont le candidat idéal dans la réalisation expérimentale d'un conducteur unidimensionnel de type liquide de Lüttinger [25]. En effet, ils sont plus stable et plus facile à fabriquer que des candidats alternatifs comme une chaîne de molécule [154] ou les états de bords dans l'effet Hall quantique fractionnaire [95].

Nous supposons dans le système choisi que les contacts entre le nanotube de carbone et les réservoirs métalliques sont des barrières tunnel transparentes. Cette condition permet d'assurer l'absence de phénomènes de blocage de Coulomb aux contacts et seules les interactions coulombiennes provoquent des changements dans le comportement du nanotube.

4.2.1 Théorie effective à basse énergie

La description en termes de liquides de Lüttinger d'un nanotube de carbone ne nécessite aucune approximation car son spectre est linéaire aux basses énergies, c'est-à-dire en excluant les bandes supérieures (cf. Fig. (4.5)) [155]. La topologie de la surface de Fermi a ceci de particulier qu'elle se résume à quatre points indépendants.

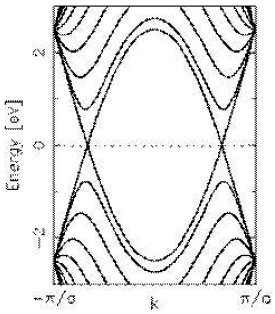


FIGURE 4.5 – *Spectre en énergie d'un nanotube de carbone (issu de [155]).*

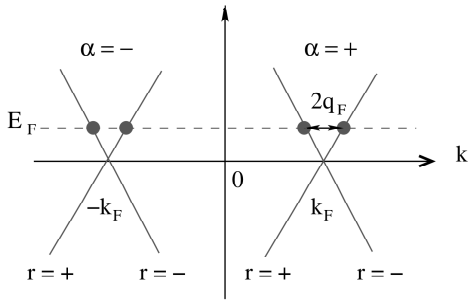


FIGURE 4.6 – *Modélisation du spectre à basses énergies.*

La maille élementaire du graphène contient deux atomes, donnant lieu à deux sous-réseaux indéxés par $p = \pm 1$, ce qui induit l'existence de deux ondes de Bloch dégénérées $\chi_{p\alpha}$ à chaque point de Fermi. La géométrie tubulaire du nanotube de carbone implique une dépendance des opérateurs fermioniques en fonction de x et z [156] :

$$\widehat{\Psi}_\sigma(x,z) = \sum_{p,\alpha} \chi_{p\alpha}(x,z)\psi_{p\alpha\sigma}(x), \tag{4.3}$$

où x est la variable longitudinale et z varie sur la circonférence du nanotube de carbone. L'indice σ permet de prendre en compte le degré de liberté de spin des électrons. Afin de retrouver une correspondance simple et intuitive de la description de ce conducteur unidimensionnel par la théorie des liquides de Lüttinger développée au deuxième chapitre, les indices de sous-réseaux p sont remplaçés par ceux des électrons se déplacant vers la gauche ou vers la droite du spectre grâce à l'utilisation de la matrice unitaire $\tilde{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}$,

$$\psi_{p\alpha\sigma}(x,t) = \sum_r \tilde{U}_{pr}\psi_{r\alpha\sigma}(x,t). \tag{4.4}$$

Comme le montre la figure (4.6), les quatre branches du spectre permettent la propagation de huit différents types d'excitations, chacun étant la combinaison des indices suivants :

- $\alpha = \pm 1$ pour chaque mode ;
- $r = \pm 1$ pour chaque direction de propagation ;
- $\sigma = \pm 1$ pour l'orientation du spin.

Afin de compléter la correspondance avec la théorie des liquides de Lüttinger appliquée à un fil quantique, il est nécessaire d'introduire un vecteur d'onde q_{F} qui permet de lever la dégénérescence sur les points de Fermi. Tous ces indices sont définis sur la figure (4.6).

Hamiltoniens du système

Le hamiltonien total du système schématisé par la figure (4.3) se décompose en différents termes qui font référence à chacune des sous parties de ce système : le hamiltonien tunnel décrivant le transfert d'électrons entre le STM et le nanotube, le hamiltonien de la pointe du STM, celui du nanotube et enfin ceux des deux électrodes. Ces trois dernières contributions forment le hamiltonien général du nanotube de carbone $\mathrm{H}_{\mathrm{NTC}}$ [157], qui, une fois bosonisé, permet de prendre en compte les interactions coulombiennes et leur force le long du système. Il a pour expression :

$$\mathrm{H}_{\mathrm{NTC}} = \frac{1}{2}\sum_{j,\delta}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[v_{\mathrm{j}\delta}(x)K_{\mathrm{j}\delta}(x)\,\left(\partial_x\phi_{\mathrm{j}\delta}(x,t)\right)^2 + \frac{v_{\mathrm{j}\delta}(x)}{K_{\mathrm{j}\delta}(x)}\,\left(\partial_x\theta_{\mathrm{j}\delta}(x,t)\right)^2\right]dx, \tag{4.5}$$

où les champs bosoniques non chiraux $\phi_{\mathrm{j}\delta}$ et $\theta_{\mathrm{j}\delta}$ sont ceux introduits au deuxième chapitre. Ils suivent la relation de commutation $\left[\phi_{\mathrm{j}\delta}(x), \theta_{\mathrm{j}'\delta'}(x')\right]_- = (i/2)\,\delta_{\mathrm{j},\mathrm{j}'}\delta_{\delta,\delta'}\mathrm{sgn}(x-x')$ et obéissent aux équations du mouvement :

$$\partial_t\theta_{\mathrm{j}\delta}(x,t) = -v_{\mathrm{j}\delta}K_{\mathrm{j}\delta}\partial_x\phi_{\mathrm{j}\delta}(x,t), \tag{4.6}$$

$$\partial_t\phi_{\mathrm{j}\delta}(x,t) = -\frac{v_{\mathrm{j}\delta}}{K_{\mathrm{j}\delta}}\partial_x\theta_{\mathrm{j}\delta}(x,t). \tag{4.7}$$

Ils dépendent, tout comme le paramètre d'interaction coulombienne $K_{\mathrm{j}\delta}$ et la vitesse dans chaque secteur $v_{\mathrm{j}\delta} = v_{\mathrm{F}}/K_{\mathrm{j}\delta}$, de deux indices j et δ. Ces derniers font référence aux quatre types d'excitations qui se propagent dans le nanotube de carbone : $j\delta = c+$ pour la charge totale, $j\delta = c-$ pour la charge relative, $j\delta = s+$ pour le spin total et $j\delta = s-$ pour le spin relatif. La position le long de l'axe du nanotube est repérée par x. On posera comme origine de cet axe, la position d'injection des électrons. Les paramètres d'interaction coulombienne ainsi que les vitesses de secteur possèdent une dépendance

spatiale qui permet de décrire, si on le souhaite, le système *réservoirs+nanotube* par la théorie des liquides de Lüttinger [140], [139], [158].

Les électrodes étant des métaux à 2 ou 3 dimensions, les paramètres $K_{j\delta}$ sont égaux à 1 pour rendre compte de leur état de liquide de Fermi. Garder le même modèle pour les différents sous-systèmes permet une description cohérente et simple des phénomènes apparaissant dans le nanotube de carbone et aux contacts avec les réservoirs.

Le hamiltonien tunnel, traduisant le processus d'injection d'électrons de la pointe de STM en $y = 0$, où l'axe y rend compte de la position sur la pointe, dans le nanotube de carbone au point $x = 0$, s'écrit :

$$\mathrm{H_T} = \sum_{r,\alpha,\sigma} \Gamma(t) \left[\psi^{\dagger}_{r\alpha\sigma}(0,t) C_{\sigma}(0,t) \right] + h.c, \tag{4.8}$$

où Γ est l'amplitude tunnel, C_σ et $\psi_{r\alpha\sigma}$ sont les champs fermioniques associés à la pointe de STM et au nanotube de carbone.

En adaptant l'identité de bosonisation, développée au chapitre 2, à un système unidimensionnel à quatre secteurs, le champ fermionique du nanotube de carbone s'exprime :

$$\psi_{r\alpha\sigma}(x,t) = \frac{F_{r\alpha\sigma}}{\sqrt{2\pi a}} e^{i\alpha k_{\mathrm{F}} x + i r q_{\mathrm{F}} x + i\varphi_{r\alpha\sigma}(x,t)}.$$

$F_{r\alpha\sigma}$ est le facteur de Klein qui assure des relations de commutation correctes, a est la longueur de coupure, ici reliée au diamètre du nanotube [157], k_{F} et q_{F} sont définis sur la figure (4.6). Ce champ fermionique s'écrit en fonction des champs bosoniques non chiraux via $\varphi_{r\alpha\sigma}$:

$$\varphi_{r\alpha\sigma}(x,t) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{j,\delta} h_{\alpha\sigma j\delta} \left(\phi_{j\delta}(x,t) \, + \, r\theta_{j\delta}(x,t) \right), \tag{4.9}$$

où les coefficients $h_{\alpha\sigma \mathrm{c}+} = 1$, $h_{\alpha\sigma \mathrm{c}-} = \alpha$, $h_{\alpha\sigma \mathrm{s}+} = \sigma$ et $h_{\alpha\sigma \mathrm{s}-} = \alpha\sigma$ font le lien entre les canaux de conduction définis par les indices $\{r, \alpha, \sigma\}$ et les secteurs de propagation indexés par $\{j, \delta\}$.

Afin d'éviter les problèmes liés aux facteurs de Klein, le hamiltonien et les champs fermioniques de la pointe C_σ sont décrits par la théorie des liquides de Lüttinger dans le cas sans interaction [14]. Cela signifie que dans ce métal normal considéré ici comme semi-infini, les interactions coulombiennes ne renormalisent pas la vitesse de Fermi u_{F}, les constantes de chaque secteur $K_{j\delta}$ sont égales à 1. Ainsi, le champ fermionique de la pointe s'exprime en termes de champs bosoniques chiraux :

$$C_\sigma(y,t) = \frac{f_\sigma}{\sqrt{2\pi a}} e^{i\widetilde{\varphi}_\sigma(y,t)},$$

où f_σ est le facteur de Klein associé à la pointe de STM.

L'injection par effet tunnel des électrons dans le nanotube de carbone est provoquée par l'application d'une tension au STM. Cette tension est prise en compte dans le modèle via une transformation de jauge ou substitution de Peierls. Elle consiste à faire apparaître dans le hamiltonien tunnel une phase $\chi(t)$ qui provient d'un changement de convention dans l'écriture des opérateurs fermioniques. Le hamiltonien étant un invariant de jauge, la phase est incluse dans le terme d'échange $\Gamma(t) = \Gamma\, e^{-i\frac{e}{\hbar c}\chi(t)}$ où $\chi(t) = -c\int V(t)\,dt$.

L'analyse spectrale du hamiltonien total du système permet d'établir les propriétés de transport à travers celui-ci. Son état hors équilibre nécessite l'utilisation du formalisme Keldysh défini au chapitre précédent.

4.2.2 Propriétés de transport d'un nanotube de carbone

Une tension constante V_0 est appliquée à la pointe de STM. Le coefficient de transfert s'écrit alors $\Gamma(t) = \Gamma\, e^{ieV_0 t}$ et on s'intéresse au courant moyen de charge totale ainsi qu'aux fonctions de corrélations du courant circulant dans le nanotube de carbone.

Expression du courant moyen

Le courant moyen, dans le formalisme Keldysh [26], est défini par

$$\langle I(x,t)\rangle \quad = \quad \frac{1}{2}\sum_{\eta}\langle \mathrm{T}_K\big\{I(x,t^\eta)\, e^{-i\int_K dt_1 \mathrm{H_T}(t_1)}\big\}\rangle. \tag{4.10}$$

L'indice $\eta = \pm$ représente la branche supérieure ou inférieure du contour temporel de Keldysh et T_K est l'opérateur d'ordre temporel sur ce même contour. L'opérateur courant de particules I, qui n'est pas conservé à cause de la dynamique imposée au système, est déterminé par l'équation de continuité :

$$\partial_x I(x,t) + e\partial_t \rho(x,t) = 0, \tag{4.11}$$

où ρ est l'opérateur de densité du nanotube de carbone. L'utilisation de la définition (2.17) permet de formuler cet opérateur en terme des champs bosoniques, ainsi $\rho(x,t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\partial_x\theta_{c+}(x,t)$. Finalement, l'opérateur de courant a pour expression :

$$I(x,t) = ev_{\mathrm{F}}\sum_{r,\alpha,\sigma} r\psi^\dagger_{r\alpha\sigma}(x,t)\psi_{r\alpha\sigma}(x,t) = \frac{2ev_{\mathrm{F}}}{\sqrt{\pi}}\partial_x\phi_{\mathrm{c}+}(x,t). \tag{4.12}$$

Le courant moyen se calcule en pratiquant un développement perturbatif de l'exponentielle par rapport à l'amplitude tunnel Γ. L'ordre zéro en Γ, ne dépend pas du taux

tunnel et l'ordre 1, proportionnel à Γ, représente le courant moyen à l'équilibre, il est donc nul. Afin d'obtenir des informations sur le transport des excitations dans le système, le calcul perturbatif est donc effectué jusqu'à l'ordre deux en Γ. Les expressions (4.8) et (4.10) montrent que le courant moyen s'exprime à partir des fonctions de Green bosoniques de la pointe et du nanotube, dont on rappelle la définition :

$$G^{\theta\theta}_{j\delta}(x,t;x',t') = \langle \mathrm{T}\{\theta_{j\delta}(x,t)\theta_{j\delta}(x',t')\}\rangle - \frac{1}{2}\langle \mathrm{T}\{\theta^2_{j\delta}(x,t)\}\rangle - \frac{1}{2}\langle \mathrm{T}\{\theta^2_{j\delta}(x',t')\}\rangle, \tag{4.13}$$

où T est l'opérateur d'ordre temporel usuel. A partir de cette fonction de Green, il est possible d'exprimer chacun des élements de la matrice de Green Keldysh $\mathbf{G}^{\theta\theta}_{j\delta(K)}$ (cf. Eqs. (3.16), (3.17), (3.18) et (3.19)) :

$$\boldsymbol{G}^{\theta\theta}_{j\delta(K)}(x,t;x',t') = \begin{pmatrix} \begin{matrix} (t-t')>0 \ : \ G^{\theta\theta}_{j\delta}(x,t;x',t') \\ (t-t')<0 \ : \ G^{\theta\theta}_{j\delta}(x',t';x,t) \end{matrix} & G^{\theta\theta}_{j\delta}(x',t';x,t) \\ G^{\theta\theta}_{j\delta}(x,t;x',t') & \begin{matrix} (t-t')>0 \ : \ G^{\theta\theta}_{j\delta}(x',t';x,t) \\ (t-t')<0 \ : \ G^{\theta\theta}_{j\delta}(x,t;x',t) \end{matrix} \end{pmatrix}. \tag{4.14}$$

Le courant moyen circulant à travers le nanotube de carbone s'écrit

$$\begin{aligned} \langle I(x,t)\rangle &= \frac{\Gamma^2 e v_{\mathrm{F}}}{(2\pi a)^2} \sum_{\eta\eta_1\eta_2 r_1\sigma_1} \eta_1\eta_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \, \sin(eV_0(t_1-t_2)) e^{2\pi G^{\varphi\varphi,\eta_1\eta_2}_{\sigma_1}(0,0,t_1-t_2)} \\ &\times \ e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j,\delta}\left(G^{\phi\phi,\eta_1\eta_2}_{j\delta}(0,0,t_1-t_2)+r_1 G^{\phi\theta,\eta_1\eta_2}_{j\delta}(0,0,t_1-t_2)\right)} \\ &\times \ e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j,\delta}\left(r_1 G^{\theta\phi,\eta_1\eta_2}_{j\delta}(0,0,t_1-t_2)+G^{\theta\theta,\eta_1\eta_2}_{j\delta}(0,0,t_1-t_2)\right)} \\ &\times \ \partial_x\Big(G^{\phi\phi,\eta\eta_1}_{c+}(x,0,t-t_1) + r_1 G^{\phi\theta,\eta\eta_1}_{c+}(x,0,t-t_1) \\ &- \ G^{\phi\phi,\eta\eta_1}_{c+}(x,0,t-t_2) - r_1 G^{\phi\theta,\eta\eta_1}_{c+}(x,0,t-t_2)\Big), \end{aligned} \tag{4.15}$$

avec $G^{\varphi\varphi}_{\sigma}$ la fonction de Green de la pointe. Les fonctions de Green bosoniques ne dépendent que des écarts temporels à cause de l'invariance par translation dans le temps.

Expression des fonctions de corrélations de courant

L'intérêt de la détermination du bruit et des corrélations croisées a été exposé dans le premier chapitre de cette thèse. Ces deux quantités physiques sont reliées à la transformée de Fourier de la fonction de corrélations de courant définie par :

$$S(x,t;x',t') = \langle I(x,t)I(x',t')\rangle - \langle I(x,t)\rangle\langle I(x',t')\rangle. \tag{4.16}$$

Dans cette définition, les corrélations ne sont pas symétrisées par rapport au temps. Ce choix est légitime car, d'une part, les bruits symétrisés et non-symétrisés à fréquence nulle sont égaux. D'autre part, le bruit à fréquence finie mesuré dans les expériences est relié au bruit non-symétrisé [18], [89], [159].
Comme dans le calcul du courant moyen, nous nous intéressons à la contribution pertinente des corrélations au plus bas ordre en Γ. A partir des expressions (4.15) et du courant total, il est possible de négliger le deuxième terme de la définition des corrélations ($\propto \Gamma^4$). La convention que nous choisissons implique que la fonction de corrélations de courant, correspondant au terme S_- défini au premier chapitre, se réduit à :

$$S(x,t;x',t') = \langle \mathrm{T}_K \big\{ I(x,t^-) I(x',t'^+)\, e^{-i\int_K dt_1\, \mathrm{H_T}(0,t_1)} \big\} \rangle, \tag{4.17}$$

où le produit des opérateurs de courant s'écrit :

$$I(x,t^-)I(x',t'^+) = \frac{(2ev_{\mathrm{F}})^2}{\pi}\, \partial_x \phi_{c+}(x,t^-) \partial_{x'} \phi_{c+}(x',t'^+). \tag{4.18}$$

Le développement à l'ordre zéro en Γ permet d'obtenir les fluctuations de point zéro. En effet, même si la pointe et le nanotube de carbone sont totalement découplés, les corrélations à l'équilibre ne sont pas nulles et s'écrivent :

$$S^0(x,t;x',t') \;=\; \partial_x \partial_{x'} G_{c+}^{\phi\phi,-+}(x,t;x',t'). \tag{4.19}$$

Ces fluctutations du courant à l'équilibre ont fait l'objet d'une étude visant à déterminer leur pertinence dans les corrélations non symétrisées [160].

Le développement au deuxième ordre en Γ de l'exponentielle apparaissant dans la formule (4.17) aboutit à une écriture de la fonction de corrélations de courant en terme de fonctions de Green bosoniques de la pointe et du nanotube de carbone :

$$\begin{aligned} S(x,x',\tau(=t-t')) \;&=\; \frac{\Gamma^2 e^2 v_{\mathrm{F}}^2}{2(\pi a)^2} \sum_{\eta_1\eta_2 r_1\sigma_1} \eta_1\eta_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2\, A_{\eta_1\eta_2}^{r_1\sigma_1}(0,0,t_1-t_2) \\ &\times\; \Big[\Big(B_{-\eta_1}^{r_1\sigma_1}(x,0,\tau-t_1) - B_{-\eta_2}^{r_1\sigma_1}(x,0,\tau-t_2) \Big) \\ &\times\; \Big(B_{+\eta_1}^{r_1\sigma_1}(x',0,-t_1) - B_{+\eta_2}^{r_1\sigma_1}(x',0,-t_2) \Big) \Big], \end{aligned} \tag{4.20}$$

où l'on définit :

$$\begin{aligned} A_{\eta_1\eta_2}^{r_1\sigma_1}(0,0,t) \;&=\; \cos(eV_0 t) e^{2\pi G_{\sigma_1}^{\varphi\varphi,\eta_1\eta_2}(0,0,t)} \\ &\times\; e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j,\delta}\left(G_{j\delta}^{\phi\phi,\eta_1\eta_2}(0,0,t) + r_1 G_{j\delta}^{\phi\theta,\eta_1\eta_2}(0,0,t) \right)} \\ &\times\; e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j,\delta}\left(r_1 G_{j\delta}^{\theta\phi,\eta_1\eta_2}(0,0,t) + G_{j\delta}^{\theta\theta,\eta_1\eta_2}(0,0,t) \right)}. \end{aligned} \tag{4.21}$$

Cette fonction de corrélation est associée à l'injection locale par effet tunnel des électrons au point $x = 0$ depuis la pointe et

$$B_{\eta\mu}^{r_1\sigma_1}(x,0,t) \quad = \quad \partial_x \left(G_{c+}^{\phi\phi,\eta\mu}(x,0,t) + r_1 G_{c+}^{\phi\theta,\eta\mu}(x,0,t) \right), \tag{4.22}$$

représente la fonction de corrélation associée à la propagation des excitations le long du nanotube de carbone.
Ces expressions sont générales et valables indépendamment du choix du modèle. La nature du système et sa description physique sont codées dans les fonctions de Green.

En première approximation, nous considérons, dans la section 4.2.3, un nanotube de carbone de longueur infinie afin d'établir les effets des interactions coulombiennes sur le comportement du conducteur unidimensionnel à travers les mesures du courant, du bruit et des corrélations croisées. Dans un deuxième temps, nous considérons la présence des électrodes auxquelles le nanotube de carbone est connecté. Cette description plus réaliste d'un schéma expérimental nécessitera de nouvelles hypothèses de travail décrit en section 4.3.

4.2.3 Courant et corrélations de courant dans un nanotube de carbone de longueur infinie

Nous reprenons ici le travail développé en [14] dans lequel les propriétés de transport d'un nanotube de carbone de longueur infinie sont étudiés à travers le comportement du courant et des corrélations de courant. Dans l'article initial, ces quantitiés sont calculées, qu'elles soient tunnels ou de charge dans le nanotube. Cependant, nous faisons le choix ici de ne présenter que certains de réultats afin de focaliser l'intêret sur les interprétations physiques du comportement des excitations collectives dans un nanotube de carbone et laissons au lecteur le soin de se référer à [14] pour plus d'informations.

Considérer un nanotube de carbone de longueur infinie ($L \to \infty$) revient à ne pas prendre en compte la présence des contacts. Les paramètres d'interaction coulombienne ainsi que les vitesses de chaque secteur sont uniformes le long de l'axe du nanotube et afin de tenir compte des interactions coulombiennes répulsives qui existent dans ce système, le paramètre du secteur de la charge totale K_{c+} est inférieur à 1. Les fonctions de Green Keldysh qui apparaissent dans la formule (4.15) s'expriment en fonction de la fonction de Green définie en (4.13) et calculée dans l'Annexe A dans le cas d'un système unidimensionnel à deux secteurs de propagation. Ici, nous généralisons à une situation à quatre secteurs. A température nulle, la fonction de Green s'écrit :

$$G_{j\delta}^{\theta\theta}(x,t;x',t') \quad = \quad -\frac{K_{j\delta}}{4\pi} \sum_r \ln \left(1 + i\frac{v_F(t-t')}{a} + ir\frac{K_{j\delta}(x-x')}{a} \right). \tag{4.23}$$

Une fois introduite dans chaque intégrale de l'expression (4.15), elles permettent de calculer le courant moyen de charge totale circulant à travers un nanotube de carbone de longueur infinie :

$$\langle I(x,t)\rangle = \frac{2e\Gamma^2}{\pi}\frac{a^{\nu-1}}{u_{\mathrm{F}}v_{\mathrm{F}}^{\nu}}\frac{\mid eV_0 \mid^{\nu}}{\mathbf{\Gamma}(\nu+1)}\mathrm{sgn}(eV_0)\mathrm{sgn}(x), \tag{4.24}$$

où

$$\nu = \frac{1}{8}\sum_{j,\delta}\left(\frac{1}{K_{\mathrm{j}\delta}}+K_{\mathrm{j}\delta}\right), \tag{4.25}$$

et

$$K_{\mathrm{c}+} = 1/\sqrt{1+4\tilde{V}(0)/\pi v_{\mathrm{F}}}, \tag{4.26}$$

$$K_{c-} \approx K_{s+} \approx K_{s-} \approx 1. \tag{4.27}$$

$\mathbf{\Gamma}$ est la fonction gamma et $\tilde{V}$ est la transformée de Fourier du potentiel d'interaction. Seul le secteur de charge totale est affecté par les interactions, c'est pourquoi les paramètres des autres secteurs sont égaux à 1. Cependant, ce choix est valable uniquement dans un système présentant une symétrie temporelle.

L'aspect le plus intéressant de ce résultat est la mise en évidence du comportement en loi de puissance du courant moyen des excitations à travers le nanotube de carbone, laquelle est fonction de la tension V_0 appliquée à la pointe de STM et dépend des paramètres d'interaction coulombienne de chaque secteur de propagation. Ce résultat permet de déduire que la réduction du courant moyen, observable pour de faibles tensions, est due à leur présence. Dans la limite sans interactions, c'est-à-dire pour un potentiel $\tilde{V}$ nul, le coefficient ν vaut 1 et l'on retrouve alors la loi d'Ohm, c'est-à-dire, une variation linéaire du courant par rapport à la tension appliquée à la pointe.

Nous nous intéressons également aux corrélations de courant à fréquence nulle qui sont données par la transformée de Fourier de l'expression (4.20). A température nulle et dans les limites $|x| \gg a$ et $|x'| \gg a$, elles sont directement reliées au courant moyen par :

$$S(x,x';\Omega=0) = \frac{\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')+K_{\mathrm{c}+}^2}{2}e|\langle I(x,t)\rangle|. \tag{4.28}$$

Rappelons que le bruit ou autocorrélation mesure les corrélations de courant dans le nanotube au point x alors que les corrélations croisées, dans la géométrie particulière du système étudié, permet de regarder les corrélations entre courants en deux points

opposés par rapport au point d'injection des électrons $x = 0$. Ainsi,

$$S(x, x; \Omega = 0) \quad = \quad \frac{1 + K_{c+}^2}{2} e|\langle I(x,t)\rangle|, \tag{4.29}$$

et

$$S(x, -x; \Omega = 0) = \frac{K_{c+}^2 - 1}{2} e|\langle I(x,t)\rangle|. \tag{4.30}$$

Avant d'analyser ces résultats, il est intéressant d'étudier le cas sans interaction ($K_{c+} = 1$). Dans cette situation, l'équation (4.29) conduit à la relation de Schottky pour un liquide de Fermi où la charge des porteurs de courant est celle de l'électron et les corrélations croisées données par la formule (4.30) s'annulent. Ces résultats sont en accord avec ce qui a été obtenu pour un système sans interaction à trois terminaux de type Hanbury-Brown et Twiss [82], où il est montré que la première contribution non nulle des corrélations croisées est obtenue au quatrième ordre en Γ du calcul perturbatif [60].

La présence des interactions coulombiennes dans le système, induite par $K_{c+} < 1$, apparaîssant dans les formules précédentes, soulève plusieurs remarques. D'une part, le bruit et le courant moyen sont reliés par un coefficient de proportionnalité qui n'est pas la charge de l'électron et dépend du paramètre d'interaction coulombienne K_{c+}. Cette relation de type Schottky pose la question de la charge effective des excitations se déplaçant dans le nanotube de carbone.

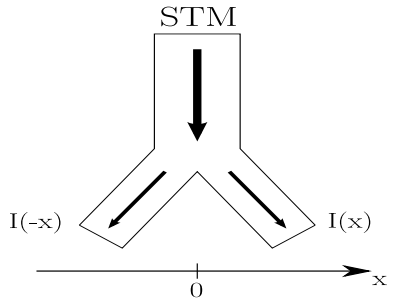


FIGURE 4.7 – *Géométrie du système. La convention choisie impose que les courants qui se dirigent vers chaque terminal ont des signes opposés.*

D'autre part, la comparaison entre ces résultats et ceux obtenus dans les expériences de type Hanbury-Brown et Twiss met en lumière la statistique de ces porteurs de courant. En effet, la valeur de K_{c+} indique que les corrélations croisées sont négatives. Pour interpréter correctement ce résulat, il est important de rappeler les conventions choisies. Dans les expériences de type Hanbury-Brown et Twiss pour des systèmes impliquants des métaux normaux, la statistique fermionique des électrons est obtenue à partir du

signe négatif des corrélations des courants de chaque branche du système. Le sens de ces courants est déterminé par un axe qui est orienté dans la direction de chaque réservoir, comme le montre la figure (4.4). En revanche, dans le système étudié ici, les courants partant vers chaque électrode ont des signes opposés (cf. Fig. (4.7)). Cela signifie que les corrélations croisées négatives obtenues traduisent une statistique bosonique des excitations [61]. Ce résultat diffère de celui obtenu dans un liquide Fermi où les corrélations croisées sont nulles à l'ordre deux en Γ et positive à l'ordre quatre en Γ.

Les excitations qui se propagent dans le nanotube de carbone sont issues du même électron injecté par effet tunnel depuis la pointe de STM. La question suivante se pose alors : la propagation simultanée en x et $-x$ de ces porteurs de courant met-elle en évidence un phénomène d'intrication ?

Afin d'y répondre, nous écrivons la fonction d'onde du nanotube de carbone après injection d'un électron de spin σ en $x = 0$ [161] :

$$\sum_{r\alpha} \psi^{\dagger}_{r\alpha\sigma}|E_0\rangle \quad = \quad \frac{F_{r\alpha\sigma}}{\sqrt{2\pi a}} \sum_{r\alpha} e^{-i\sum_{j\delta}\sqrt{\frac{\pi}{2K_{j\delta}}}h_{\alpha\sigma j\delta}\left(\frac{1+rK_{j\delta}}{2}\varphi_{+j\delta}+\frac{1-rK_{j\delta}}{2}\varphi_{-j\delta}\right)}|E_0\rangle, \tag{4.31}$$

où $|E_0\rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental du nanotube et le champ $\varphi_{rj\delta}$ est défini en fonction des champs non chiraux $\phi_{j\delta}$ et $\theta_{j\delta}$ tel que

$$\varphi_{rj\delta}(x,t) = \sqrt{K_{j\delta}}\phi_{j\delta}(x,t) + \frac{r}{\sqrt{K_{j\delta}}}\theta_{j\delta}. \tag{4.32}$$

Cependant, il est préférable d'écrire cette fonction d'onde sous la forme :

$$\sum_{r\alpha} \psi^{\dagger}_{r\alpha\sigma}|E_0\rangle \quad = \quad \frac{F_{r\alpha\sigma}}{\sqrt{2\pi a}} \sum_{\alpha} \left[\prod_{j\delta}\left(\tilde{\psi}^{\dagger}_{+j\delta}\right)^{Q_{+j\delta}}\left(\tilde{\psi}^{\dagger}_{-j\delta}\right)^{Q_{-j\delta}} + \prod_{j\delta}\left(\tilde{\psi}^{\dagger}_{+j\delta}\right)^{Q_{-j\delta}}\left(\tilde{\psi}^{\dagger}_{-j\delta}\right)^{Q_{+j\delta}}\right]|E_0\rangle, \tag{4.33}$$

qui fait apparaître les opérateurs $\tilde{\psi}^{\dagger}_{rj\delta} = \exp\{-i\sqrt{\pi/(2K_{j\delta})}h_{\alpha\sigma j\delta}\varphi_{rj\delta}\}$ ainsi que les charges anormales $Q_{rj\delta} = (1 + rK_{j\delta})/2$.

De cette nouvelle formulation, nous déduisons deux choses. D'une part, la fonction d'onde se décompose en deux termes qui expriment deux situations possibles : la création d'excitations de charge $Q_{+j\delta}$ dans la branche $r = +$ et de charge $Q_{-j\delta}$ dans la branche $r = -$ ou bien la création d'excitation de charge $Q_{+j\delta}$ dans la branche $r = -$ et de charge $Q_{-j\delta}$ dans la branche $r = +$. D'autre part, la fonction d'onde (4.33) n'étant pas séparable, les quasi-particules de charge $Q_{+j\delta}$ et $Q_{-j\delta}$ qui circulent à travers le nanotube de carbone sont intriquées [13].

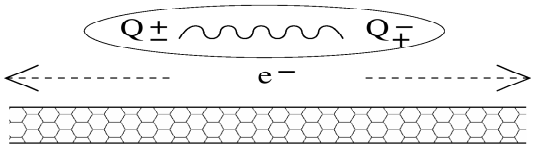


FIGURE 4.8 – *Phénomène d'intriquation des excitations : deux propagations des modes sont possibles.*

De manière synthétique, dans ce système où les fortes interactions coulombiennes empêchent aux électrons injectés par effet tunnel d'exister tel quel, la propagation des excitations est assurée par la création de deux quasi-particules intriquées de charge anormales $Q_{\mathrm{rj}\delta}$ circulant en sens contraire [12], [13] (cf. Fig. (4.8)).

Le bruit et les corrélations croisées font intervenir le courant moyen du secteur de la charge totale $\{c+\}$ qui est l'unique secteur affecté par les interactions coulombiennes. Il est alors possible d'exprimer le bruit et les corrélations croisées en fonction des charges anormales $Q_{\mathrm{rc}+}$:

$$S(x,x;\Omega=0) \quad \propto \quad \frac{1}{2}(Q^2_{+\mathrm{c}+}+Q^2_{-\mathrm{c}+}) = \frac{1+K^2_{\mathrm{c}+}}{4}, \tag{4.34}$$

$$S(x,-x;\Omega=0) \quad \propto \quad \frac{1}{2}(Q_{+\mathrm{c}+}Q_{-\mathrm{c}+}+Q_{-\mathrm{c}+}Q_{+\mathrm{c}+}) = \frac{1-K^2_{\mathrm{c}+}}{4}. \tag{4.35}$$

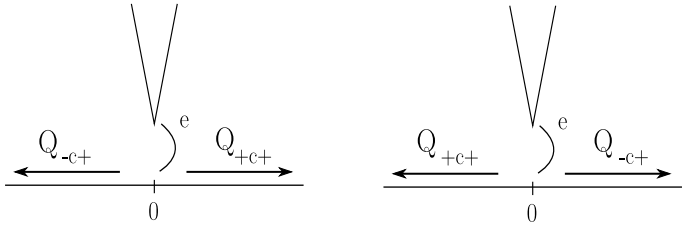


FIGURE 4.9 – *Deux possibilités de propagations de paires intriquées de charges anormales.*

La réécriture des corrélations en fonction de ces charges anormales permet de traduire le coefficient de la charge effective, apparaîssant dans les formules (4.29) et (4.30), en termes de propagation de paire de quasi-particules intriquées circulant dans des directions opposées. Notons que l'apparition de chaque paire est équiprobable car nous supposons qu'aucune tension source-drain n'est appliquée.

L'image d'excitations intriquées permet une interprétation correcte des résultats obtenus. Cependant, le cas d'un nanotube de carbone de longueur infinie n'est pas une situation expérimentale réaliste. Il paraît donc nécessaire d'étudier le cas d'un nanotube de carbone connecté à chaque extrémité à une électrode afin de s'intéresser aux effets induits par la présence des contacts sur le transport.

4.3 Propriétés de transport dans un nanotube connecté à des électrodes

Le nanotube de carbone est à présent relié par ses extrémités à deux électrodes souvent nommées *réservoirs* dans la littérature. Cette terminologie désigne tout environnement externe avec lequel un système mésoscopique est en contact. Dans le système qui fait l'objet de notre étude, les réservoirs sont des métaux semi-infinis, c'est-à-dire possédant des processus de relaxation assurant leur équilibre interne.

4.3.1 Modèle

Afin d'inclure les contacts entre le nanotube et les réservoirs, nous adoptons un modèle introduit il y a une dizaine d'années et qui repose sur une description des électrodes en termes de liquide de Lüttinger. Le paramètre d'interaction coulombienne K_{c+} devient une fonction de la position le long du nanotube de carbone, comme le montre la figure (4.10).

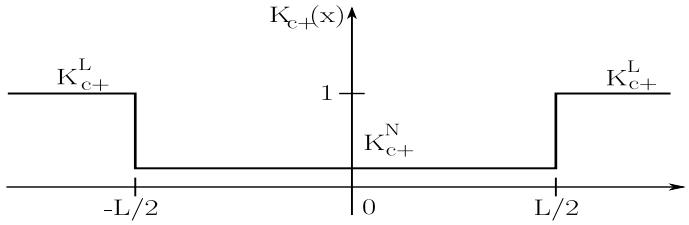


Figure 4.10 – *Modélisation de la dépendance des électrodes et du nanotube par rapport au paramètre d'interaction coulombienne du secteur de la charge totale.*

Le changement de valeur de K_{c+} se produit au niveau des réservoirs. On parle alors d'un modèle de liquide de Lüttinger inhomogène ([140], [139], [158]). Ainsi :

$$\begin{aligned}
K_{c+}(x) &= K^N_{c+} < 1, \ \ \forall\, |x| \ < L/2, \\
K_{c+}(x) &= K^L_{c+} = 1, \ \ \forall\, |x| \ > L/2, \\
K_{c-}(x) &= K_{s+}(x) = K_{s-}(x) = 1, \ \ \forall\, |x|.
\end{aligned}$$

Cette description présente le désavantage de n'imposer aucune condition sur la transparence des contacts. D'autres modélisations plus réalistes ont été développé à cet effet, où la présence des contacts est alors mimée par des impuretés [145], [146], [147]. Mais cela engendre de nouveaux termes dans les calculs perturbatifs que nous ne souhaitons pas traiter ici.

4.3.2 Courant moyen et corrélations de courant à fréquence nulle

Les formules (4.15) et (4.20) du courant moyen et du bruit dépendent des fonctions de Green Keldysh. Ces fonctions sont calculées par résolution des équations différentielles obtenues à partir de l'action du nanotube, en assurant la continuité des fonctions de Green et de leurs dérivées au niveau des contacts. A température nulle, la fonction de Green $G^{\theta\theta}$ au point d'injection s'écrit [160] :

$$\begin{aligned} G^{\theta\theta}_{j\delta}(0,0,\tau=(t-t')) &= -\frac{K^N_{j\delta}}{2\pi}\Big[\ln\left(1+i\frac{v_F\tau}{a}\right) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} b^n_{j\delta}\left(\ln\left(1+\frac{iv_F\tau}{a+inLK^N_{j\delta}}\right)+\ln\left(1+\frac{iv_F\tau}{a-inLK^N_{j\delta}}\right)\right)\Big], \end{aligned} \tag{4.36}$$

où $b_{j\delta} = \left(K^N_{j\delta} - K^L_{j\delta}\right) / \left(K^N_{j\delta} + K^L_{j\delta}\right)$ est le coefficient rendant compte des réflexions multiples de type Andreev qui se produisent aux contacts et dépend explicitement des paramètres d'interaction coulombienne du nanotube et des électrodes. Son expression montre que seules les excitations du secteur de la charge totale $\{c+\}$ vont subir ces réflexions. Les autres quasi-particules ($\{c-\}$, $\{s+\}$ et $\{s-\}$) circulent dans les électrodes sans encombre. L'explication vient du fait que les réflexions causées aux contacts résultent du changement de valeur du paramètre d'interaction coulombienne K_{c+} entre le nanotube et les réservoirs. Les fonctions de Green bosoniques de la pointe et du nanotube sont rappelées dans l'Annexe A.

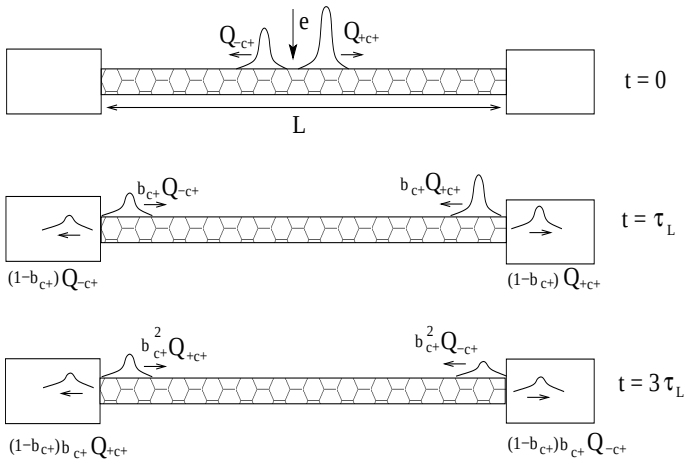


FIGURE 4.11 – *Réflexions de type Andreev aux contacts entre le nanotube de carbone et les réservoirs.*

En présence de contacts, le courant moyen dans le nanotube de carbone s'écrit [162] :

$$\langle I(x,t)\rangle = \frac{4\Gamma^2 e}{(\pi a)^2}\mathrm{sgn}(x)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin(eV_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2+\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)}}, \tag{4.37}$$

et les corrélations de courant à fréquence nulle s'expriment comme :

$$S(x,x';0) = \frac{2\Gamma^2 e^2}{(\pi a)^2}\left(1+\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')\right)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(eV_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \times \frac{\cos\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2+\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)}}. \tag{4.38}$$

Les détails des calculs sont présentés dans l'Annexe C. Il est important de noter que, d'une part, les fluctuations de point zéro données par la transformée de Fourier de l'équation (4.19) sont nulles à fréquence nulle [160], [146], [147]. D'autre part, et toujours en raison de la nullité de la fréquence de mesure, ces corrélations de courant, qui sont la transformée de Fourier de la formule (4.20) sont les corrélations totales, car fluctuations d'excès et totales sont égales. Aucune distinction entre elles n'est donc nécessaire.

Les corrélations croisées $S(x,-x;0)$ s'annulent. Ainsi, la présence des contacts induit une perte d'information sur la statistique des excitations se propageant à travers le nanotube de carbone. Ce résultat est identique à celui d'un liquide de Fermi dans lequel les courants circulant dans chaque branche ne sont pas corrélés.

4.3.3 Analyse des résultats

Une analyse plus fine du comportement du courant moyen et des corrélations nécessite un traitement numérique qui fait intervenir trois fréquences caractéristiques du système :

- $\omega_c = \frac{v_F}{a}$, la fréquence de coupure du modèle des liquides de Lüttinger,
- $\omega_L = \frac{2v_F}{LK_{c+}} = 1/\tau_L$, la fréquence associée à la longueur du nanotube de carbone. τ_L représente le temps mis par les excitations du secteur de la charge totale pour atteindre les contacts à partir du point d'injection $x = 0$,
- $\omega_0 = \frac{eV_0}{\hbar} = 1/\tau_V$, la fréquence associée à la tension constante appliquée. τ_V est directement relié à l'extension spatiale du paquet d'onde des quasi-particules $\Delta x = \frac{v_F\tau_V}{K_{c+}}$.

Les mesures ne peuvent donc être effectuées à une fréquence plus grande que celle de coupure sans risquer de perdre des informations sur les corrélations et sur le courant moyen. Au delà de cette limite, le signal perçu renseigne sur l'échantillon, plus que sur le bruit et les corrélations croisées.
En revanche, pour des valeurs de l'énergie inférieures à $\hbar\omega_c$, il est possible d'étudier plus en détails le comportement du conducteur en comparant les fréquences ω_0 et ω_L où apparaissent deux régimes distincts :

- $\omega_L \ll \omega_0 \Leftrightarrow L/2 \gg \Delta x$: cette situation traduit le fait que l'extension spatiale des paquets d'onde des excitations est beaucoup plus petite que la longueur du nanotube de carbone ;
- $\omega_L \geq \omega_0 \Leftrightarrow L/2 \leq \Delta x$: dans cette limite, la taille des paquets d'onde est plus grande que la longueur du nanotube.

Dans le premier régime, les intégrales qui apparaissent dans les formules du courant et du bruit sont calculables analytiquement. Le courant moyen et le bruit à fréquence nulle obéissent à la même loi de puissance : $S(x,x;\Omega=0) \sim \langle I(x,t)\rangle \sim (\omega_0/\omega_L)^\nu$. La relation de Schottky présente une valeur de la charge effective des excitations qui est celle de l'électron. Tant que les paquets d'onde possèdent une extension spatiale inférieure à la longueur du nanotube de carbone, c'est-à-dire qu'ils sont localisés spatialement, les réflexions qu'ils subissent aux contacts ne jouent pas de rôle dans le transport ($b_{c+} \to 0$). C'est pourquoi, on retrouve le comportement d'un conducteur unidimensionnel de longueur infinie en l'absence d'interaction.

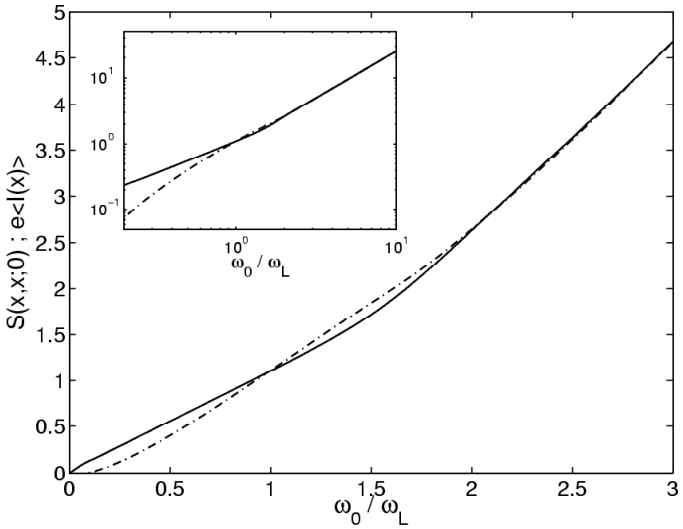


FIGURE 4.12 – *Courbes du courant moyen (tiret-pointillé) et du bruit à fréquence nulle (trait plein) en fonctions de ω_0/ω_L pour $K_{c+} = 0.2$. L'insert montre les variations log-log du courant et du bruit.*

En revanche, dans la limite $\omega_0/\omega_L \leqslant 1$, c'est-à-dire pour une extension spatiale des paquets d'onde supérieure à la longueur L du nanotube de carbone, un comportement

tout à fait différent se manifeste. L'électron injecté dans le nanotube se sépare en deux excitations qui se propagent librement dans des directions opposées jusqu'à rencontrer chaque contact et subir de multiples réflexions de type Andreev. Le bruit à fréquence nulle et le courant moyen ne suivent plus la même loi de puissance. On observe même une dépendance quasi-linéaire du bruit avec la tension appliquée à la pointe du STM (cf. insert (4.12)). Les réflexions aux contacts atténuent les effets des interactions coulombiennes dans le nanotube de carbone. La relation de type Schottky qui est alors obtenue fait apparaître un coefficient de proportionalité entre bruit et courant qui diffère de la charge de l'électron.

Afin d'étudier plus précisement cet effet, nous nous intéressons au facteur de Fano, défini par : $F = \frac{S(x,x;\Omega=0)}{e|\langle I(x,t)\rangle|}$. Son comportement en fonction du rapport des fréquences ω_0/ω_L est présenté sur le graphe (4.13) pour différentes valeurs du paramètre d'interaction coulombiennes.

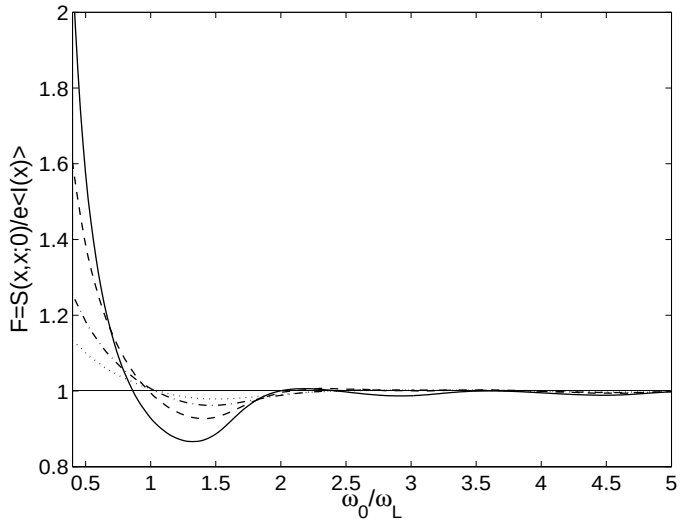


FIGURE 4.13 – *Facteur de Fano en fonction de ω_0/ω_L pour $K_{c+} = 0.15$ (trait plein), $K_{c+} = 0.2$ (tiret), $K_{c+} = 0.3$ (tiret-pointillé) et $K_{c+} = 0.4$ (pointillé).*

Trois phases se distinguent et traduisent différents bruits :
- un bruit super-poissonien ($F > 1$) lorsque $\omega_0/\omega_L < 1$,
- un bruit sub-poissonien ($F < 1$) pour $1 < \omega_0/\omega_L < 2$,
- un bruit poissonien ($F = 1$) dès que $\omega_0/\omega_L > 2$.

Le bruit possède une caractéristique non poissonienne pour des valeurs des fréquences où les réflexions de type Andreev jouent un rôle important c'est-à-dire lorsque des effets de taille finie se manifestent.

Le facteur de Fano est tracé pour différents couplages des interactions coulombiennes où l'on observe que l'augmentation de la valeur du paramètre K_{c+} induit la convergence

du facteur de Fano vers la valeur 1 qui correspond au cas d'un liquide de Lüttinger sans interaction. Par ailleurs, la phase sub-poissonienne du bruit présente un profil en cuvette dont la profondeur dépend de K_{c+} et dont la largeur W correspond à une période de ω_0/ω_L. Le comportement électronique du nanotube de carbone connecté à deux électrodes est sensible, à très basses tensions, aux interactions coulombiennes. La dépendance en tension du facteur de Fano dans les nanotubes de carbone, pour certains régimes, a été montré expérimentalement et théoriquement [143], [163], [164]. Cependant, dans ce système, cette dépendance peut être un moyen efficace pour déterminer la valeur du paramètre d'interaction coulombienne $K_{c+} = 2\hbar v_F W/eV_0 L$.

Aucune information n'est obtenue sur la statistique des porteurs de courant, les corrélations croisées en présence de contacts étant nulles à l'ordre 2 en Γ. Ce résultat n'est pas surprenant car l'expression des corrélations traduit le transport d'un seul électron injecté dans le nanotube. Cela signifie, entre autres, qu'aucune limite de temps n'étant imposée par l'injection d'un deuxième électron, l'excitation peut très bien être entière et se propager dans une branche comme dans l'autre. Les deux électrodes ne détectent, alors, aucune corrélation.

Pour compenser ces pertes d'information, il faudrait calculer les corrélations croisées à l'ordre supérieur non nul où deux électrons injectés successivement sont pris en compte. En effet, la théorie de la diffusion prédit des corrélations non nulles à l'ordre quatre en Γ, résultat en accord avec certaines observations expérimentales dans le cas d'un liquide de Lüttinger sans interaction. Mais nous choisissons de nous intéresser au comportement des corrélations lorsque la fréquence de mesure est finie.

4.3.4 Corrélations courant-courant à fréquence finie

Les mesures des fluctuations de courant à fréquence finie procèdent de l'échantillonnage des courants en fonction du temps. La transformée de Fourier des corrélations de courant à fréquence nulle correspond à un espacement des mesures de courant très long (idéalement infini), alors qu'à fréquence finie, le temps entre deux prises est d'autant réduit que les mesures sont effectuées à haute fréquence. La question de la mesure du bruit, qui n'est pas abordée ici, a fait l'objet de plusieurs articles expérimentaux [16], [15], [17], [159] et théoriques [19], [18], [20].

Les fluctuations à l'équilibre de l'équation (4.19) participent à la densité spectrale du bruit symétrisé [146], [147]. Cependant, l'intérêt de notre étude se porte sur les corrélateurs d'excès non symétrisés. Il n'est donc pas nécessaire de considérer les effets des fluctuations de point zéro [160].

La transformée de Fourier de la fonction (4.20) est une convolution définie par :

$$\begin{aligned} S(x,x';\Omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\Omega\tau} S(x,x';\tau) \\ &= \frac{\Gamma^2 e^2 v_{\mathrm{F}}^2}{2(\pi a)^2} \sum_{r_1,\sigma_1,\eta_1,\eta_2} \eta_1\eta_2 \Big[\tilde{A}_{\eta_1\eta_2}(0)\tilde{B}_{-\eta_1}(x,0,\Omega)\tilde{B}_{+\eta_1}(x',0,-\Omega) \\ &- \tilde{A}_{\eta_1\eta_2}(-\Omega)\tilde{B}_{-\eta_2}(x,0,\Omega)\tilde{B}_{+\eta_1}(x',0,-\Omega) - \tilde{A}_{\eta_1\eta_2}(\Omega)\tilde{B}_{-\eta_1}(x,0,\Omega)\tilde{B}_{+\eta_2}(x',0,-\Omega) \\ &+ \tilde{A}_{\eta_1\eta_2}(0)\tilde{B}_{-\eta_2}(x,0,\Omega)\tilde{B}_{+\eta_2}(x',0,-\Omega)\Big]. \end{aligned} \tag{4.39}$$

$\tilde{A}(\Omega)$ et $\tilde{B}(x,0,\Omega)$ sont les transformées de Fourier des facteurs définis aux équations (4.21) et (4.22). Une fois les fonctions de Green bosoniques en présence de contacts introduites dans cette formule, les corrélations de courant à fréquence finie deviennent :

$$\begin{aligned} S(x,x';\Omega) &= \frac{32\Gamma^2 e^2}{(2\pi v_{\mathrm{F}})^2} \tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) \int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ &\times \frac{\cos\left(\Omega\tau - (1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\right) - \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2 + \left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)}} \\ &- \frac{64\Gamma^2 e^2}{(2\pi v_{\mathrm{F}})^2}\Theta(\Omega)\Big[\mathrm{Re}\left(\tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) + \tilde{Q}^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}}\right)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)\left(\sin(\Omega\tau)\right)}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ &\times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\right) + \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2 + \left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)}} \\ &- \mathrm{Im}\left(\tilde{Q}^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}}\right)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)\left(1-\cos(\Omega\tau)\right)}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ &\times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\right) + \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(pLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2 + \left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)}}\Big], \end{aligned} \tag{4.40}$$

avec

$$\tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) = \left(\frac{v_{\mathrm{F}}}{a}\right)^2 \frac{K^2_{\mathrm{c}+}|\phi_+(\Omega)|^2 + |\phi_-(\Omega)|^2 \mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{(1+K_{\mathrm{c}+})^2}, \tag{4.41}$$

$$\tilde{Q}^-_{xx'}(\Omega) = \left(\frac{v_{\mathrm{F}}}{a}\right)^2 \frac{K^2_{\mathrm{c}+}(\phi_+(\Omega)^2 - (\phi_-(\Omega))^2 \mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{(1+K_{\mathrm{c}+})^2}, \tag{4.42}$$

où la fonction $\phi_\pm(\Omega) = \left(1 \pm b_{\mathrm{c}+}e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{c}+}}}\right)^{-1}$ rend compte de la présence des contacts. Les détails du calcul sont présentés dans l'Annexe C.

Ce résultat est la formulation exacte des corrélations de courant à fréquence finie. Des expressions du bruit et des corrélations croisées apparaîssent déjà dans l'article de A. Lebedev et al. [160]. Les auteurs obtiennent ces expressions en négligeant certains termes de l'équation (4.40). Une des conditions de validité de leur approximation obligent, cependant, à restreindre l'étude au régime $\omega_L \ll \omega_0$.

Revenons à la formule (4.40). On remarque que les corrélations croisées ne sont pas nulles à l'ordre deux en Γ. Ainsi, des mesures à fréquence finie des fluctuations du courant permettent de récupérer des informations sur la caractérisation des excitations collectives.

Les mesures expérimentales extraient les corrélations d'excès, lesquelles ont été définies à la section 1.7.5. C'est pourquoi les résultats numériques suivants représentent le corrélateur de l'équation (4.39), auquel la contribution à tension nulle est soustraite, afin d'identifier clairement le bruit de grenaille. Rappelons également que la convention choisie pour définir ces corrélations de courant non symétrisées, implique que les fréquences négatives représentent l'émission d'énergie du nanotube de carbone vers un détecteur et que les fréquences positives représentent l'absorption d'énergie du conducteur. Ainsi, le spectre d'émission est nul lorsque la fréquence d'étude du système est plus grande que la tension qui lui est appliquée (ici à la pointe de STM). Il s'agit d'une conséquence de la conservation du courant. De telles contraintes ne concernent pas la partie absorption des corrélations de courant.

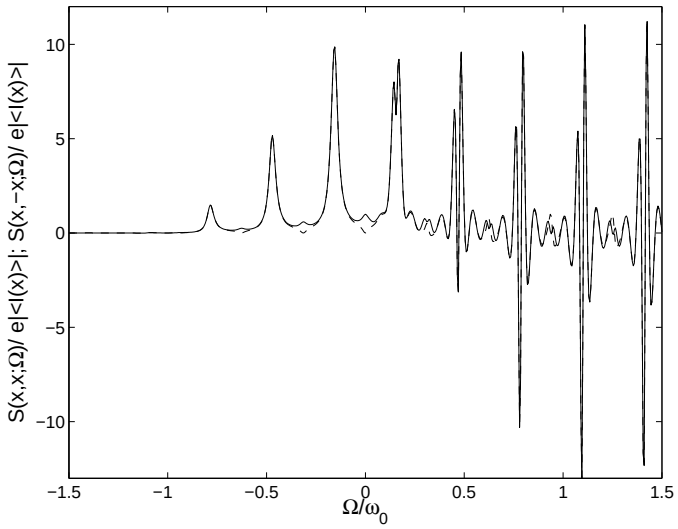


FIGURE 4.14 – *Comportement du bruit (trait plein) et des corrélations croisées (tiret) en fonction de la fréquence dans un nanotube connecté à des réservoirs, pour $K_{c+} = 0.2$ et dans le régime $\Delta x \ll L/2$.*

La première observation, commune aux graphes (4.14), (4.15) et (4.16) représentant

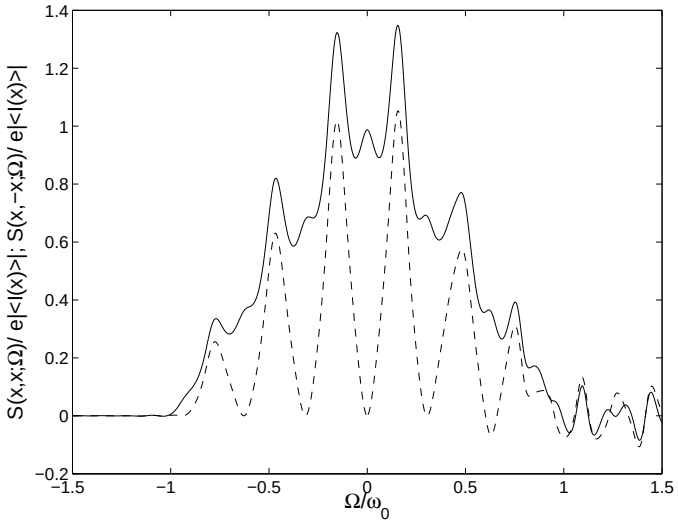


FIGURE 4.15 – *Comportement du bruit (trait plein) et des corrélations croisées (tiret) en fonction de la fréquence dans un nanotube connecté à des réservoirs, pour* $K_{c+} = 0.6$ *et dans le régime* $\Delta x \ll L/2$.

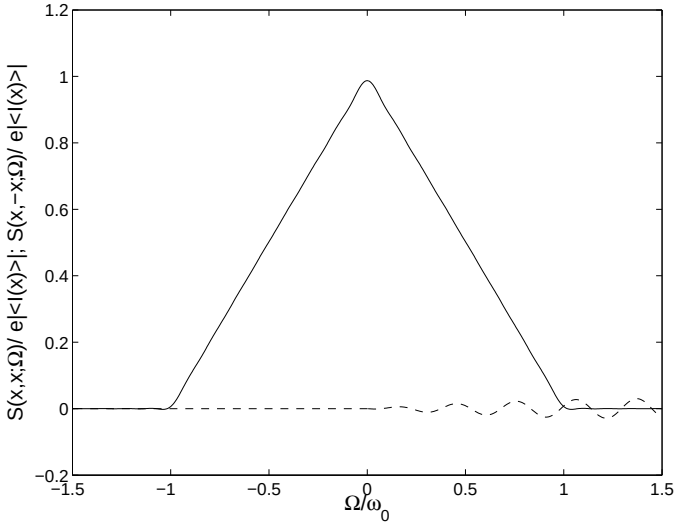


FIGURE 4.16 – *Comportement du bruit (trait plein) et des corrélations croisées (tiret) en fonction de la fréquence dans un nanotube connecté à des réservoirs, pour* $K_{c+} = 1$ *et dans le régime* $\Delta x \ll L/2$.

le bruit et les corrélations croisées, est qu'à fréquence nulle les corrélations croisées s'annulent, confirmant le résultat de l'équation (4.38). Plus précisement, les équations (4.38) et (4.40) sont issues d'un calcul perturbatif en Γ développé au deuxième ordre. Cela traduit, dans le transport, qu'un seul électron est injecté dans le nanotube de carbone à la fois : il s'agit d'un processus poisssonien.

Les graphes (4.14) et (4.15) représentent la limite $\omega_L \ll \omega_0$, pour un nanotube de carbone en présence d'interactions coulombiennes. Le bruit et les corrélations croisées présentent des pics de résonance lorsque l'extension spatiale des paquets d'onde est très inférieure à la longueur du nanotube de carbone. Cela signifie que le temps mis par

les excitations pour atteindre les contacts $\tau_L = \omega_L^{-1}$ est grand devant le temps d'injection $\tau_V = \omega_0^{-1}$. En s'appuyant sur la figure (4.11), on peut montrer que ces résonances peuvent se voir comme le passage des paquets d'onde dans les contacts après une série de réflexions de type Andreev et que leur fréquence s'écrit : $\omega\tau_L = (2p+1)\pi/2$ [14]. Ainsi, le pic le plus proche de la limite à fréquence nulle, commun au bruit et aux corrélations croisées, traduit la mesure de la partie transmise des excitations dans les électrodes. En revanche, la partie réfléchie aux contacts se propage jusqu'à atteindre le contact opposé au bout d'un temps $t = 3\tau_L$. Puis, une partie est transmise dans les électrodes et l'autre est réfléchie. Le processus continue. Mais à chaque fois qu'un contact est atteint, la charge du paquet d'onde diminue et ceci se traduit par des amplitudes de résonances de moins en moins importantes.

Notons que l'amplitude de ces résonances est plus importante en présence de fortes interactions coulombiennes, ce qui peut se comprendre à travers l'expression de l'extension spatiale des paquets d'onde qui dépend du paramètre K_{c+}. De plus, une comparaison de ces résultats avec le comportement du bruit à fréquence finie dans un nanotube de carbone homogène montre que l'amplitude de ces résonances reste bien plus importante en présence des contacts [160]. Remarquons enfin, que le signe des corrélations croisées n'est pas modifié, traduisant toujours une statistique bosonique des excitations à travers le nanotube de carbone.

La figure (4.16) représente la dépendance en fréquence du bruit et des corrélations croisées dans un nanotube de carbone sans interaction coulombienne. Dans ce cas, l'absence de pics de résonances est une conséquence du modèle choisi. En effet, les contacts entre le conducteur unidimensionnel et les électrodes existent à travers la dépendance du paramètre d'interaction coulombienne K_{c+} en fonction de la position le long du nanotube. Ainsi, dans un liquide de Fermi, ce paramètre est égal à 1 et ce, indépendamment de la position le long du conducteur.

4.4 Transport photo-assisté

Nous regardons à présent la réponse du système à la superposition d'une tension alternative à la tension constante déjà appliquée à la pointe du STM : $V(t) = V_0 + V_1\cos(\omega t)$. L'injection des électrons dans le nanotube de carbone se trouve changée et cette modification se traduit dans l'amplitude de transfert via une transformation de jauge :

$$\Gamma(t) = \Gamma\exp\{i\left(\omega_0 t + \frac{\omega_1}{\omega}\sin(\omega)t\right)\} \tag{4.43}$$

$$= \Gamma\sum_{p\in\mathbb{Z}} J_p\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)\exp\{i\left(\omega_0 + p\omega\right)t\}, \tag{4.44}$$

où $\omega_0 = eV_0/\hbar$ et $\omega_1 = eV_1/\hbar$. L'amplitude tunnel se développe comme une somme de fonction de Bessel J_p d'ordre p et de terme dépendant de $p\omega$. Ainsi, en présence d'une tension oscillante, chaque niveau d'énergie E se décompose en une infinité de bandes d'énergie $E \pm p\omega$ du spectre [165].

Le calcul du courant moyen, comme celui des corrélations, est similaire à celui effectué lorsque la tension appliquée à la pointe de STM est constante (voir Annexe C). En revanche, la modulation qui est ajoutée à cette tension V_0 fait apparaître une somme infinie de fonctions de Bessel. Ainsi,

$$\begin{aligned}\langle I(x,t)\rangle = \sum_{p\in\mathbb{Z}} J_p^2\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)\frac{4\Gamma^2 e}{(\pi a)^2}\mathrm{sgn}(x)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\sin((\omega_0+p\omega)\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ \times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2+\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)}},\end{aligned} \tag{4.45}$$

$$\begin{aligned}S(x,x';0) = \sum_{p\in\mathbb{Z}} J_p^2\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)\frac{2\Gamma^2 e^2}{(\pi a)^2}\left(1+\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')\right)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos((\omega_0+p\omega)\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ \times \frac{\cos\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2+\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)}}.\end{aligned} \tag{4.46}$$

L'expression (4.45) n'apporte pas plus d'information que celles déjà extraites de la situation où la tension appliquée est constante. L'interprétation sur le comportement de ces corrélateurs en loi de puissance ($\sim |\omega_0|^\nu$) dans la limite où les excitations ont une extension spatiale faible, comparée à la longueur du nanotube, n'est plus valable. La raison est que, même lorsque $\omega_0 \gg \omega_L$, le courant moyen et les corrélations à fréquence nulle sont caractérisés par une somme infinie de loi de puissance. Les arguments des sous-sections précédentes ne permettent plus d'expliquer ce comportement.

Dans le transport photo-assisté, l'interprétation du comportement des auto-corrélations à fréquence nulle repose sur l'analyse de la dérivée du bruit en fonction de la tension appliquée [166]. Cela permet une comparaison avec les résultats obtenus dans le cas sans interaction, où elle présente un comportement en escalier [167]. Les caractéristiques de la dérivée du bruit en fonction de la tension sont présentées sur la figure (4.17).

Les trois courbes montrent trois comportements différents qui sont reliés aux effets de taille finie énoncés dans les sections précédentes.

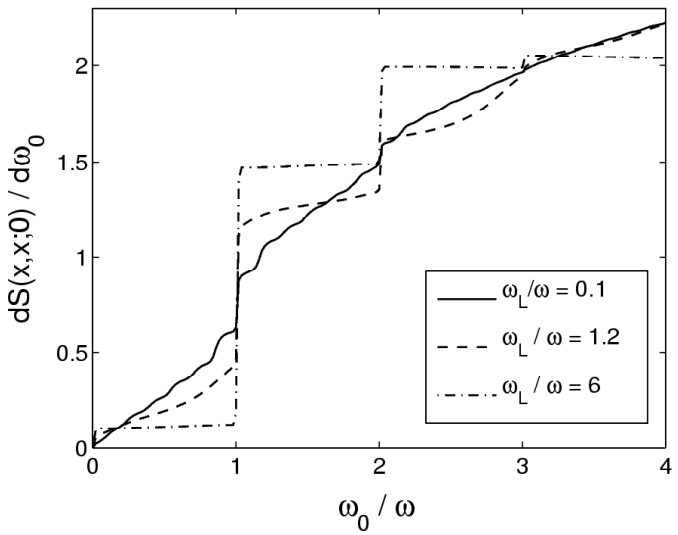


FIGURE 4.17 – *Dérivée du bruit en fonction de ω_0/ω pour $K_{c+} = 0.2$, $\omega_1/\omega = 2$ et pour différentes valeurs de la fréquence associée à la longueur du nanotube de carbone.*

Dans la limite où $\omega_L/\omega \ll 1$, l'extension spatiale des paquets d'onde est inférieure à la longueur du nanotube de carbone. Ainsi, la recombinaison des excitations en électrons une fois parvenues aux contacts résulte de processus de type Fabry-Pérot. En effet, ce régime correspond à l'étude d'une plage de fréquence où $\omega_0 > \omega_L$. L'absence de plateaux marqués traduit un comportement de la dérivée du bruit différent de celui obtenu dans un métal normal. Mais, à cause des effets des interactions coulombiennes, la courbe est lissée. Cependant, pour chaque valeur entière de ω_0/ω, c'est-à-dire, pour chaque position d'un nouveau niveau d'énergie, la dérivée du bruit augmente de manière abrupte. Entre chaque augmentation, on observe également la présence d'oscillations qui résulte de la commensurabilité entre la fréquence associée à la longueur du nanotube de carbone ω_L et la fréquence de la tension modulée ω_1.

La situation $\omega_L/\omega \sim 1$ représente le régime intermédiaire dans lequel l'extension spatiale des excitations Δx et la longueur L du nanotube sont comparables. Enfin, lorsque $\omega_L/\omega > 1$, les effets de taille finie dominent les effets des interactions coulombiennes dans le comportement de la dérivée du bruit à fréquence nulle. Les quasi-particules ayant une extension spatiale supérieure à la longueur du nanotube, les processus de type Fabry-Pérot qui permettent la recombinaison des excitations en électrons aux contacts ne sont plus efficaces. En conséquence, la courbe de la dérivée du bruit présente une forme en escalier dont les sauts sont marqués et qui est typique d'un métal sans interaction.

Notons enfin que pour une plage de fréquence étudiée plus large, c'est-à-dire lorsque nous sommes dans le régime $\omega_0/\omega_L \gg 1$, toutes les courbes convergent vers le même comportement de la dérivée du bruit, sans plateaux ni oscillations. Cela résulte du rôle

important que jouent les interactions coulombiennes dans cette limite. En effet, le bruit DC a une dépendance en loi de puissance en fonction de la tension $S_{DC} \propto |\omega_0|^\nu$, ce qui conduit à un bruit AC de la forme :

$$S_{AC} \propto \sum_{p\in\mathbb{Z}} J_p^2\left(\frac{\omega_1}{\omega}\right)|\omega_0 + p\omega|^\nu, \tag{4.47}$$

où le coefficient non universel ν est relié aux paramètres d'interaction coulombiennes.

Conclusion

Le comportement d'un nanotube de carbone est étudié via ses propriétés de transport. Ce conducteur unidimensionnel à quatre secteurs de propagation est intégré à un système dans lequel il est connecté à ses extrémités à deux électrodes métalliques. Des électrons sont injectés en son cœur depuis une pointe de STM par effet tunnel. Le courant moyen et les corrélations ont été obtenus par un calcul perturbatif au plus bas ordre pertinent non nul en l'amplitude tunnel.

La première étude s'est portée sur le comportement de ces deux quantités lorsque les contacts ne sont pas pris en compte ($L \to \infty$). Cela a permis de mettre en évidence le caractère liquides de Lüttinger du nanotube à travers la caractéristique $I(V)$ qui possède une dépendance en loi de puissance : $\langle I\rangle \propto |\omega_0|^\nu$ où l'exposant ν se définit en fonction des paramètres d'interaction coulombiennes de chaque secteur. Le bruit et les corrélations croisées suivent une relation de type Schottky qui fait apparaître une charge effective non entière des excitations. L'interprétation de ces coefficients de proportionnalité non entier est la suivante : un électron injecté dans le nanotube de carbone se scinde en deux quasi-particules intriquées de charge $Q_{\mathrm{rc}+} = (1 + rK_{\mathrm{c}+})e/2$ qui se propagent dans des directions opposées. Enfin, le signe négatif des corrélations croisées met en évidence la statistique bosonique des excitations.

Afin de s'approcher d'un système expérimental réaliste, les contacts sont pris en compte. Il s'agit de rendre le paramètre d'interaction coulombienne dépendant de sa position le long du système. La présence des contacts met en lumière des effets de taille finie qui viennent perturber le comportement du courant moyen et du bruit. On observe, de plus, une perte d'information sur les excitations car les corrélations croisées sont alors nulles. Un calcul à l'ordre supérieur en Γ serait alors nécessaire afin de remédier à cette perte d'information. Deux régimes différents apparaissent en fonction du rapport des fréquences liées à la tension appliquée à la pointe et à la longueur du nanotube. Lorsque $\omega_0/\omega_L \sim 1$, la relation de type Schottky est violée. Le bruit présente un comportement super-poissonien puis sub-poissonien, lequel peut être utilisé afin de déterminer le paramètre d'interaction coulombienne, et enfin poissonien lorsque la

longueur du nanotube de carbone augmente. Cela signifie que l'étalement des paquets d'onde des excitations provenant d'électrons injectés est trop important pour laisser place à des recombinaisons électroniques aux contacts. En revanche, courant moyen et bruit à fréquence nulle retrouvent un comportement en loi de puissance dépendant de la tension appliquée dès que les excitations, localisée dans l'espace, ont un étalement inférieur à la longueur du nanotube. A fréquence finie et dans la limite $\omega_L \ll \omega_0$, on observe l'apparition de pics de résonance dans le comportement du bruit et des corrélations croisées. Leur fréquence dépend du temps mis par les paquets d'onde pour atteindre les contacts. Mais une étude plus poussée a réussi à extraire également des informations sur le paramètre d'interaction coulombienne K_{c+} en fonction du rapport entre corrélations croisées et bruit [14], [160].

Enfin, pour compenser le fait que les corrélations croisées sont nulles et pour obtenir de nouvelles informations sur le système, nous nous sommes intéressés au transport photo-assisté et plus exactement au comportement de la dérivée du bruit à fréquence nulle par rapport à la tension. L'application d'une modulation de la tension entre la pointe et le nanotube se transcrit dans l'injection des électrons. La structure en escalier de la dérivée du bruit, typique des systèmes sans interaction, est observée bien qu'elle soit partiellement lissée par la présence des interactions coulombiennes dans ce conducteur unidimensionnel. Lorsque les paquets d'onde ont une largeur comparable à la longueur du nanotube de carbone, le comportement en marches d'escalier est très prononcé. Le fait que cela arrive dans la limite où les effets de taille finie apparaissent, met en évidence leur domination, dans le système, sur les effets des interactions coulombiennes.

5

Etude de l'écrantage d'un fil quantique causé par une pointe de STM

Sommaire

5.1 Présentation du système 125
5.1.1 Rappels 125
5.1.2 Modèle 126
5.2 Equations de Dyson des fonctions de Green bosoniques 127
5.2.1 Choix de la forme du potentiel électrostatique 131
5.2.2 Application aux équations de Dyson 132
5.3 Propriétés spectrales du fil quantique 133
5.3.1 Fonction spectrale en présence d'écrantage 133
5.3.2 Densité d'états 138
5.4 Propriétés de transport du fil quantique 144
5.4.1 Courant tunnel 145
5.4.2 Bruit non symétrisé 147
5.4.3 Conductance 152
Conclusion 153

Le terme *fil quantique* définit, de manière générale, un conducteur balistique, se comportant comme un guide d'onde sans dimension transverse. On peut donc appeler fil quantique les nanotubes de carbone, les fils semi-conducteurs obtenus par constriction d'un gaz bidimensionnel, les chaînes de polymère ou tout autre matériau dont le confinement énergétique restreint le mouvement libre des électrons à une direction de propagation.

L'exploration des propriétés intrinsèques de ce type d'objets peut être faite en connectant le fil à une source de tension de part et d'autre de ses extrémités. De même, une grille peut être intégrée afin d'accéder à d'autres informations ou à de nouvelles manipulations.

L'ajout d'une pointe de STM à ce genre de système présente plusieurs intérêts. En effet, comme dans le système du chapitre précédent, elle peut servir d'injecteur d'électrons dans le conducteur unidimensionnel mais également de sonde des propriétés électroniques de ce dernier [168], [169], [170]. Certaines expériences l'utilisent même afin de déplacer des nano-objets [171] ou des atomes [172], [173] sur une surface.

Cependant, au regard de leur dimension respective, la proximité d'une pointe de STM et du fil quantique induit des effets d'écrantage dans ce dernier. Dans ce chapitre, on se propose d'étudier ces effets et leur conséquences sur les propriétés intrinsèques du conducteur unidimensionnel. Une fois le modèle du système introduit, ces effets d'écrantage sont analysés sous deux angles de vue différents mais complémentaires : le comportement spectral et les propriétés de transport.

5.1 Présentation du système

Le système auquel nous nous intéressons est le suivant. Une pointe de STM est approchée d'un fil quantique métallique déposé sur un substrat (cf. Fig. (5.1)). On s'intéresse aux conséquences d'une telle proximité entre pointe et fil sur les propriétés électroniques de ce dernier.

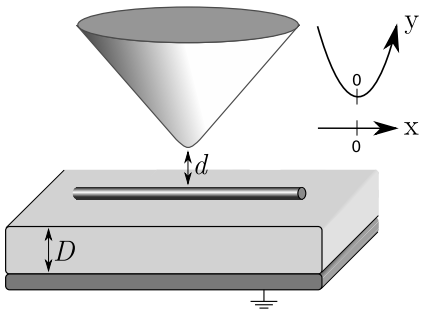


Figure 5.1 – *Représentation du système. d est la distance entre la pointe de STM et le fil quantique métallique et D est la distance séparant le fil de la grille.*

Pour mener à bien cette étude, plusieurs quantités physiques mesurables sont analysées et comparées à une situation où la pointe ne provoque aucun écrantage dans le fil, comme cela a été fait dans les chapitres 3 et 4. Aussi, nous allons nous intéresser dans un premier temps à la fonction spectrale et à la densité d'états pour connaître les propriétés spectrales du système unidimensionnel, puis nous étudierons les propriétés de transport à travers le courant tunnel, le bruit tunnel à fréquence nulle, le bruit d'excès tunnel et la conductance.

5.1.1 Rappels

Dans le premier chapitre de cette thèse, le concept d'écrantage a été introduit via deux modèles différents. Il a ainsi été montré que l'ajout d'une charge externe provoque une réorganisation des porteurs de charges éliminant le champ électrique induit. Cependant, les modèles de Thomas-Fermi comme de Lindhard ne s'appliquent qu'à des gaz d'électrons sans interaction, ce qui n'est pas le cas d'un système unidimensionnel.

En fait, le phénomène d'écrantage dans un système d'électrons fortement corrélés requiert un traitement par la bosonisation. Des études théoriques ont été mené pour étudier les effets d'une impureté dans un fil quantique. Mais leur validité est limitée par l'obtention de résultats perturbatifs [145], [147], [174], [175], [176], [177], [178]. La présence de l'impureté induit des phénomènes de rétrodiffusion, lesquels apparaissent via un terme en $\cos(\sqrt{2\pi}\theta_c)$, qui ne peuvent être traités exactement.

Dans le modèle que nous proposons, la présence de la pointe est décrite non pas comme une impureté, mais à travers le potentiel électrostatique qui la relie au fil.

5.1.2 Modèle

Le système, schématisé sur la figure (5.1), est décrit par un hamiltonien total qui comprend trois termes. Le premier correspond au fil quantique inhomogène dans le modèle des liquides de Lüttinger [140], [139], [158] :

$$\mathrm{H}_{\mathrm{fil}} = \sum_{j=c,s} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{v_{\mathrm{j}}(x)}{2} \left[K_{\mathrm{j}}(x) \left(\partial_x \phi_{\mathrm{j}}(x)\right)^2 + K_{\mathrm{j}}^{-1}(x) \left(\partial_x \theta_{\mathrm{j}}(x)\right)^2 \right] . \tag{5.1}$$

Rappellons que ϕ_{j} et θ_{j} sont les champs bosoniques non chiraux, K_{j} est le paramètre d'interaction coulombienne dans les secteurs de spin ($j = s$) et de charge ($j = c$) et $v_{\mathrm{j}}(x) = v_{\mathrm{F}}/K_{\mathrm{j}}(x)$ est la vitesse de propagation des excitations dans ces secteurs.

L'invariance par rotation de spin assure que seul le secteur de charge est affecté par les interactions, lesquelles sont considérées comme répulsives. Ainsi,

$$K_{\mathrm{s}} = 1, \tag{5.2}$$

$$K_{\mathrm{c}} = (1 + 2\tilde{V}(0)/(v_{\mathrm{F}}\pi))^{-1/2} < 1, \tag{5.3}$$

avec $\tilde{V}(0)$ la composante de moment nul de la transformée de Fourier du potentiel coulombien. De plus, en dehors du fil, chacun de ces paramètres est égal à 1 afin de signifier l'absence de fortes corrélations entre électrons.

La pointe de STM est un métal normal. Cependant, afin de rester cohérent dans la formalisation du système entier, elle est également décrite par le modèle de Lüttinger, comme un liquide chiral sans interaction de longueur infinie [14]. Le hamiltonien de la pointe est donc :

$$\mathrm{H}_{\mathrm{STM}} = \frac{u_{\mathrm{F}}}{4\pi} \sum_{\sigma'=\pm 1} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \, \left(\partial_y \varphi_{\sigma'}(y)\right)^2, \tag{5.4}$$

où $\varphi_{\sigma'}$ est le champ bosonique chiral de la pointe associé au champ fermionique $C_{\sigma'}$, définit à la section 4.2.1 :

$$C_{\sigma'}(y) = \frac{f_{\sigma'}}{\sqrt{2\pi a}} e^{i\varphi_{\sigma'}(y)}. \tag{5.5}$$

Le facteur de Klein $f_{\sigma'}$ et la longueur de coupure a ont été introduits à la section 2.2. L'absence d'interactions entre électrons dans ce sous système se traduit par la non renormalisation de la vitesse de Fermi u_{F} dans le hamiltonien $\mathrm{H}_{\mathrm{STM}}$. Enfin, l'indice de

spin σ' est ici pris en compte afin de laisser le choix de considérer ou non une pointe magnétique.

L'interaction entre la pointe de STM et le fil quantique est décrite par un potentiel électrostatique $W(x,y)$, intervenant dans le hamiltonien d'écrantage :

$$\mathrm{H}_{\mathrm{Sc}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy\ \rho_{\mathrm{fil}}(x) W(x,y) \rho_{\mathrm{STM}}(y)\ , \tag{5.6}$$

qui couple les opérateurs densité de chacun des sous systèmes. L'expression de la densité totale du fil quantique a été introduite au deuxième chapitre (cf. Eq. (2.35)) et s'écrit :

$$\rho_{\mathrm{fil}}(x) \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{\pi}} \partial_x \theta_{\mathrm{c}}(x) + \rho_{2k_{\mathrm{F}}}(x), \tag{5.7}$$

avec

$$\rho_{2k_{\mathrm{F}}}(x) \quad = \quad \frac{2k_{\mathrm{F}}}{\pi} \cos\left(2k_{\mathrm{F}} + \sqrt{2\pi}\theta_{\mathrm{c}}(x)\right) \cos\left(\sqrt{2\pi}\theta_{\mathrm{s}}(x)\right). \tag{5.8}$$

Il s'agit précisemment de la contribution intervenant dans l'expression du potentiel de rétrodiffusion causée par la présence d'une impureté [145], [147].

La version bosonisée de l'opérateur densité de la pointe suit les mêmes règles que dans le cas du fil :

$$\rho_{\mathrm{STM}}(y) \quad = \quad \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma'} \partial_y \varphi_{\sigma'}(y)\ . \tag{5.9}$$

Ainsi, le hamiltonien total du système $\mathrm{H}_{\mathrm{TOT}} = \mathrm{H}_{\mathrm{fil}} + \mathrm{H}_{\mathrm{STM}} + \mathrm{H}_{\mathrm{Sc}}$ est un hamiltonien quadratique en les divers champs bosoniques hormis une contribution en $\rho_{2k_{\mathrm{F}}}$. Mais, comme nous le verrons par la suite, ce terme n'est pertinent que pour certaines valeurs du paramètre d'interaction coulombienne. Dans la limite de non pertinence, le négliger permet une analyse spectrale exacte.

Avant d'en arriver à ce point, il est nécessaire de déterminer les équations de Dyson régissant le comportement des fonctions de Green en présence d'écrantage afin de déterminer l'expression des quantités physiques auxquelles nous nous intéressons.

5.2 Equations de Dyson des fonctions de Green bosoniques

Les propriétés spectrales et de transport nécessitent le calcul des fonctions de Green fermioniques du système global et à travers ces fonctions, les fonctions de Green bosoniques Keldysh.

Afin de les obtenir, nous choisissons de définir la fonction de partition dans le for-

malisme Matsubara [179] :

$$Z[\varphi,\phi,\theta] = \int \mathcal{D}\varphi_\uparrow \mathcal{D}\varphi_\downarrow \mathcal{D}\phi_c \mathcal{D}\phi_s \mathcal{D}\theta_c \mathcal{D}\theta_s e^{-\int d\tau (\mathrm{L}-\mathrm{L}_{\mathrm{aux}})} , \tag{5.10}$$

où L est le lagrangien total du système et $\mathrm{L}_{\mathrm{aux}}$ est défini par :

$$\begin{aligned} \mathrm{L}_{\mathrm{aux}} &= \sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\eta_{\phi_\mathrm{j}}(x,\tau)\phi_\mathrm{j}(x,\tau) + \eta_{\theta_\mathrm{j}}(x,\tau)\theta_\mathrm{j}(x,\tau)) \\ &\quad + \sum_{\sigma'} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \eta_{\varphi_{\sigma'}}(y,\tau)\varphi_{\sigma'}(y,\tau) . \end{aligned} \tag{5.11}$$

L'introduction de ce terme source est essentiel pour extraire les fonctions de Green bosoniques. Par exemple, le corrélateur $\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x,\tau;x',\tau') = \langle \mathrm{T}_\tau\{\theta_\mathrm{j}(x,\tau)\theta_\mathrm{j}(x',\tau')\}\rangle$, T_τ étant l'opérateur d'ordre temporel, s'obtient via la relation :

$$\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x,\tau;x',\tau') = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\eta_{\theta_\mathrm{j}}(x,\tau)\partial\eta_{\theta_\mathrm{j}}(x',\tau')} . \tag{5.12}$$

En présence du terme oscillant de l'opérateur densité du fil, l'intégration sur les degrés de liberté de la pointe fait apparaître dans la fonction de partition effective un terme de rétrodiffusion proportionnel à $(\rho_{2\mathrm{k_F}}(0))^2$. Notons que cette partie oscillante est considérée en $x = 0$ car la loi de puissance décroissante qui régit le comportement de la double dérivée du potentiel électrostatique peut être approximée par des Diracs en $x = 0$ et $y = 0$. Afin d'examiner la pertinence de ce terme d'interactions dans les propriétés du fil, sujet de notre étude, nous utilisons les équations du groupe de renormalisation [180]. Dans le cas d'un liquide de Lüttinger comprenant un secteur de charge et un secteur de spin, l'équation de l'amplitude du potentiel de rétrodiffusion $v_{n_s,n_c}\cos(\sqrt{2\pi}n_c\theta_\mathrm{c}(0))\cos(\sqrt{2\pi}n_s\theta_\mathrm{s}(0))$, avec $n_{s,c}$ entiers, s'écrit :

$$\frac{\partial v_{n_s,n_c}}{\partial l} = \left(1 - \frac{n_c^2}{2}K_\mathrm{c} - \frac{n_s^2}{2}K_\mathrm{s}\right) v_{n_s,n_c}. \tag{5.13}$$

Considérons tout d'abord la rétrodiffusion d'un seul électron ($n_c = n_s = 1$). La condition de pertinence de ce terme de rétrodiffusion est assurée lorsque la dérivée de l'amplitude du potentiel de rétrodiffusion est positive, qui se traduit par la présence dans le système d'interactions répulsives, $K_\mathrm{c} < 1$. En effet, sous invariance par rotation de spin, le paramètre d'interaction coulombienne du secteur de spin est égal à 1. On retrouve alors le résultat développé dans [180].

Revenons à notre situation. La contribution de rétrodiffusion générée par les interac-

tions d'écrantage est d'ordre 2 en ρ_{2k_F}. A partir de l'équation (5.13), trois situations sont possibles :

- $\{n_c = n_s = 2\}$ qui traduit une situation impossible où $K_c < -1/2$,
- $\{n_c = 0,\ n_s = 2\}$ qui équivaut également à un cas impossible,
- $\{n_c = 2,\ n_s = 0\}$ qui signifie $K_c < 1/2$.

Ainsi, le terme de rétrodiffusion n'est pas pertinent au sens du groupe de renormalisation tant que l'on considère $K_c > 1/2$. En conséquence, la partie oscillante de l'opérateur densité du fil défini à l'équation (2.35) peut être négligée si la condition sur le paramètre d'interaction coulombienne du secteur de charge est respectée. Cela permet de considérer un hamiltonien total quadratique en les champs bosoniques, donc exactement soluble.

Dans cette limite, le lagrangien total apparaîssant dans la formule de la fonction de partition se décompose en trois termes :

- le langrangien associé au fil quantique :

$$\mathrm{L_{fil}} = -\frac{1}{2}\sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx \begin{pmatrix} \phi_j(x,\tau) & \theta_j(x,\tau) \end{pmatrix} G_{fil}^{-1}(x,\tau) \begin{pmatrix} \phi_j(x,\tau) \\ \\ \theta_j(x,\tau) \end{pmatrix} , \tag{5.14}$$

où G_{fil}^{-1} est une matrice dont chaque élement couple les champs ϕ_j et θ_j.

- le lagrangien décrivant la pointe de STM :

$$\mathrm{L_{STM}} = -\frac{1}{2}\sum_{\sigma'} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \varphi_{\sigma'}(y,\tau)(G_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(y,\tau)\varphi_{\sigma'}(y,\tau) , \tag{5.15}$$

- le lagrangien encodant les informations sur le couplage entre la pointe et le fil quantique :

$$\mathrm{L_{Sc}} = -\sum_{\sigma'} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \varphi_{\sigma'}(y,\tau) G_{Sc}^{-1}(x,y)\theta_c(x,\tau) . \tag{5.16}$$

Chaque expression est détaillée dans l'Annexe D.

Afin d'avoir accès aux fonctions de Green bosoniques du fil, l'intégration doit

d'abord se faire sur les degrés de liberté de la pointe. Ainsi :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x,\tau;x',\tau') &= G_j^{\theta\theta}(x,\tau;x',\tau') + \delta_{jc}\sum_{\sigma'}\int d\tau_1\int d\tau_2\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1\int_{-\infty}^{+\infty}dx_2\int_{-\infty}^{+\infty}dy_1\int_{-\infty}^{+\infty}dy_2 \\ &\times\ G_j^{\theta\theta}(x,\tau;x_1,\tau_1)G_{Sc}^{-1}(x_1,y_1)G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y_1,\tau_1;y_2,\tau_2)G_{Sc}^{-1}(x_2,y_2)\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x_2,\tau_2;x',\tau')\ ,\end{aligned} \tag{5.17}$$

où $\mathbf{G}_j^{\theta\theta}$ est la fonction de Green bosonique associée aux champs θ_j en présence d'écrantage, $G_j^{\theta\theta}$ et $G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}$ sont les fonctions de Green bosoniques, respectivement, du fil et de la pointe lorsque ces deux sous-systèmes sont découplés et $G_{Sc}^{-1}(x,y) = \partial_x\partial_y W(x,y)/(\pi\sqrt{2\pi})$.

La présence de δ_{jc} dans cette équation de Dyson permet une identification claire du secteur j dans le fil qui est affecté par l'écrantage causé par la pointe. Ainsi, les fonctions de Green bosoniques dans le secteur du spin ($j = s$) ne sont pas touchées. Elles sont donc égales à celles définies en l'absence d'écrantage. Les autres fonctions de Green bosoniques du fil sont obtenues en suivant la même procédure de calcul (voir Annexe D).

L'intégration sur les degrés de liberté du fil permet d'extraire l'équation de Dyson que vérifie la fonction de Green bosonique de la pointe en présence d'écrantage. Cette équation s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y,\tau;y',\tau') &= G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y,\tau;y',\tau') + \sum_j\delta_{jc}\int d\tau_1\int d\tau_2\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1\int_{-\infty}^{+\infty}dx_2\int_{-\infty}^{+\infty}dy_1\int_{-\infty}^{+\infty}dy_2 \\ &\times\ G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y,\tau;y_1,\tau_1)G_{Sc}^{-1}(x_1,y_1)\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2)G_{Sc}^{-1}(x_2,y_2)G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y_2,\tau_2;y',\tau')\ .\end{aligned} \tag{5.18}$$

D'autres fonctions de Green bosoniques, dites *mixtes*, sont également obtenues. Cette terminologie désigne les corrélateurs de champs de la pointe et du fil. Par exemple, la fonction $\mathbf{G}_{j\sigma'}^{\theta\varphi}(x,\tau;y',\tau') = \langle \mathrm{T}_\tau\{\theta_j(x,\tau)\varphi_{\sigma'}(y',\tau')\}\rangle$, est définie par :

$$\mathbf{G}_{j\sigma'}^{\theta\varphi}(x,\tau;y',\tau') = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\eta_{\theta_j}(x,\tau)\partial\eta_{\varphi_{\sigma'}}(y',\tau')}\ , \tag{5.19}$$

qui s'écrit :

$$\mathbf{G}_{j\sigma'}^{\theta\varphi}(x,\tau;y',\tau') = -\delta_{jc}\int d\tau_1\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1\int_{-\infty}^{+\infty}dy_1\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x,\tau;x_1,\tau_1)G_{Sc}^{-1}(x_1,y_1)G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y_1,\tau_1;y',\tau')\ . \tag{5.20}$$

L'existence de telles fonctions est une conséquence directe du couplage, par une interaction électrostatique, des sous-systèmes fil et pointe.

Il est important de remarquer que toutes ces équations de Dyson sont générales car leur obtention ne nécessite de spécifier ni l'expression des fonctions de Green en l'absence d'écrantage, ni la nature du potentiel W qui décrit l'interaction entre le fil quantique et la pointe de STM. Cela signifie qu'elles sont applicables à un fil quantique inhomogène (le paramètre d'interaction coulombienne K_c est une fonction de la position) comme à un conducteur unidimmensionnel de longueur infinie. Par ailleurs la transcription de ces équations à un système avec un nombre de degrés de liberté supérieurs, tel qu'un nanotube de carbone, est possible.

5.2.1 Choix de la forme du potentiel électrostatique

Le potentiel électrostatique induit par la proximité de la pointe de STM dépend de la géométrie du système. En particulier, son profil est une fonction de la distance entre fil et pointe, de la distance entre fil et grille et enfin de la forme de la pointe [181], [182]. Dans notre étude, la pointe est supposée agir comme une charge locale. La forme du potentiel électrostatique est alors obtenue par la méthode des charges images [183], [184]. La figure (5.2) montre comment modéliser le système décrit par le schéma (5.1), afin d'appliquer cette méthode.

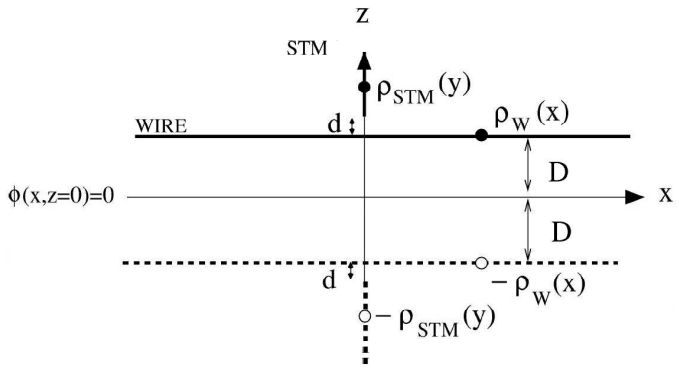


FIGURE 5.2 – *Modélisation du système : les sous-systèmes pointe et fil sont en trait plein et leurs équivalents virtuels sont en tiret.*

Le potentiel électrostatique s'écrit alors :

$$W(x,y) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{1}{\sqrt{x^2+(y+d)^2}} - \frac{1}{\sqrt{x^2+(y+d+2D)^2}}\right], \tag{5.21}$$

où ϵ_0 est la constante diélectrique dans le vide, d est la distance entre la pointe de STM et le fil quantique et D la distance séparant ce dernier de la grille.

La quantité apparaîssant dans les équations de Dyson (5.17), (5.18) et (5.20) est la

double dérivée du potentiel en x et en y et l'on remarque que cette quantité présente une décroissance très rapide, asymptotiquement en x^{-4} et en y^{-4}. Ce comportement décroissant exprime le fait que l'action principale du potentiel électrostatique se trouve centrée en $y = 0$ et en $x = 0$, là où les deux sous-systèmes sont les plus proches.

Ce constat légitime de traduire le comportement de la double dérivée du potentiel $\partial_x \partial_y W(x, y)$ par des pics de Dirac :

$$\partial_x \partial_y W(x, y) \quad = \quad W_0 \delta(y) \delta(x) \ , \tag{5.22}$$

où $W_0 \equiv e^2/(4\pi\epsilon_0 d)$ est la force associée au potentiel d'écrantage. On remarque qu'elle décroît lorsque la distance d augmente ou, autrement formulé, lorsque la pointe s'éloigne du fil. Il s'agit de l'expression qui sera injectée dans les équations de Dyson précedemment obtenues.

Les études des propriétés spectrales et de transport se portent sur un fil quantique dont la longueur est considérée comme infinie ($L \to \infty$).

5.2.2 Application aux équations de Dyson

L'introduction de la forme de $G_{Sc}^{-1}(x, y) = W_0 \frac{\delta(x)\delta(y)}{\pi\sqrt{2\pi}}$ dans les équations (5.17), (5.18) et (5.20) permet leurs résolutions exactes. En effet, la transformée de Fourier de l'expression (5.17), définie par $\mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x, x', \omega) = \int \mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x, x', \tilde{\tau}) \exp(i\omega\tilde{\tau}) d\tilde{\tau}/(2\pi)$, permet d'écrire, dans le formalisme de Matsubara :

$$\mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x, x', \omega) = G_c^{\theta\theta}(x, x', \omega) + \sum_{\sigma'} \frac{W_0^2}{2\pi^3} G_c^{\theta\theta}(x, 0, \omega) G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(0, 0, \omega) \mathbf{G}_c^{\theta\theta}(0, x', \omega) \ . \tag{5.23}$$

Ainsi, en remplaçant les fonctions de Green bosoniques en l'absence d'écrantage dans un fil quantique de longueur infinie (cf. Annexe E), l'équation de Dyson précédente devient :

$$\mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x, x', \omega) \quad = \quad G_c^{\theta\theta}(x, x', \omega) + \frac{K_c \omega_{Sc}}{2|\omega|(\omega^2 - \omega_{Sc}^2)} e^{-K_c|\omega| \frac{|x|+|x'|}{v_F}} \ , \tag{5.24}$$

où $\omega_{Sc} \equiv (W_0/\pi)\sqrt{K_c/2}$ est la fréquence associée à l'écrantage, qui dépend explicitement des interactions coulombiennes dans le fil quantique.

La transformée de Fourier inverse de cette fonction de Green permet de l'obtenir en temps dans le formalisme Matsubara. Cependant, les propriétés physiques mesurables dépendent, comme cela a été montré au chapitre 3, des fonctions de Green Keldysh. Aussi, suite à un prolongement analytique $\tilde{\tau} \to i\tilde{t} + \tau_0$ avec $\tau_0 = a/v_F$, la fonction de

Green bosonique s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_c^{\theta\theta,-+}(x,x',\tilde{t}) &= G_c^{\theta\theta,-+}(x,x',\tilde{t}) + \frac{K_c}{8\pi}\sum_r \Bigg[2i\pi r\cosh\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \\ &+ 2\ln\left(\chi_r\right) - e^{\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\chi_r\right) - e^{-\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\chi_r\right)\Bigg] , \quad (5.25)\end{aligned}$$

où $\chi_r \equiv -r\tilde{t} - K_c(|x|+|x'|)/v_F + iar/v_F$ et Ei est la fonction exponentielle intégrale.

La définition des fonctions de Green Keldysh, que nous utilisons, nécessitent une dernière étape de calcul :

$$\mathbf{G}_j^{\theta\theta,\eta\eta'}(x,x',\tilde{t}) \rightarrow \mathbf{G}_j^{\theta\theta,\eta\eta'}(x,x',\tilde{t}) - \frac{1}{2}\mathbf{G}_j^{\theta\theta,\eta\eta}(x,x,0) - \frac{1}{2}\mathbf{G}_j^{\theta\theta,\eta'\eta'}(x',x',0) , \quad (5.26)$$

où on rappelle que $\eta = \pm 1$ et $\eta' = \pm 1$ sont les indices Keldysh. En suivant la même procédure, les fonctions de Green Keldysh bosoniques de la pointe et mixtes s'écrivent :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi,-+}(0,0,\tilde{t}) &= G_{\sigma'}^{\varphi\varphi,-+}(0,0,\tilde{t}) + \frac{1}{4}\sum_r \Bigg[2\ln\left(-r\tilde{t} + ir\frac{a}{v_F}\right) \\ &- e^{\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_F}\right)}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_F}\right)\right) - e^{-\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_F}\right)}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_F}\right)\right)\Bigg] ,\end{aligned} \quad (5.27)$$

et

$$\mathbf{G}_{j\sigma'}^{\theta\varphi,-+}(0,0,\tilde{t}) = \frac{\delta_{jc}}{4}\sqrt{\frac{K_c}{2}}\mathrm{sgn}(i\tilde{t}+\tau_0)\sin(\omega_{Sc}(i\tilde{t}+\tau_0)) . \quad (5.28)$$

Le calcul et les expressions de toutes ces fonctions de Green bosoniques sont détaillés en Annexe F.

Il est très important de constater que, dans la limite où $K_c > 1/2$, ces résultats sont exacts puisqu'aucune supposition sur la force de l'écrantage n'a été faite.

5.3 Propriétés spectrales du fil quantique

5.3.1 Fonction spectrale en présence d'écrantage

La définition de la fonction spectrale est la suivante :

$$A_{r\sigma}(k,\Omega) \equiv -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left[\mathcal{G}_{r\sigma}^R(k,\Omega)\right] , \quad (5.29)$$

où $\mathcal{G}^R_{r\sigma}(k,\Omega)$ est la double transformée de Fourier de la fonction de Green retardée $\mathcal{G}^R_{r\sigma}(\tilde{x},\tilde{t})$ définie comme la moyenne de l'anticommutateur des champs fermioniques :

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^R_{r\sigma}(\tilde{x},\tilde{t}) &\equiv \mathcal{G}^R_{r\sigma}(x,t;x',t') \\ &= -i\Theta(t-t')\langle[\psi_{r\sigma}(x,t),\psi^\dagger_{r\sigma}(x',t')]_+\rangle \ .\end{aligned} \tag{5.30}$$

Grâce aux relations entre les fonctions de Green fermioniques Keldysh retardées et avancées (cf. Eq. (3.26)), cette expression devient :

$$A_{r\sigma}(k,\Omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left[\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(k,\Omega)-\mathcal{G}^{+-}_{r\sigma}(k,\Omega)\right] , \tag{5.31}$$

les fonctions $\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}$ et $\mathcal{G}^{+-}_{r\sigma}$ ayant été définies dans la section 3.2.2. Dans le cas d'un fil quantique homogène, la transformée de Fourier est faite sur les arguments $\tilde{t}=t-t'$ et $\tilde{x}=x-x'$, où les invariances par translations temporelle et spatiale sont utilisées.

Dans le système que nous étudions, le potentiel électrostatique agit en $x=0$, brisant l'invariance spatiale. Les fonctions de Green ne dépendent donc plus de la différence $(x-x')$ mais des deux positions. En introduisant l'équation (5.25) et les expressions des autres fonctions de Green bosoniques du fil dans la définition (3.30), il en découle l'expression de la fonctions de Green fermionique $\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{-+}_{r\sigma}(x,x';\tilde{t}) &= -i\frac{e^{irk_F(x-x')}}{2\pi^2 a}e^{F^r_0(x,x',\tilde{t})} \\ &\times\ e^{\sum_{r'}\frac{(K_c+rr'\mathrm{sgn}(x))(K_c-rr'\mathrm{sgn}(x'))}{16K_c}\left(F^{r'}_{Sc}(x,x',\tilde{t})-\frac{1}{2}F^{r'}_{Sc}(x,x,0)-\frac{1}{2}F^{r'}_{Sc}(x',x',0)\right)} \ .\end{aligned} \tag{5.32}$$

La fonction F^r_0 contient tous les termes provenant des fonctions de Green en l'absence d'écrantage [114], [115] :

$$F^r_0(x,x',\tilde{t}) = -\frac{1}{2}\sum_j \ln\left(1+i\omega_c\tilde{t}-irK_j\frac{(x-x')}{a}\right)-\sum_{r',j}\gamma_j\ln\left(1+i\omega_c\tilde{t}+ir'K_c\frac{(x-x')}{a}\right) , \tag{5.33}$$

où on rappelle que $\omega_c \equiv v_F/a$ est la fréquence de coupure et $\gamma_c \equiv (K_c+K_c^{-1}-2)/8$ est le paramètre non universel pour le secteur de la charge. En effet, l'invariance par rotation de spin implique que $\gamma_s=0$.

La fonction F^r_0 réunit les termes qui dépendent de $(x-x')$, obtenues à l'équation (3.33), là où l'invariance spatiale s'appliquait.

La fonction $F_{Sc}^{r'}$ est définie comme suit :

$$\begin{aligned} F_{Sc}^{r'}(x,x',\tilde{t}) &= 2i\pi r' \cosh\left(\omega_{Sc}\chi_{r'}\right) + 2\ln\left(\chi_{r'}\right) \\ &- e^{\omega_{Sc}\chi_{r'}}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\chi_{r'}\right) - e^{-\omega_{Sc}\chi_{r'}}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\chi_{r'}\right) \ . \end{aligned} \tag{5.34}$$

A travers $\chi_{r'} \equiv -r'\tilde{t} - K_c(|x| + |x'|)/v_F + iar'/v_F$, on voit clairement que la fonction de Green fermionique dépend de $\tilde{x} = (x - x')$ et de $\tilde{X} = \frac{(x+x')}{2}$. La figure (5.3) représente la fonction $\mathcal{G}_{r\sigma}^{-+}(\tilde{x},\tilde{X};\tilde{t})$ en fonction de la distance $\tilde{x}$ et du baricentre $\tilde{X}$.

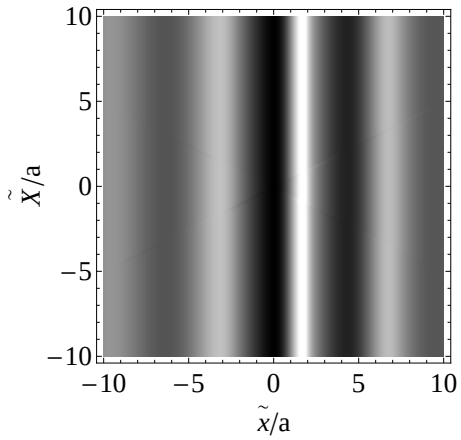


FIGURE 5.3 – *Projection de la partie réelle de la fonction de Green fermionique $\mathcal{G}_{+,\sigma}^{-+}$ en fonction de $\tilde{x}/a$ et de $\tilde{X}/a$ pour une valeur fixée de $\omega_c\tilde{t}$, avec $K_c = 0.2$ et $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.005$. La partie imaginaire de cette fonction possède un comportement similaire.*

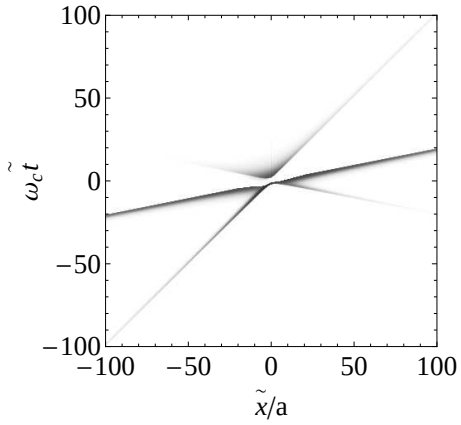


FIGURE 5.4 – *Projection de la partie réelle de la fonction de Green fermionique $\mathcal{G}_{+,\sigma}^{-+}$ en fonction de $\tilde{x}/a$ et de $\omega_c\tilde{t}$, pour $K_c = 0.2$ et $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.005$. Sur ce graphe, la dépendance en $\tilde{X}$ a été négligée. La partie imaginaire de cette fonction possède un comportement similaire.*

La structure en bandes représentée sur le graphe (5.3) met en évidence la dépendance très faible en $\tilde{X}$ mais très importante en $\tilde{x}$ dans son comportement. En première approximation, il est donc possible de négliger la dépendance en $\tilde{X}$. Ce choix légitime

permet alors de considérer une fonction spectrale ne dépendant que d'une variable en moment k, y compris en présence d'écrantage. En d'autres termes, la définition (5.31) reste valide. Ainsi,

$$A_{r\sigma}(k,\Omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} e^{i\Omega\tilde{t}-ik\tilde{x}}\left(\mathcal{G}_{r\sigma}^{-+}(\tilde{x},\tilde{t})-\mathcal{G}_{r\sigma}^{+-}(\tilde{x},\tilde{t})\right)\right] , \tag{5.35}$$

où

$$\mathcal{G}_{r\sigma}^{-+}(\tilde{x},\tilde{t}) = -i\frac{e^{irk_F\tilde{x}}}{2\pi^2 a} e^{\tilde{F}_0^r(x,x',\tilde{t})+\sum_{r'}\frac{(K_c+rr'\mathrm{sgn}(x))(K_c-rr'\mathrm{sgn}(x'))}{16K_c}\left(\tilde{F}_{Sc}^{r'}(x,x',\tilde{t})-\frac{1}{2}\tilde{F}_{Sc}^{r'}(x,x,0)-\frac{1}{2}\tilde{F}_{Sc}^{r'}(x',x',0)\right)} , \tag{5.36}$$

avec

$$\tilde{F}_0^r(\tilde{x},\tilde{t}) = -\frac{1}{2}\sum_j \ln\left(1+i\omega_c\tilde{t}-irK_j\frac{\tilde{x}}{a}\right)-\sum_{r',j}\gamma_j\ln\left(1+i\omega_c\tilde{t}+ir'K_c\frac{\tilde{x}}{a}\right) , \tag{5.37}$$

et

$$\begin{aligned}\tilde{F}^{r'}(\tilde{x},\tilde{t}) &= 2i\pi r'\cosh\left(\omega_{Sc}\tilde{\chi}_{r'}\right)+2\ln\left(\tilde{\chi}_{r'}\right)\\ &- e^{\omega_{Sc}\tilde{\chi}_{r'}}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\tilde{\chi}_{r'}\right)-e^{-\omega_{Sc}\tilde{\chi}_{r'}}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\tilde{\chi}_{r'}\right) .\end{aligned} \tag{5.38}$$

avec $\tilde{\chi}_{r'} \equiv -r'\tilde{t}-K_c|\tilde{x}|/v_F+iar'/v_F$.

La figure (5.4) montre le comportement de cette fonction de Green fermionique en fonction de $\tilde{x}$ et de $\tilde{t}$ et l'on remarque que les principales contributions du poids spectral viennent des lignes définies par $\omega_c\tilde{t} = \tilde{x}/a$, $\omega_c\tilde{t} = K_c\tilde{x}/a$ et $\omega_c\tilde{t} = -K_c\tilde{x}/a$. Ces valeurs annulent les parties imaginaires dans les logarithmes de la fonction $\tilde{F}_0^r$, la double intégrale de l'équation (5.35) se réduit alors à une seule.

A partir des contributions identifiées sur le graphe (5.4), il est possible de réécrire la fonction spectrale en trois termes :

$$A_{1,r\sigma}(k,\Omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t} e^{i(\Omega-ikv_F)\tilde{t}}\left(\mathcal{G}_{r\sigma}^{-+}(v_F\tilde{t},\tilde{t})-\mathcal{G}_{r\sigma}^{+-}(v_F\tilde{t},\tilde{t})\right)\right] , \tag{5.39}$$

$$A_{2,r\sigma}(k,\Omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t} e^{i(\Omega-ikv_c)\tilde{t}}\left(\mathcal{G}_{r\sigma}^{-+}(v_c\tilde{t},\tilde{t})-\mathcal{G}_{r\sigma}^{+-}(v_c\tilde{t},\tilde{t})\right)\right] , \tag{5.40}$$

$$A_{3,r\sigma}(k,\Omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Im}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t} e^{i(\Omega+ikv_c)\tilde{t}}\left(\mathcal{G}_{r\sigma}^{-+}(-v_c\tilde{t},\tilde{t})-\mathcal{G}_{r\sigma}^{+-}(-v_c\tilde{t},\tilde{t})\right)\right] . \tag{5.41}$$

Cette simplification permet alors le calcul numérique de la fonction spectrale en présence et en l'absence d'écrantage. Cependant, il est important de noter que les res-

trictions sur les fréquences jouent un rôle important dans l'intégration et sont à prendre en compte.

Analyse des résultats

La séparation spin-charge à travers le comportement de la fonction spectrale a déjà été présentée dans la section 3.3.2 et a été l'objet d'articles de revue [114], [115].

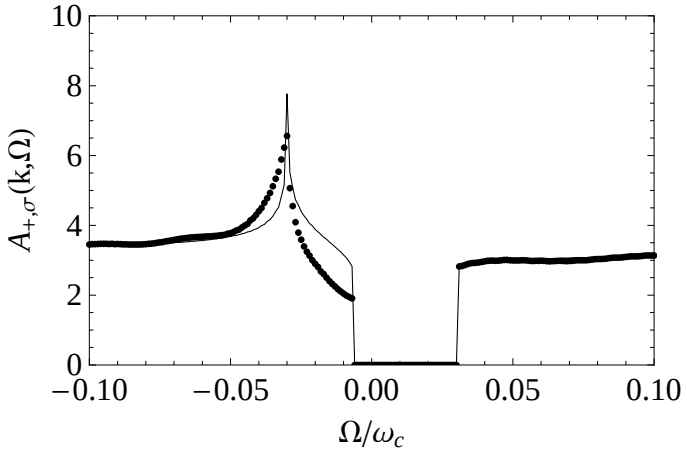


FIGURE 5.5 – *Fonction spectrale pour de fortes interactions coulombiennes ($K_c = 0.2$) avec $a(k - k_F) = 0.006$ en l'absence (trait plein) et en présence d'écrantage (point) avec $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.005$.*

La figure (5.5) présente une comparaison des comportements de $A_{r\sigma}$ en présence et en l'absence d'écrantage. Lorsque la pointe est suffisamment loin du fil pour ne causer aucun écrantage, on retrouve le comportement de la fonction spectrale d'un fil quantique de longueur infinie représenté par une des coupes du graphe (3.6). Les principaux poids spectraux se trouvent aux singularités $\Omega = \pm v_c(k - K_F)$, correspondant à la présence de holons (excitations de charge), et $\Omega = v_F(k - K_F)$, traduisant la présence de spinons (excitations de spin) dans le fil quantique. On rappelle que la levée de dégénérescence de ces singularités rend compte des phénomènes de séparation spin-charge dans les systèmes unidimensionnels.

Lorsque la pointe est légèrement approchée du fil (faible écrantage), la fonction spectrale, aux fréquences positives, se trouve inchangée. En revanche, aux fréquences négatives, son comportement est affecté par la proximité de la pointe. Plus précisemment, les positions des singularités $\Omega = -v_F(k - k_F)$ et $\Omega = -v_c(k - k_F)$ correspondant à la présence, respectivement de spinons et de holons, sont inchangées par rapport à la situation où pointe et fil sont des sous-systèmes découplés. Par contre, les lois de puissances régissant le comportement de ces singularités sont modifiées.

Ceci s'explique par le fait que les lois de puissance associées à chacun des secteurs de charge et de spin dépendent du paramètre d'interaction coulombienne K_c, qui représente le secteur de charge, le seul affecté par le potentiel d'écrantage.

Notons que pour de faibles interactions coulombiennes, notamment pour $K_c > 1/2$, sujet de notre étude, la convergence numérique devient très difficile à obtenir, ce qui n'est pas le cas dans l'étude de la densité d'états.

5.3.2 Densité d'états

Un moyen de déterminer les effets de l'écrantage causé par la pointe de STM dans la structure électronique du fil quantique est de s'intéresser à la densité d'états. Plus précisemment, même si le potentiel électrostatique est local, il n'est pas assuré que ses effets le soient. L'invariance spatiale étant perdue dans le système étudié, nous nous intéressons aux déviations du comportement en loi de puissance des densités d'états tunnel, c'est-à-dire directement sous la pointe en $x = 0$, et locale, soit en $x \neq 0$.

Sans spécifier la position le long du fil, elle est définie par :

$$\rho_{r\sigma}(x,\Omega) \equiv -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left[\mathcal{G}^R_{r\sigma}(x,x;\Omega)\right], \tag{5.42}$$

où

$$\mathcal{G}^R_{r\sigma}(x,x;\Omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t} e^{i\Omega\tilde{t}} \mathcal{G}^R_{r\sigma}(x,x;\tilde{t}). \tag{5.43}$$

Une fois les fonctions de Green bosoniques injectées dans cette expression, celle-ci s'écrit :

$$\begin{aligned}\rho_{r\sigma}(x,\Omega) &= \frac{1}{4\pi^2 a}\mathrm{Re}\Big[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t} e^{i\Omega\tilde{t}} \\ &\times \Big(e^{\frac{\pi}{2}\sum_j \mathbf{G}_j^{\phi\phi,-+}(x,x,\tilde{t})+\frac{\pi}{2}\sum_j \mathbf{G}_j^{\theta\theta,-+}(x,x,\tilde{t})+\frac{\pi}{2}\sum_j r\mathbf{G}_j^{\phi\theta,-+}(x,x,\tilde{t})+\frac{\pi}{2}\sum_j r\mathbf{G}_j^{\theta\phi,-+}(x,x,\tilde{t})} \\ &+e^{\frac{\pi}{2}\sum_j \mathbf{G}_j^{\phi\phi,+-}(x,x,\tilde{t})+\frac{\pi}{2}\sum_j \mathbf{G}_j^{\theta\theta,+-}(x,x,\tilde{t})+\frac{\pi}{2}\sum_j r\mathbf{G}_j^{\phi\theta,+-}(x,x,\tilde{t})+\frac{\pi}{2}\sum_j r\mathbf{G}_j^{\theta\phi,+-}(x,x,\tilde{t})}\Big)\Big].\end{aligned} \tag{5.44}$$

Densité d'états tunnel

La densité d'états tunnel est définie au point $x = 0$. En introduisant les expressions des fonctions de Green bosoniques dans l'équation (5.44), celle-ci devient :

$$\rho_{r\sigma}(0,\Omega) = \frac{1}{\pi^2 a}\int_0^{+\infty} d\tilde{t}\cos(\Omega\tilde{t})\mathrm{Re}\left[e^{-\nu\ln(1+i\omega_c\tilde{t})+\frac{K_c}{8}f_{Sc}(\tilde{t})}\right], \tag{5.45}$$

où ν est le paramètre non universel défini par $\nu \equiv 2\gamma_c + 1 = (K_c + K_c^{-1} + 2)/4$, et f_{Sc}

est la fonction correspondant aux contributions dues à l'écrantage :

$$\begin{aligned} f_{Sc}(\tilde{t}) &= -e^{\omega_{Sc}\tilde{t}-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}} Ei\left(-\omega_{Sc}\tilde{t}+i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right) - e^{-\omega_{Sc}\tilde{t}+i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}} Ei\left(\omega_{Sc}\tilde{t}-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right) \\ &+ 2\ln(1+i\omega_c\tilde{t}) + e^{-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}} Ei\left(i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right) + e^{i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}} Ei\left(-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right) . \end{aligned} \tag{5.46}$$

Tout d'abord, considérant une pointe non magnétique, l'expression de la densité d'états tunnel ne dépend pas de l'indice σ', ni d'ailleurs de la chiralité r à cause de la symétrie des bandes d'énergie. Notons que ces constats sont indépendants de la présence d'un potentiel électrostatique, comme cela a été montré à la section 3.2.1.

Une remarque s'impose quant à l'expression du paramètre ν. Celui-ci correspond à une géométrie du système où l'effet tunnel se fait dans le cœur du conducteur unidimensionnel. Les termes logarithmiques présents dans l'exponentielle de l'équation (5.45) peuvent être factorisés, faisant apparaître un nouveau paramètre $\tilde{\nu} = (K_c^{-1}+2)/4$.

Dans le cas d'une géométrie où l'effet tunnel se produit aux bords du système unidimensionnel, le facteur non universel est $(K_c^{-1}+1)/2$. En comparant les exposants issus des deux géométries, on remarque qu'un des effets de l'écrantage est de suprimer la contribution de l'effet tunnel dans le cœur du système unidimensionnel.

En toute rigueur, il faut spécifier que le facteur $\tilde{\nu}$ ne correspond pas tout à fait à celui issu d'une géométrie d'effet tunnel aux bords car nous obtenons $\tilde{\nu} = (2K_c^{-1}+2)/4$ et non $(K_c^{-1}+1)/2$. Mais, cela permet d'avoir une première intuition sur les conséquences des effets de l'écrantage causé par la pointe.

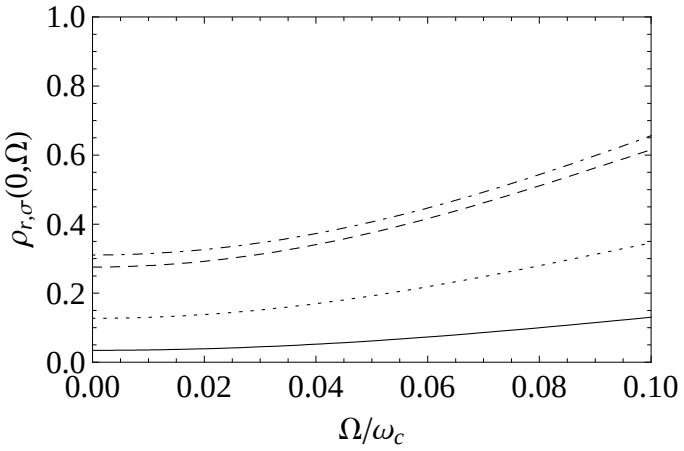


FIGURE 5.6 – *Densité d'états tunnel en fonction de la fréquence et en présence d'un fort écrantage ($\omega_{Sc}/\omega_c = 0.1$) pour différentes valeurs du paramètre d'interaction coulombienne : $K_c = 0.2$ (trait plein), $K_c = 0.3$ (pointillé), $K_c = 0.5$ (tiret) et $K_c = 0.8$ (tiret-pointillé).*

La figure (5.6) montre le comportement de la densité d'états tunnel en présence d'un

fort écrantage en fonction du paramètre d'interaction coulombienne. Le rapport ω_{Sc}/ω_c peut se traduire en termes de la distance entre fil et pointe : $d/a \approx (\sqrt{K_c}/2)/(\omega_{Sc}/\omega_c)$. Ainsi, la densité d'états tunnel (TDOS) est ici étudiée lorsque la pointe est très proche du fil. A basse fréquence et pour de fortes interactions coulombiennes ($K_c < 0.5$), elle présente des valeurs plus grande que dans le cas sans écrantage (cf. Fig. (3.3)). Cela signifie que les effets de l'écrantage se manifestent par la réduction des effets des interactions coulombiennes.

Lorsque les interactions coulombiennes sont faibles ($K_c \gtrsim 0.5$), les valeurs de la densité d'états tunnel sont fortement réduites et son comportement devient très faiblement dépendant des interactions. Ainsi, dans ce régime, les effets des interactions coulombiennes sont masqués par les effets de l'écrantage causé par la pointe.

Densité d'états locale

La densité d'états locale, qui donne accès au nombre moyen d'états moyen accessible en $x \neq 0$, s'écrit :

$$\rho_{r\sigma}(x,\Omega) = \frac{1}{\pi^2 a}\int_0^{+\infty} d\tilde{t}\cos(\Omega\tilde{t})\mathrm{Re}\left[e^{-\nu\ln(1+i\omega_c\tilde{t})+\frac{K_c^2-1}{16K_c}\sum_{r'}[f_{Sc}^{r'}(x,\tilde{t})-f_{Sc}^{r'}(x,0)]}\right], \tag{5.47}$$

où

$$\begin{aligned} f_{Sc}^{r'}(x,\tilde{t}) &= 2i\pi r'\cosh(\omega_{Sc}\kappa_{r'}) + 2\ln(\kappa_{r'}) \\ &- e^{\omega_{Sc}\kappa_{r'}}\mathrm{Ei}(-\omega_{Sc}\kappa_{r'}) - e^{-\omega_{Sc}\kappa_{r'}}\mathrm{Ei}(\omega_{Sc}\kappa_{r'}) , \end{aligned} \tag{5.48}$$

avec $\kappa_{r'} \equiv -r'\tilde{t} - 2K_c|x|/v_F + iar'/v_F$.

La symétrie du système impose à la densité d'états locale d'être paire en fonction de la position x, c'est pourquoi elle n'est étudiée que pour des valeurs de x/a positives.

Avant de commencer l'analyse, nous remarquons qu'en l'absence d'interactions ($K_c = 1$), le terme d'écrantage disparaît. Ainsi, dans un métal normal, l'écrantage n'affecte que localement, ici en $x = 0$, la densité d'états. Le long d'un tel système ($x \neq 0$), son comportement est identique à celui dans un fil sans interaction et ne subissant aucun écrantage. En d'autres termes, la densité d'états n'est affectée par la proximité de la pointe qu'en présence d'interaction coulombienne qui *étalent* l'écrantage le long du fil.

Sur les graphes (5.7) et (5.8), le comportement de la densité d'états locale est normalisé par son expression en l'absence d'écrantage. Son obtention nécessite de prendre la

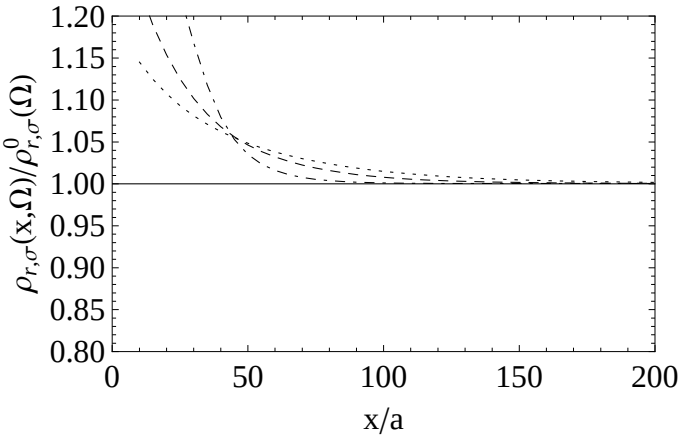


FIGURE 5.7 – *Densité d'états locale normalisée en fonction de la position x/a le long du fil pour $K_c = 0.8$ et $\Omega/\omega_c = 0.01$ pour différentes valeurs de la distance entre pointe et fil : $d/a = 30$ (pointillé), $d/a = 20$ (tiret) et $d/a = 10$ (pointillé-tiret).*

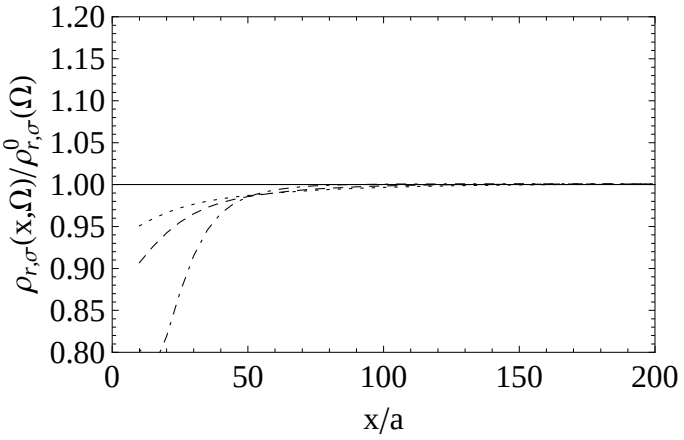


FIGURE 5.8 – *Densité d'états locale normalisée en fonction de la position x/a le long du fil pour $K_c = 0.8$ et $\Omega/\omega_c = 0.05$ pour différentes valeurs de la distance entre pointe et fil : $d/a = 30$ (pointillé), $d/a = 20$ (tiret) et $d/a = 10$ (pointillé-tiret).*

limite $\omega_{Sc} \to 0$ et l'on obtient (cf. Sec. 3.3.1) :

$$\rho^0_{r\sigma}(\Omega) \quad = \quad \frac{e^{-|\Omega|/\omega_c}}{2\pi v_{\mathrm{F}} \boldsymbol{\Gamma}(\nu)} \left| \frac{\Omega}{\omega_c} \right|^{\nu-1} \tag{5.49}$$

De plus, afin de satisfaire à la condition de validité du modèle $x \gg a = \lambda_F$, avec λ_F la longueur d'onde de Fermi, la densité d'états locale est représentée pour des positions telles que $(x/a) > 10$.

A très basse fréquence, ses valeurs sont supérieures à celles obtenues en l'absence d'écrantage et décroissent avec la distance (cf. Fig. (5.7)). Au contraire, à des fréquences plus grande, ses valeurs sont plus faibles mais augmentent vers la limite sans écrantage quand on s'éloigne de la position de la pointe (cf. Fig. (5.8)).

Cette croissance ou cette décroissance de la densité d'états locale normalisée en fonction de (x/a) dépend également de la distance entre la pointe et le fil. Par exemple, si l'on regarde en un point du fil très près de la position de la pointe, on observe clairement que la déviation du comportement de la densité d'états locale est plus importante lorsque la distance entre fil et pointe est faible. De manière réciproque, la diminution de ses valeurs est moins conséquente lorsque la distance pointe-fil est grande. En revanche, et ce peu importe la proximité de la pointe, les effets de l'écrantage qu'elle provoque tendent à disparaître lorsqu'on s'éloigne du point $x = 0$. L'extension spatiale des déviations du comportement de la densité d'états locale est fonction de la fréquence Ω, du paramètre d'interaction coulombienne K_c ainsi que de la distance pointe-fil d.

Pour mieux comprendre ce phénomène, la densité d'états locale normalisée est, cette fois, regardée en fonction de la distance entre la pointe et le fil pour différentes valeurs de la position le long du fil.

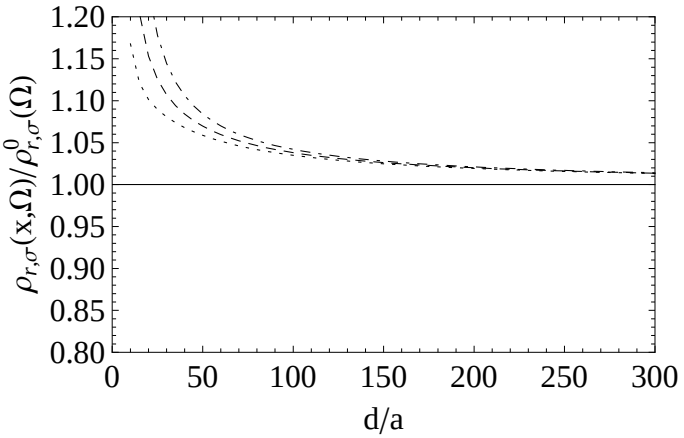


FIGURE 5.9 – *Densité d'états locale normalisée en fonction de la distance d/a pour $K_c = 0.8$ et $\Omega/\omega_c = 0.01$ pour différentes valeurs de la position le long du fil : $x/a = 30$ (pointillé), $x/a = 20$ (tiret) et $x/a = 10$ (pointillé-tiret).*

Les figures (5.9) et (5.10) montrent que les déviations du comportement de la densité d'états locale par rapport aux valeurs en l'absence d'écrantage sont plus grandes lorsque la distance d diminue. De plus, on observe une convergence vers les valeurs en l'absence d'écrantage lorsque la pointe s'éloigne. Enfin, on retrouve, comme sur les figures (5.7) et (5.8), des valeurs de la densité d'états locale normalisée plus grande que 1 pour des fréquences très basses et plus faible que 1 pour des fréquences supérieures.

Finalement, l'approche de la pointe vers le fil quantique provoque une déviation du comportement de la densité d'états locale normalisée dont l'extension spatiale dépend cette fois du paramètre d'interaction coulombienne, de la fréquence et de la position le

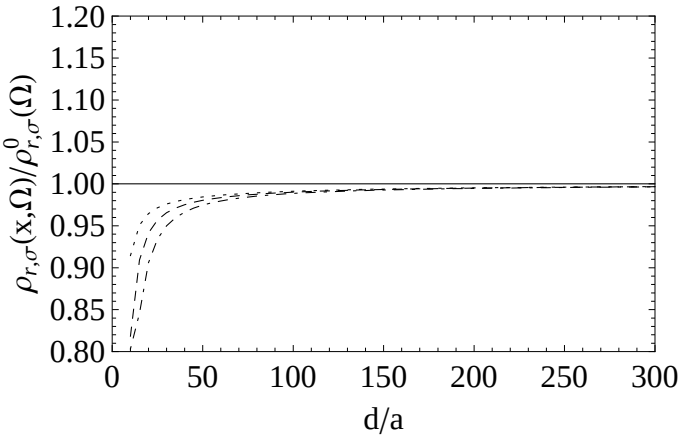


FIGURE 5.10 – *Densité d'états locale normalisée en fonction de la distance d/a pour $K_c = 0.8$ et $\Omega/\omega_c = 0.05$ pour différentes valeurs de la position le long du fil : $x/a = 30$ (pointillé), $x/a = 20$ (tiret) et $x/a = 10$ (pointillé-tiret).*

long du fil.

L'analyse spectrale des propriétés électroniques du fil quantique en présence d'écrantage a donc été mené via l'utilisation de deux quantités physiques : la fonction spectrale qui a nécessité une approximation sur sa dépendance spatiale et la densité d'états.

Plus précisement, à travers les changements de comportement de la densité d'états tunnel, les effets d'écrantage ont été mis en correspondance avec les dépendances en fréquence et en K_c le paramètre d'interaction coulombienne. Ainsi, lorsque celles-ci sont importantes (resp. faible), la TDOS augmente (resp. diminue) montrant que les effets de l'écrantage masquent les effets coulombiens pour K_c grand ou les diminuent pour K_c petit.

La densité d'états locale, qui en l'absence d'écrantage ne dépend pas de la position le long du fil, présente un comportement fortement dépendant de la position x ainsi que de la distance entre la pointe et le fil. Cependant, c'est par la présence d'interactions coulombiennes que ces déviations de comportement sont révélées. Il s'agit là d'une conséquence de l'action locale du potentiel électrostatique. Il a été montré que l'extension spatiale de la LDOS est reliée au paramètre d'interaction coulombienne K_c ainsi qu'à l'intensité du potentiel d'écrantage [185].

Pour compléter l'étude, nous nous intéressons aux propriétés hors équilibre et plus précisement au transport tunnel.

5.4 Propriétés de transport du fil quantique

Dans le chapitre précédent, nous nous sommes intéressés aux propriétés de transport d'un nanotube de carbone. La pointe de STM est alors utilisée pour injecter des électrons, par effet tunnel, au cœur de ce conducteur unidimensionnel.

Lorsque celui-ci est de longueur infinie, les comportements du bruit à fréquence nulle et du courant moyen ont révélé la présence d'excitations circulant à travers le conducteur et portant une charge anormale $e(K_c^2+1)/2$.

Avec l'ajout des électrodes, de nouveaux phénomènes sont apparus, explicable par les réflexions se produisant aux contacts. Par exemple, le changement de comportement en loi de puissance du bruit en une fonction linéaire de la tension appliquée à la pointe de STM se comprend par la dépendance des propriétés de transport par rapport à la longueur du nanotube de carbone [162]. La présence des contacts a également un impact sur le bruit à fréquence finie non symétrisé dont le comportement présente des pics de résonance qui traduisent la transmission et/ou la réflexion des excitations dans les réservoirs.

Jusqu'alors, le problème de la proximité entre la pointe, qui injecte les électrons, et le système unidimensionnel, qui les reçoit, n'a pas été considéré.

Cette section est donc dévolue à l'étude des conséquences de l'écrantage sur les propriétés de transport tunnel d'un fil quantique de longueur infinie [186]. Dans ce but, une tension est appliquée au STM, provoquant l'injection depuis la pointe d'électrons dans le fil (cf. Fig. (5.11)).

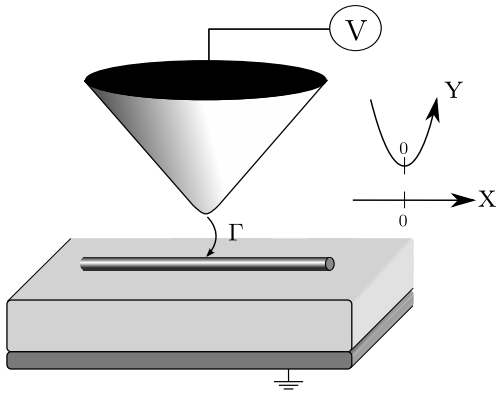


Figure 5.11 – *Injection d'électrons par effet tunnel dans le fil quantique depuis la pointe de STM. V est la tension appliquée à la pointe et* Γ *est l'amplitude tunnel.*

Ainsi, aux hamiltoniens de la pointe, du fil et de l'écrantage, il faut ajouter le hamiltonien tunnel afin de décrire entièrement le système. Celui-ci a déjà été défini à la

section 4.2.1 et s'écrit :

$$\mathrm{H_T} = \sum_{r=\pm,\sigma=\pm} \left[\Gamma(t)\psi^\dagger_{r\sigma}(0,t)c_\sigma(0,t) + \Gamma^*(t)c^\dagger_\sigma(0,t)\psi_{r\sigma}(0,t) \right] , \tag{5.50}$$

où l'on rappelle que $\Gamma(t) = \Gamma \exp(ieVt/\hbar)$ est l'amplitude tunnel qui permet de prendre en compte la tension appliquée au STM.

5.4.1 Courant tunnel

Le courant tunnel moyen est défini, dans le formalisme Keldysh, par :

$$\langle I_T \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\eta=\pm} \langle \mathrm{T}_K \{ I_T(t^\eta) e^{-i\int_K dt_1 \mathrm{H_T}(t_1)} \} \rangle , \tag{5.51}$$

où T_K indique l'ordre temporel sur le contour Keldysh [26], η est l'indice de la position du temps sur celui-ci et $\int_K dt_1 \equiv \sum_{\eta_1=\pm} \int dt_1^{\eta_1}$. L'opérateur de courant tunnel s'écrit :

$$I_T(t) = ie \sum_{r\sigma} \left(\Gamma(t)\psi^\dagger_{r\sigma}(0,t)c_\sigma(0,t) - \Gamma^*(t)c^\dagger_\sigma(0,t)\psi_{r\sigma}(0,t) \right) . \tag{5.52}$$

Il est nécessaire d'aller au second ordre du développement perturbatif en Γ pour obtenir une contribution pertinente du courant tunnel moyen, laquelle fait intervenir les fonctions de Green bosoniques en présence d'écrantage, via :

$$\begin{aligned} \langle I_T \rangle = & \frac{ie\Gamma^2}{(2\pi a)^2} \sum_{r,\sigma,\eta,\eta_1} \eta_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t} \sin\left(\frac{eV\tilde{t}}{\hbar}\right) e^{\mathbf{G}_\sigma^{\varphi\varphi,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t})} \\ \times & \; e^{\frac{\pi}{2}\sum_j \left(\mathbf{G}_j^{\phi\phi,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) + \mathbf{G}_j^{\theta\theta,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) + r\mathbf{G}_j^{\phi\theta,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) + r\mathbf{G}_j^{\theta\phi,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) \right)} \\ \times & \; e^{-\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\mathbf{G}_{c\sigma}^{\phi\varphi,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) + r\mathbf{G}_{c\sigma}^{\theta\varphi,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) + \mathbf{G}_{c\sigma}^{\varphi\phi,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) + r\mathbf{G}_{c\sigma}^{\varphi\theta,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t}) \right)} , \end{aligned} \tag{5.53}$$

où $\tilde{t} \equiv t - t_1$.

L'équation (5.53) diffère de celle obtenue en l'absence d'écrantage [14] (cf. Eq. (4.15) pour un nanotube de carbone) principalement par la présence des fonctions de Green mixtes. En effet, lorsque les sous-systèmes, pointe de STM et fil quantique, sont découplés, le courant moyen tunnel est proportionnel au produit des densité d'états de chaque sous-système. Ce n'est plus le cas dorénavant. Notons que, si les fonctions de Green mixtes apparaissent ici et affectent le transport, par leur présence, elles n'ont aucune influence sur les propriétés spectrales du fil, les définitions de la fonction spectrale et de la densité d'états ne faisant intervenir que les champs bosoniques du fil quantique. Au contraire, dans une situation de transport, les champs bosoniques du fil et de la pointe sont présents et mixés par le hamiltonien tunnel $\mathrm{H_T}$ qui décrit le transfert d'électrons entre les deux sous-systèmes.

Une fois que les expressions des fonctions de Green bosoniques du fil, de la pointe et mixtes, calculées en Annexe F, sont introduites dans l'équation (5.53), le courant tunnel moyen s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle I_T\rangle &= -\frac{2e\Gamma^2}{(\pi a)^2}\int_0^{+\infty} d\tilde{t}\sin(eV\tilde{t})\cosh\left(\frac{\sqrt{\pi K_c}}{4}\mathrm{sgn}(1+i\omega_c\tilde{t})\sin\left(\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}(1+i\omega_c\tilde{t})\right)\right)\\ &\times \mathrm{Im}\left[e^{-(\nu+1)\ln(1+i\omega_c\tilde{t})+\left(\frac{K_c}{8}+\frac{1}{2}\right)f_{Sc}(\tilde{t})}\right], \qquad (5.54)\end{aligned}$$

où $\nu = (K_c + K_c^{-1} + 2)/4$ et

$$\begin{aligned}f_{Sc}(\tilde{t}) &= -e^{w_{Sc}\tilde{t}-i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(-w_{Sc}\tilde{t}+i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}\right) - e^{-w_{Sc}\tilde{t}+i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(w_{Sc}\tilde{t}-i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}\right)\\ &+ 2\ln(1+i\omega_c\tilde{t}) + e^{-i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}\right) + e^{i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(-i\frac{w_{Sc}}{\omega_c}\right). \qquad (5.55)\end{aligned}$$

La somme sur l'indice de spin σ' a été effectuée, car la pointe de STM est supposée non magnétique.

Analyse des résultats

Les figures (5.12) et (5.13) présentent le comportement du courant moyen tunnel en fonction de la tension appliquée à la pointe pour différentes valeurs du paramètre d'interaction coulombienne.

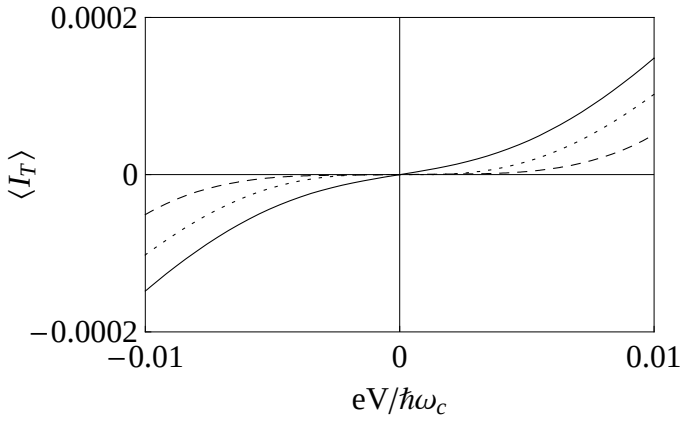


FIGURE 5.12 – *Courant tunnel moyen en fonction de la tension appliquée à la pointe pour $K_c = 0.2$, en l'absence d'écrantage (trait plein), pour un écrantage faible $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.001$ (pointillé) et pour un écrantage plus fort $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.002$ (tiret) en unité de $e\Gamma^2/(av_F\hbar^2\pi^3)$.*

Il est intéressant de constater que, en présence de fortes interactions coulombiennes et en l'absence d'écrantage, la courbe I-V suit un comportement en loi de puissance

dont l'exposant est ν. Lorsque la pointe se rapproche du fil, la caractéristique I-V est modifiée. Cette tendance s'accentue avec l'augmentation de l'écrantage.

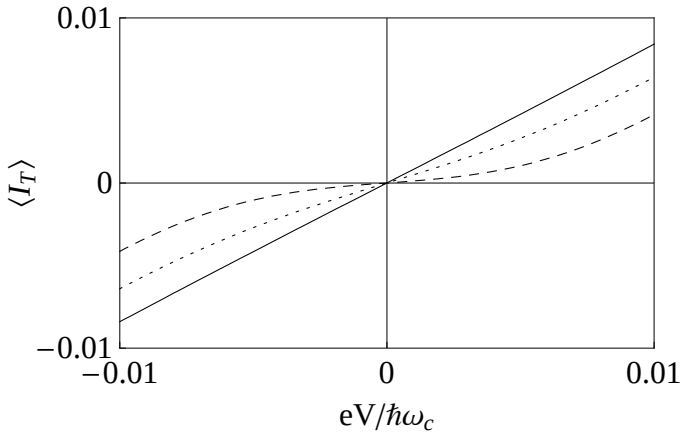


FIGURE 5.13 – *Courant tunnel moyen en fonction de la tension appliquée à la pointe pour* $K_c = 0.7$, *en l'absence d'écrantage (trait plein), pour un écrantage faible* $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.001$ *(pointillé) et pour un écrantage plus fort* $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.002$ *(tiret) en unité de* $e\Gamma^2/(av_F\hbar^2\pi^3)$.

En présence de faibles interactions coulombiennes, la caractéristique I-V est linéaire en l'absence d'écrantage. La forme de l'exposant ν qui contrôle la loi de puissance permet de le comprendre. On observe alors, lorsque la pointe s'approche du fil, un changement du profil du courant tunnel lorsque les effets de l'écrantage sont encore plus importants. Ceci peut se comprendre à travers la définition du paramètre non universel ν. En effet, il est une fonction du paramètre K_c représentant les interactions dans le secteur de charge. Or il s'agit du même secteur affecté par la proximité de la pointe.

Ce constat permet l'interprétation suivante : les interactions électrostatiques, conséquences de la proximité entre la pointe de STM et le fil quantique, jouent un rôle similaire à celui des interactions coulombiennes dans le fil. En effet, chacune de ces interactions change le comportement linéaire de la caractéristique I-V en une loi de puissance. Ainsi, le courant tunnel ne présente un comportement linéaire qu'en l'absence d'interactions coulombiennes et électrostatique.

5.4.2 Bruit non symétrisé

Suivant la discussion initiée aux sections 1.7.4 et 1.7.6, nous nous intéressons au bruit non symétrisé et plus précisement à la composante S_-, définie par :

$$S_T(t,t') \quad = \quad \langle \mathrm{T}_K \{ I_T(t^-) I_T(t'^+) e^{-i\int_K dt_1 \mathrm{H_T}(t_1)} \} \rangle \ . \tag{5.56}$$

Le second ordre dans le développement perturbatif en l'amplitude Γ conduit à l'ex-

pression du bruit non symétrisé :

$$\begin{aligned} S_T(t,t') &= \frac{e^2\Gamma^2}{(2\pi a)^2}\sum_{r\sigma}\cos\left(\frac{eV(t-t')}{\hbar}\right)e^{\mathbf{G}_\sigma^{\varphi\varphi,-+}(0,0,t-t')} \\ &\times\ e^{\frac{\pi}{2}\sum_j\left(\mathbf{G}_j^{\phi\phi,-+}(0,0,t-t')+\mathbf{G}_j^{\theta\theta,-+}(0,0,t-t')+r\mathbf{G}_j^{\phi\theta,-+}(0,0,t-t')+r\mathbf{G}_j^{\theta\phi,-+}(0,0,t-t')\right)} \\ &\times\ e^{-\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\mathbf{G}_{c\sigma}^{\phi\varphi,-+}(0,0,t-t')+r\mathbf{G}_{c\sigma}^{\theta\varphi,-+}(0,0,t-t')+\mathbf{G}_{c\sigma}^{\varphi\phi,-+}(0,0,t-t')+r\mathbf{G}_{c\sigma}^{\varphi\theta,-+}(0,0,t-t')\right)}\ . \end{aligned} \tag{5.57}$$

Nous ne considérons ici que le cas d'une tension constante appliquée au STM. L'invariance par translation temporelle étant vérifiée, le bruit ne dépend que de la différence $\tilde{t} = t - t'$, d'où $S_T(t,t') = S_T(\tilde{t})$, ce qui permet de définir sa transformée de Fourier :

$$S_T(\Omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t}e^{i\Omega\tilde{t}}S_T(\tilde{t})\ . \tag{5.58}$$

Bruit tunnel à fréquence nulle

En remplaçant les expressions des fonctions de Green bosoniques dans l'équation (5.57), celui-ci s'écrit :

$$\begin{aligned} S_T(\Omega=0) &= \frac{2e\Gamma^2}{(\pi a)^2}\int_0^{+\infty} d\tilde{t}\cos(eV\tilde{t})\cosh\left(\frac{\sqrt{\pi K_c}}{4}\mathrm{sgn}(1+i\omega_c\tilde{t})\sin\left(\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}(1+i\omega_c\tilde{t})\right)\right) \\ &\times\ \mathrm{Re}\left[e^{-(\nu+1)\ln(1+i\omega_c\tilde{t})+\left(\frac{K_c}{8}+\frac{1}{2}\right)f_{Sc}(\tilde{t})}\right], \end{aligned} \tag{5.59}$$

où la fonction f_{Sc} a été définie à l'équation (5.55).

Analyse des résultats

La quantité intéressante, que l'on peut extraire des formules du courant moyen et du bruit à fréquence, est le facteur de Fano.

En comparant les figures (5.12) et (5.14), on remarque que le courant moyen tunnel et le bruit à fréquence nulle tunnel sont liés par un facteur de proportionnalité égal à la charge de l'électron. Le même constat vient de la comparaison des figures (5.13) et (5.15). Puisque seuls des électrons peuvent passer, par effet tunnel, de la pointe de STM dans le fil quantique, il est normal de retrouver la relation de Schottky classique :

$$S_T(\Omega=0) = e|\langle I_T\rangle|. \tag{5.60}$$

L'investigation du courant moyen et du bruit à fréquence nulle dans le fil quantique, en présence d'écrantage, devient alors nécessaire afin de déterminer les effets de l'écrantage sur les charges anormales des excitations circulant dans le conducteur

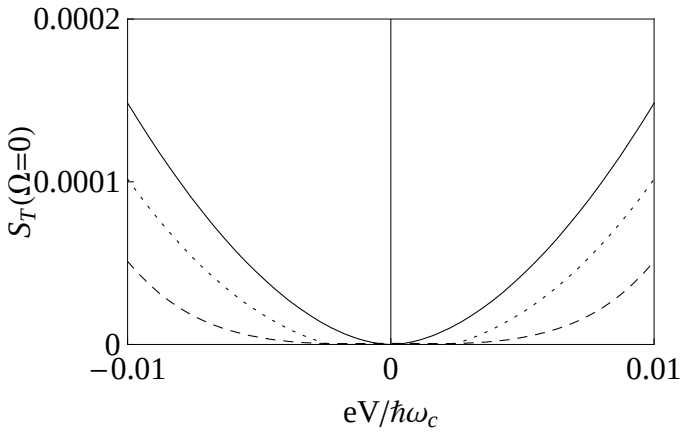


FIGURE 5.14 – *Bruit à fréquence nulle en fonction de la tension appliquée à la pointe pour* $K_c = 0.2$, *en l'absence d'écrantage (trait plein), pour un écrantage faible* $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.001$ *(pointillé) et pour un écrantage plus fort* $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.002$ *(tiret) en unité de* $e^2\Gamma^2/(av_F\hbar^2\pi^3)$.

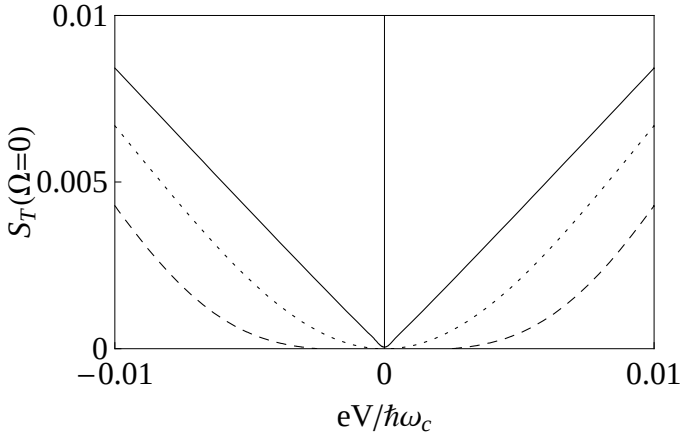


FIGURE 5.15 – *Bruit à fréquence nulle en fonction de la tension appliquée à la pointe* $K_c = 0.7$, *en l'absence d'écrantage (trait plein), pour un écrantage faible* $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.001$ *(pointillé) et pour un écrantage plus fort* $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.002$ *(tiret) en unité de* $e^2\Gamma^2/(av_F\hbar^2\pi^3)$.

unidimensionnel.

Si, à fréquence nulle, aucune distinction sur la convention choisie entre bruit symétrisé et non symétrisé n'est possible, ce n'est plus le cas à fréquence finie [90], [91]. Pour cette raison, nous nous intéressons à ce dernier cas.

Bruit tunnel d'excès

Le calcul perturbatif, à l'ordre deux en Γ, définit l'expression du bruit non symétrisé à fréquence finie S_- comme :

$$
\begin{aligned}
S_T(\Omega) &= \frac{e^2\Gamma^2}{(2\pi a)^2}\sum_{r\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t}e^{i\Omega\tilde{t}}\cos\left(\frac{eV\tilde{t}}{\hbar}\right)e^{2\pi\mathbf{G}_{\sigma}^{\varphi\varphi,-+}(0,0,\tilde{t})} \\
&\times\ e^{\frac{\pi}{2}\sum_j\left(\mathbf{G}_j^{\phi\phi,-+}(0,0,\tilde{t})+\mathbf{G}_j^{\theta\theta,-+}(0,0,\tilde{t})+r\mathbf{G}_j^{\phi\theta,\eta\eta_1}(0,0,\tilde{t})+r\mathbf{G}_j^{\theta\phi,-+}(0,0,\tilde{t})\right)} \\
&\times\ e^{-\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\mathbf{G}_{c\sigma}^{\phi\varphi,-+}(0,0,\tilde{t})+r\mathbf{G}_{c\sigma}^{\theta\varphi,-+}(0,0,\tilde{t})+\mathbf{G}_{c\sigma}^{\varphi\phi,-+}(0,0,\tilde{t})+r\mathbf{G}_{c\sigma}^{\varphi\theta,-+}(0,0,\tilde{t})\right)}\ , \qquad (5.61)
\end{aligned}
$$

qui devient, une fois les formules des diverses fonctions de Green bosoniques en présence d'écrantage remplacées :

$$
\begin{aligned}
S_T(\Omega) &= \frac{2e^2\Gamma^2}{\pi^2a^2}\int_0^{+\infty} d\tilde{t}\cos\left(\frac{eV\tilde{t}}{\hbar}\right)\mathrm{Re}\left[\cosh\left(\frac{\sqrt{\pi K_c}}{4}\mathrm{sgn}(1+i\omega_c\tilde{t})\sin\left(\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}(1+i\omega_c\tilde{t})\right)\right)\right. \\
&\times\ e^{i\Omega\tilde{t}-(\nu+1)\ln(1+i\omega_c\tilde{t})}e^{\left(\frac{K_c}{8}+\frac{1}{2}\right)\left(2\ln(1+i\omega_c\tilde{t})-e^{\omega_{Sc}\tilde{t}-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\tilde{t}+i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right)+e^{-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right)\right)} \\
&\times\ \left. e^{\left(\frac{K_c}{8}+\frac{1}{2}\right)\left(e^{\omega_{Sc}\tilde{t}+i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\tilde{t}-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right)+e^{i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}}\mathrm{Ei}\left(-i\frac{\omega_{Sc}}{\omega_c}\right)\right)}\right]\ . \qquad (5.62)
\end{aligned}
$$

Dans les expériences, la transformée de Fourier des corrélations de courant qui est extraite correspond au bruit total, qui contient également les fluctuations de point zéro et les fluctuations thermiques. Si l'on souhaite isoler la contribution du bruit de grenaille, c'est-à-dire, celle issue de l'application d'une tension, il est nécessaire de s'intéresser au bruit d'excès, dont la définition est :

$$
\Delta S_T(\Omega) = S_T(\Omega) - S_T(\Omega)|_{V=0}\ . \qquad (5.63)
$$

Analyse des résultats

Les courbes (5.16) et (5.17) représentent le bruit d'excès non symétrisé, normalisé par le courant moyen tunnel, en l'absence d'écrantage, pour différentes valeurs de la distance entre le fil et la pointe.

Nous débutons l'analyse de ces courbes en nous focalisant sur le comportement du bruit d'excès tunnel en l'absence d'écrantage.

Le bruit d'émission, c'est-à-dire la partie à fréquence négative, s'annule lorsque $\Omega < -eV/\hbar$. En effet, pour des valeurs de la fréquence inférieure à celle de la tension appliquée à la pointe de STM, le bruit d'émission s'annule car les électrons issus de la pointe de STM ne possèdent pas l'énergie requise pour émettre un photon [91], [19]. Ainsi, le bruit d'absorption ($\Omega > 0$) reste non nul et ce, indépendamment de la valeur de la fréquence d'étude, excepté en l'absence d'interaction coulombienne (cf. Fig. (5.16)).

En présence d'interactions coulombiennes, le comportement du bruit d'excès tunnel

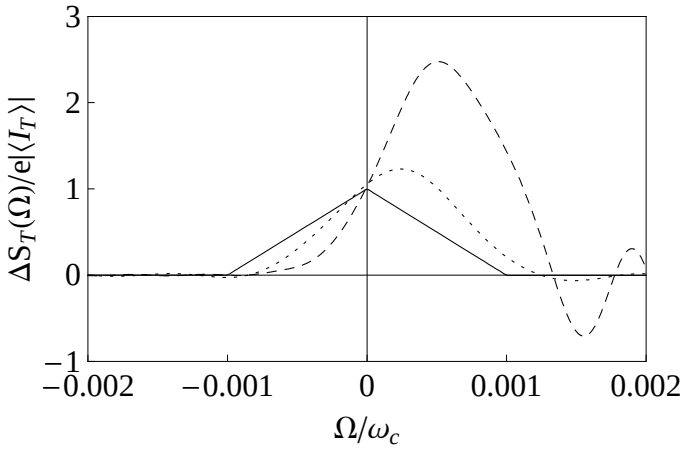


FIGURE 5.16 – *Bruit d'excès non symétrisé en fonction de la fréquence d'étude, normalisé par le courant tunnel, en l'absence d'interaction coulombienne ($K_c = 1$) et pour différentes valeurs de l'écrantage : $\omega_{Sc}/\omega_c = 0$ (trait plein), $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.0001$ (pointillé) et $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.0002$ (tiret). La valeur de la tension appliquée à la pointe de STM est $eV/\hbar\omega_c = 0.001$.*

est modifié. Plus précisemment, l'augmentation du paramètre K_c induit une réduction du bruit d'émission, très faible comparée à celui d'un liquide de Lüttinger en l'absence d'interaction. Le bruit d'absorption présente également un comportement très différent. Ses valeurs sont plus importantes lorsque les interactions coulombiennes dans le conducteur unidimensionnel sont présentes (cf. courbes en trait plein des Figs. (5.16) et (5.17)).

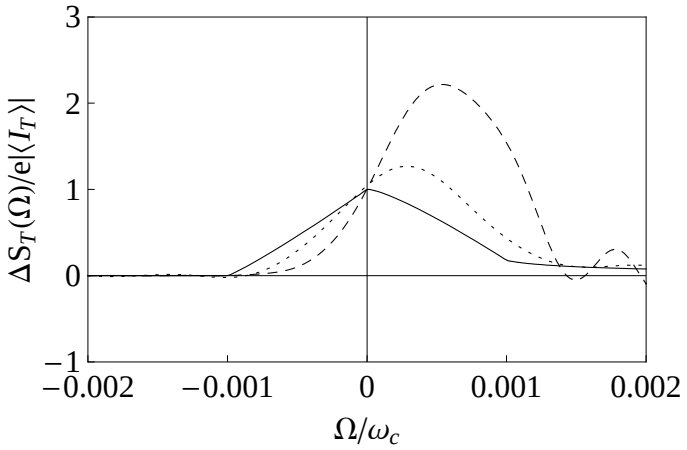


FIGURE 5.17 – *Bruit d'excès non symétrisé en fonction de la fréquence d'étude, normalisé par le courant tunnel, en présence d'interaction coulombienne ($K_c = 0.5$) et pour différentes valeurs de l'écrantage : $\omega_{Sc}/\omega_c = 0$ (trait plein), $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.0001$ (pointillé) et $\omega_{Sc}/\omega_c = 0.0002$ (tiret). La valeur de la tension appliquée à la pointe de STM est $eV/\hbar\omega_c = 0.001$.*

Lorsque les interactions coulombiennes sont prises en compte, le comportement du

bruit d'excès tunnel, en l'absence d'écrantage, présente donc une asymétrie. Ce changement de profil est une conséquence de la présence des interactions électron-électron dans le fil quantique. La forme du bruit d'excès peut donc être utilisée afin d'extraire des informations sur la force du couplage entre électrons.

L'approche de la pointe de STM induit des effets d'écrantage, visibles sur ces graphes. Le bruit tunnel d'émission, se trouve réduit et ceci est commun à toutes les courbes. Cette diminution va de paire avec la diminution de la distance d entre le fil et la pointe. En revanche, les valeurs du bruit d'absorption sont supérieures à celles du bruit en l'absence d'écrantage. De plus, on remarque que la proximité entre fil et pointe provoque, dans le comportement du bruit d'excès tunnel d'un liquide de Lüttinger en l'absence d'interactions coulombiennes, une asymétrie du spectre.

Finalement, le rapprochement entre la pointe et le conducteur unidimensionnel induit des effets d'écrantage rappelant ceux des interactions coulombiennes : réduction du spectre d'émission et augmentation de la partie d'absorption. Le bruit d'excès tunnel est donc sensible à la fois aux interactions électron-électron dans le fil quantique mais aussi aux interactions entre le fil et la pointe de STM. Le bruit d'excès tunnel n'est symétrique qu'en l'absence d'interactions coulombiennes et électrostatique.

Il existe un autre moyen pour regarder plus en détails l'asymétrie du bruit d'excès tunnel : la conductance d'excès.

5.4.3 Conductance

La différence entre les bruits d'absorption et d'émission permet d'avoir accès à la partie réelle de la conductance [91] :

$$S_T(\Omega) - S_T(-\Omega) = 2\hbar\Omega \mathrm{Re}\left[G(\Omega)\right] . \tag{5.64}$$

Dans la section précédente, nous nous sommes intéressés au bruit d'excès tunnel. Il est alors possible de définir la partie réelle de la conductance d'excès par la différence entre bruit d'excès à fréquences positives et à fréquences négatives :

$$\mathrm{Re}\left[\Delta G(\Omega)\right] = \frac{\Delta S_T(\Omega) - \Delta S_T(-\Omega)}{2\hbar\Omega} , \tag{5.65}$$

où $\Omega > 0$.

Avant de nous intéresser aux résultats, rappelons que, dans un liquide de Lüttinger en l'absence d'écrantage et d'interaction coulombienne, la conductance est indépendante de la tension appliquée car le courant présente un comportement linéaire avec

cette même tension. Ainsi, la conductance d'excès dans ce type de système s'annule. Ce constat se traduit également dans la symétrie du bruit d'excès lorsque $K_c = 1$ (cf. Fig. (5.16)). Ce n'est plus le cas en présence d'interaction coulombienne.

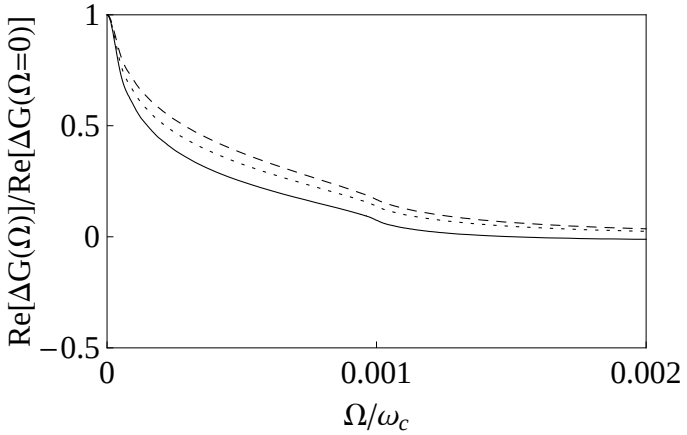


FIGURE 5.18 – *Partie réelle de la conductance d'excès en fonction de la fréquence et normalisée par sa valeur à fréquence nulle, en l'absence d'écrantage et pour différentes valeurs du paramètre d'interaction coulombienne : $K_c = 0.9$ (trait plein), $K_c = 0.7$ (pointillé), and $K_c = 0.5$ (tiret). La valeur de la tension appliquée est $eV/\hbar\omega_c = 0.001$.*

En effet, comme le montrent les courbes du graphe (5.18), lorsque le paramètre d'interaction coulombienne K_c est inférieur à 1, la conductance d'excès présente un comportement décroissant en fonction de la fréquence et qui converge vers la valeur en l'absence d'interaction coulombienne. On observe également un très léger saut de $\Delta G(\Omega)$ lorsque $\Omega = eV/\hbar$, lorsque les interactions coulombiennes sont présentes, et qui s'atténue lorsque K_c augmente.

En revanche, avec l'approche de la pointe près du fil quantique, le comportement de la conductance d'excès est différent (cf. Fig. (5.19)).

Elle présente une légère décroissance à basse fréquence en comparaison avec la limite $\omega_{Sc} \to 0$. De plus, la conductance d'excès devient quasi-indépendante de la force des interactions coulombiennes. Cela signifie que les effets de l'écrantage causé par la proximité de la pointe de STM dominent les effets des interactions coulombiennes, les rendant moins visibles.

CONCLUSION

Ce chapitre a été dévolu à l'étude des effets de l'écrantage causé par une pointe de STM sur la structure électronique d'un fil quantique homogène.

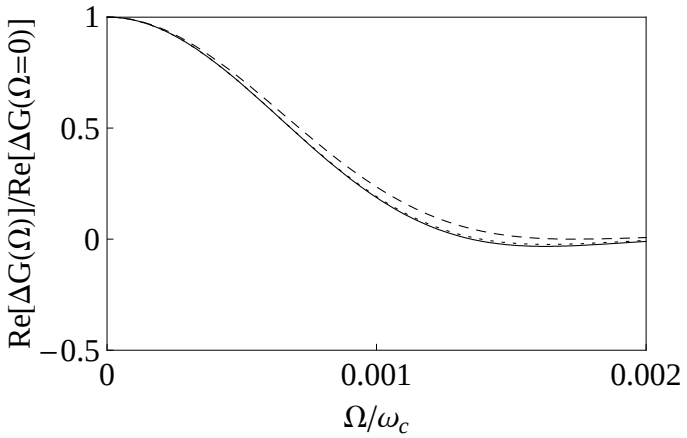


FIGURE 5.19 – *Partie réelle de la conductance d'excès en fonction de la fréquence et normalisée par sa valeur à fréquence nulle, en présence d'écrantage ($\omega_{Sc}/\omega_c = 0.0002$) et pour différentes valeurs du paramètre d'interaction coulombienne : $K_c = 0.9$ (trait plein), $K_c = 0.7$ (pointillé), and $K_c = 0.5$ (tiret). La valeur de la tension appliquée est $eV/\hbar\omega_c = 0.001$.*

A partir d'une approximation raisonnable ($K_c > 1/2$), les équations de Dyson régissant le comportement des fonctions de Green du système global sont obtenues de manière exacte. Cette situation est alors appliquée au cas d'un potentiel électrostatique local, permettant l'étude des propriétés spectrales et de transport du fil quantique. Ainsi, le comportement de la densité d'états tunnel se trouve être fortement perturbé, à basse fréquence, par la proximité de la pointe. En effet, en comparaison avec le cas où ces effets d'écrantage n'existent pas, ses valeurs sont augmentées lorsque les interactions coulombiennes sont importantes au sein du conducteur unidimensionnel et réduites lorsque ces mêmes interactions sont faibles. Ainsi, il en découle que les effets de l'écrantage pour un paramètre K_c petit, diminuent les effets des interactions coulombiennes et pour un paramètre K_c grand, masquent les effets des interactions coulombiennes.

Le comportement de la densité d'états locale, laquelle dépend fortement de la position le long du fil et de la distance entre fil et pointe, met en évidence la non homogénéité du système. Cependant, ces dépendances n'apparaissent que lorsque $K_c < 1$, montrant que les interactions coulombiennes sont un vecteur d'étalement des effets d'écrantage dans le fil, malgré la localité du potentiel électrostatique. Ainsi, l'extension spatiale de la densité d'états locale est directement reliée à la force de couplage des interactions coulombiennes et à la force du potentiel d'écrantage.

L'impact de l'écrantage sur les propriétés de transport a également été étudié. L'approche de la pointe près du fil quantique provoque une réduction importante du transport des électrons entre les deux sous-systèmes, fil et pointe. Cette conclusion est tirée de l'analyse du comportement des courant moyen et bruit à fréquence nulle tunnels. De plus, ces deux quantités physiques sont liées par un facteur de proportionnalité égal à la charge de l'électron. Si l'existence d'un potentiel électrostatique entre le fil quantique

et la pointe de STM réduit le transport, les effets d'écrantage ainsi provoqués ne sont pas visibles à travers le comportement du facteur de Fano. Le bruit d'excès tunnel est également étudié et présente une sensibilité aux effets d'écrantage. En l'absence d'interactions coulombiennes mais lorsque des effets de l'écrantage apparaissent, le spectre du bruit d'excès devient asymétrique. Ainsi, la forme du bruit d'excès se trouve modifiée de la même manière que par la présence d'interactions coulombiennes : réduction du bruit d'émission et augmentation des valeurs du bruit d'absorption.

Afin d'étudier plus en détails l'asymétrie du bruit d'excès, la conductance d'excès a été étudiée. Deux résultats ont alors émergé. D'une part, en présence d'interactions coulombiennes, cette quantité ne s'annule plus et devient dépendante de la fréquence. D'autre part, lorsque la pointe de STM de rapproche du fil quantique, la conductance d'excès devient quasi-indépendante de la valeur du paramètre K_c. Ainsi, les effets de l'écrantage causé par la proximité de la pointe dominent les effets des interactions coulombiennes.

Perspectives

Cette thèse traite des effets de proximité ou de contacts sur les propriétés électroniques d'un conducteur unidimensionnel.

Dans le quatrième chapitre, nous avons considéré le système constitué d'un nanotube de carbone connecté par ses extrémités à deux électrodes métalliques. Des électrons sont injectés en son cœur depuis une pointe de STM par effet tunnel. Le courant moyen et le bruit à fréquence nulle ont été obtenus par un calcul perturbatif en l'amplitude tunnel. Il a ainsi été montré que la relation de Schottky, exprimant la relation de proportionnalité entre ces deux quantités physiques, présente une déviation du comportement quand des effets de taille finie apparaissent, ou en d'autres termes, lorsque l'extension spatiale des paquets d'onde se trouve être plus grande ou de l'ordre de la longueur du nanotube. Dans ce régime, le bruit est super- puis sub-poissonien en fonction de la tension.

Dans une situation où le transport est photo-assisté, les effets de taille finie se manifestent par la structure en marche d'escalier de la dérivée du bruit. On retrouve ainsi un comportement de type liquide de Fermi, la présence des contacts provoque donc la destruction du caractère *liquide de Lüttinger* d'un conducteur unidimensionnel.

Les effets de taille finie se manifestent dans le comportement du bruit à basse fréquence, ce qui présente un avantage technique important. En effet, des tests expérimentaux pourraient donc confirmer ces résultats. Cependant, la difficulté principale dans la réalisation de ce genre de système réside dans la propreté des contacts, qui est actuellement insuffisante. Il en résulte l'observation uniquement du blocage de Coulomb dynamique.

Dans le cinquième chapitre, nous avons étudié les effets de l'écrantage causé par la proximité de la pointe de STM, dans un fil quantique de longueur infinie.

L'écrantage affecte fortement la densité d'états tunnel et la fonction spectrale ainsi que la densité d'états locale, qui devient dépendante de la position le long du fil. L'étude de son extension spatiale a été menée, mettant en évidence sa dépendance en fonctions des interactions coulombiennes, la fréquence, et la distance entre la pointe de STM et le fil quantique.

Le transport tunnel est également modifié par la proximité de la pointe. Ainsi, le courant moyen et le bruit à fréquence nulle se trouvent fortement réduits lorsque l'écrantage augmente. Une analyse du comportement du bruit d'excès tunnel a également été menée.

D'une part, afin de préciser l'interprétation physique des phénomènes mis en jeu lors de l'approche de la pointe, il serait intéressant d'étudier le comportement du courant moyen et des corrélations de courant non symétrisées dans le fil quantique. D'autre part, cette étude peut être étendue au cas d'un fil inhomogène, dans lequel le paramètre d'interaction coulombienne dépend de la position le long du fil. Les fonctions de Green en l'absence d'écrantage sont alors plus complexes (voir Annexe *B*) car elles contiennent toute l'information sur les réflexions des excitations aux contacts. La présence d'électrodes provoque l'apparition d'oscillations dans le comportement du bruit à fréquence finie à cause des réflexions aux contacts. Il serait alors intéressant d'étudier le changement de ces oscillations en présence d'écrantage. Cependant, ce genre de calculs nécessite une puissance numérique importante.

La généralisation à un conducteur avec des degrés de liberté supplémentaires est également possible. Toujours à l'aide de calculs numériques, il serait intéressant d'étudier les effets de l'écrantage causé par la pointe avec une double dérivée du potentiel électrostatique plus réaliste, c'est à dire en considérant un potentiel électrostatique entre fil et pointe avec une extension spatiale finie. Dans le même esprit, il serait intéressant de considérer une géométrie de la pointe plus réaliste qui tiendrait compte du fait qu'il s'agit d'un métal à trois dimensions. Comme cela a été montré dans le dernier chapitre, la condition sur la pertinence du terme de rétrodiffusion limite les systèmes étudiés. En revanche, la prise en compte du terme de rétrodiffusion permettrait la description des propriétés d'une classe de systèmes unidimensionnels en présence d'écrantage plus large. Son introduction interdit, par contre, une résolution exacte des équations de Dyson, un traitement perturbatif serait alors nécessaire.

A

Fonctions de Green bosoniques

A.1 Cas d'un fil de longueur infinie

La fonction de partition contient les informations sur les propriétés à l'équilibre du système. Celle-ci s'exprime en fonction de l'action. Pour la calculer, nous pratiquons une rotation de Wick $\tau = it + \delta$ afin d'obtenir une action euclidienne. La formule (2.43) devient :

$$\mathrm{S}_{\mathrm{fil}} \quad = \quad -\sum_j \int d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \theta_{\mathrm{j}}(x,\tau)\Big\{\frac{1}{2v_{\mathrm{j}}K_{\mathrm{j}}}\partial_\tau^2 + \partial_x \frac{v_{\mathrm{j}}}{2K_{\mathrm{j}}}\partial_x\Big\}\theta_{\mathrm{j}}(x,\tau). \tag{A.1}$$

Nous définissons à présent les fonctions de Green par

$$G(x;x',\tau) = \langle \mathrm{T}_\tau\Big(\theta(x,\tau)\theta(x',0)\Big)\rangle - \frac{1}{2}\langle\theta^2(x,\tau)\rangle - \frac{1}{2}\langle\theta^2(x',0)\rangle, \tag{A.2}$$

où T_τ est l'opérateur d'ordre temporel, et qui, en fréquence, sont solutions de :

$$\Big(\frac{\omega^2}{v_{\mathrm{j}}K_{\mathrm{j}}} - \partial_x \frac{v_{\mathrm{j}}}{K_{\mathrm{j}}}\partial_x\Big) G_j^{\theta\theta}(x,x',\omega) \quad = \quad \delta(x-x'). \tag{A.3}$$

On remarque que :

- la fonction de Green $G_j^{\theta\theta}(x,x',\omega)$ est une fonction continue sur tout le fil, y compris en $x = x'$,
- sa dérivée $\frac{v_{\mathrm{j}}}{K_{\mathrm{j}}} G_j^{\theta\theta}(x,x',\omega)$ est continue partout sauf en $x = x'$ où elle présente un saut qui vaut -1.

A partir de l'action exprimée en fonction de champs croisées, il est possible de définir d'autres fonctions de Green. Par exemple, $G_j^{\theta\phi}(x,x',\tau) = \langle \mathrm{T}_\tau\Big(\theta(x,\tau)\phi(x',0)\Big)\rangle - \frac{1}{2}\langle\theta^2(x,\tau)\rangle - \frac{1}{2}\langle\phi^2(x',0)\rangle$. Toutes les fonctions de Green bosoniques sont connectées

entre elles via les équations du mouvement. Ainsi,

$$\begin{aligned} i\partial_\tau G^{\phi\theta}(x,x',\tau) &= \left\{\frac{v_\mathrm{j}}{K_\mathrm{j}}\right\}\partial_x G^{\theta\theta}(x,x',\tau) \\ \Rightarrow \quad G^{\phi\theta}(x,x',\omega) &= \frac{-1}{\omega}\left\{\frac{v_\mathrm{j}}{K_\mathrm{j}}\right\}\partial_x G^{\theta\theta}(x,x',\omega). \end{aligned} \tag{A.4}$$

$$\begin{aligned} i\partial_\tau G^{\theta\phi}(x,x',\tau) &= \left\{v_\mathrm{j}K_\mathrm{j}\right\}\partial_x G^{\phi\phi}(x,x',\tau) \\ \Rightarrow \quad G^{\theta\phi}(x,x',\omega) &= \frac{-1}{\omega}\left\{v_\mathrm{j}K_\mathrm{j}\right\}\partial_x G^{\phi\phi}(x,x',\omega). \end{aligned} \tag{A.5}$$

Les solutions de l'équation différentielle (A.3) en fréquence s'écrivent :

$$G_j^{\theta\theta}(x,x',\omega) = \begin{cases} A(x')e^{\frac{|\omega|x}{v_\mathrm{j}}} & x < x' \\ B(x')e^{-\frac{|\omega|x}{v_\mathrm{j}}} & x' < x \end{cases}$$

dont les coefficients sont :

$$A(x') = \frac{K_\mathrm{j}}{2|\omega|}e^{-\frac{|\omega|x'}{v_\mathrm{j}}}, \tag{A.6}$$

$$B(x') = \frac{K_\mathrm{j}}{2|\omega|}e^{\frac{|\omega|x'}{v_\mathrm{j}}}. \tag{A.7}$$

Or,

- la perturbation est appliquée adiabatiquement ce qui signifie une invariance par translation temporelle ;
- le fil quantique, dont la longueur est considérée infinie, est homogène, ce qui implique une invariance par translation spatiale.

De ces deux postulats, on peut déduire que :

$$G(x,t;x',t') = G(x-x',0,t-t',0) = G(\tilde{x},\tilde{t}),$$

en posant $\tilde{x} = x - x'$ et $\tilde{t} = t - t'$. Alors,

$$G_j^{\theta\theta}(\tilde{x},\omega) = \frac{2K_\mathrm{j}}{|\omega|}e^{-\frac{|\omega|}{v_\mathrm{j}}|\tilde{x}|}, \tag{A.8}$$

dont la tranformée de Fourier inverse s'écrit :

$$G_j^{\theta\theta}(\tilde{x},\tilde{\tau}) = \frac{K_\mathrm{j}}{4\pi}\int_0^{+\infty}\frac{d\omega}{\omega}e^{-\frac{\omega}{v_\mathrm{j}}|\tilde{x}|}\left(e^{-i\omega\tilde{\tau}} + e^{i\omega\tilde{\tau}}\right). \tag{A.9}$$

La dérivée temporelle de cette fonction est :

$$\partial_{\tilde{\tau}} G_j^{\theta\theta}(\tilde{x},\tilde{\tau}) = -\frac{iK_\mathrm{j}}{4\pi}\Big\{\frac{1}{|\tilde{x}|/v_\mathrm{j}+i\tilde{\tau}}+\frac{1}{-|\tilde{x}|/v_\mathrm{j}+i\tilde{\tau}}\Big\}. \tag{A.10}$$

Le passage en temps réel se fait via la transformation $\tilde{\tau} = i\tilde{t} + \tau_0$, où $\tau_0 = a/v_\mathrm{F}$, car la fonction de Green de Matsubara devient, par rotation de Wick, la fonction de Green bosonique G^{-+}. Ainsi,

$$\partial_{\tilde{t}} G_j^{\theta\theta,-+}(\tilde{x},\tilde{t}) = \frac{1}{4\pi K_\mathrm{j}}\Big\{\frac{1}{-\tilde{x}/v_\mathrm{j}-\tilde{t}+i\tau_0}+\frac{1}{\tilde{x}/v_\mathrm{j}-\tilde{t}+i\tau_0}\Big\}. \tag{A.11}$$

En intégrant sur le temps et une fois soustrés les deux derniers termes apparaîssant dans la définition (A.2), celle-ci devient :

$$G_j^{\theta\theta,-+}(\tilde{x},\tilde{t}) = -\frac{K_\mathrm{j}}{4\pi}\sum_{r'}\ln\left(1+i\frac{\tilde{t}v_\mathrm{F}}{a}+ir'\frac{K_\mathrm{j}\tilde{x}}{a}\right). \tag{A.12}$$

Par la même méthode de calcul, on trouve que :

$$G_j^{\phi\phi,-+}(\tilde{x},\tilde{t}) = -\frac{1}{4\pi K_\mathrm{j}}\sum_{r'}\ln\left(1+i\frac{\tilde{t}v_\mathrm{F}}{a}+ir'\frac{K_\mathrm{j}\tilde{x}}{a}\right). \tag{A.13}$$

Pour les fonctions de Green $G^{\phi\theta}$ et $G^{\theta\phi}$,

$$G_j^{\theta\phi}(\tilde{x},\omega) = \frac{\mathrm{sgn}(\tilde{x})}{2\omega}e^{-\frac{|\omega|}{v_\mathrm{j}}|\tilde{x}|}. \tag{A.14}$$

En reprenant les même techniques, nous obtenons :

$$G_j^{\theta\phi,-+}(\tilde{x},\tilde{t}) = -\frac{1}{4\pi}\sum_{r'}r'\ln\left(1+i\frac{\tilde{t}v_\mathrm{F}}{a}-ir'\frac{K_\mathrm{j}\tilde{x}}{a}\right) \tag{A.15}$$

$$= G_j^{\phi\theta,-+}(\tilde{x},\tilde{t}). \tag{A.16}$$

Notons que toutes ces expressions sont valables indépendamment du signe de $\tilde{x}$.
De plus, à partir des fonctions de Green bosoniques que nous venons de calculer, il est possible d'obtenir le jeu complet de fonctions de Green Keldysh en utilisant les relations énonçées à la section *Formalisme Keldysh* du chapitre 3.

A.2 Cas d'un nanotube de carbone de longueur L

Nous rappelons dans cette partie les expressions des fonctions de Green bosoniques du nanotube de carbone en présence de contacts, obtenues dans l'article [160]. Ne sont repésentées que les fonctions qui apparaissent dans le calcul du courant moyen et des

corrélations.

Lorsque les dépendances spatiales x et x' sont au point d'injection :

$$\begin{aligned}
G^{\theta\theta}_{j\delta}(0,0,t) &= \frac{-1}{2\pi K^N_{j\delta}}\Big[\ln\big(1+\frac{iv_{\mathrm{F}}t}{a}\big) \\
&+ \sum_{n=1}^{\infty} b^n_{j\delta}\Big(\ln\big(1+\frac{iv_{\mathrm{F}}t}{a+inLK^N_{j\delta}}\big)+\ln\big(1+\frac{iv_{\mathrm{F}}t}{a-inLK^N_{j\delta}}\big)\Big)\Big], \qquad \text{(A.17)}\\
G^{\phi\phi}_{j\delta}(0,0,t) &= \frac{-K^N_{j\delta}}{2\pi}\Big[\ln\big(1+\frac{iv_{\mathrm{F}}t}{a}\big) \\
&+ \sum_{n=1}^{\infty} b^n_{j\delta}\Big(\ln\big(1+\frac{iv_{\mathrm{F}}t}{a+inLK^N_{j\delta}}\big)+\ln\big(1+\frac{iv_{\mathrm{F}}t}{a-inLK^N_{j\delta}}\big)\Big)\Big], \qquad \text{(A.18)}\\
G^{\theta\phi}_{j\delta}(0,0,t) &= 0, \qquad \text{(A.19)}\\
G^{\phi\theta}_{j\delta}(0,0,t) &= 0 \qquad \text{(A.20)}
\end{aligned}$$

En revanche, lorsque une de ces deux positions se trouve dans le nanotube et l'autre dans les contacts, ce sont les dérivées des fonctions de Green bosoniques qui appa-

raissent dans les calculs du courant et des corrélations. Ainsi,

$$\begin{aligned}
\partial_x G^{\theta\theta}_{j\delta}(0,x,t) &= \partial_x G^{\theta\theta}_{j\delta}(x,0,t) && \text{(A.21)}\\
&= -\frac{\mathrm{sgn}(x)}{2\pi(K^N_{j\delta}+K^L_{j\delta})v^L_{j\delta}}\sum_{n=0}^{+\infty} b^n_{j\delta}\Big[\frac{1}{\alpha_n(x,t)-t+i\tau_0}\\
&+ \frac{1}{\alpha_n(x,t)+t-i\tau_0}\Big], && \text{(A.22)}\\
\partial_x G^{\phi\phi}_{j\delta}(0,x,t) &= -\frac{\mathrm{sgn}(x,t)K^N_{j\delta}K^L_{j\delta}}{2\pi(K^N_{j\delta}+K^L_{j\delta})v^L_{j\delta}}\sum_{n=0}^{+\infty}(-b_{j\delta})^n\Big[\frac{1}{\alpha_n(x,t)+t-i\tau_0}\\
&+ \frac{1}{\alpha_n(x,t)-t+i\tau_0}\Big] && \text{(A.23)}\\
&= \partial_x G^{\theta\theta}_{j\delta}(x,0,t), && \text{(A.24)}\\
\partial_x G^{\phi\theta}_{j\delta}(x,0,t) &= -\frac{K^N_{j\delta}}{2\pi(K^L_{j\delta}+K^N_{j\delta})v^L_{j\delta}}\sum_{n=0}^{+\infty}(-b_{j\delta})^n\Big[\frac{1}{\alpha_n(x,t)+t-i\tau_0}\\
&- \frac{1}{\alpha_n(x,t)-t+i\tau_0}\Big], && \text{(A.25)}\\
\partial_x G^{\phi\theta}_{j\delta}(0,x,t) &= \frac{K^L_{j\delta}}{2\pi(K^L_{j\delta}+K^N_{j\delta})v^L_{j\delta}}\sum_{n=0}^{+\infty} b^n_{j\delta}\Big[\frac{1}{\alpha_n(x,t)+t-i\tau_0}\\
&- \frac{1}{\alpha_n(x,t)-t+i\tau_0}\Big], && \text{(A.26)}\\
\partial_x G^{\theta\phi}_{j\delta}(x,0,t) &= -\frac{K^L_{j\delta}}{2\pi(K^L_{j\delta}+K^N_{j\delta})v^L_{j\delta}}\sum_{n=0}^{+\infty} b^n_{j\delta}\Big[\frac{1}{\alpha_n(x,t)+t-i\tau_0}\\
&- \frac{1}{\alpha_n(x,t)-t+i\tau_0}\Big], && \text{(A.27)}\\
\partial_x G^{\theta\phi}_{j\delta}(0,x,t) &= \frac{K^N_{j\delta}}{2\pi(K^L_{j\delta}+K^N_{j\delta})v^L_{j\delta}}\sum_{n=0}^{+\infty}(-b_{j\delta})^n\Big[\frac{1}{\alpha_n(x,t)+t-i\tau_0}\\
&- \frac{1}{\alpha_n(x,t)-t+i\tau_0}\Big]. && \text{(A.28)}
\end{aligned}$$

où $\alpha_n(x,t) = \frac{L}{v^N_{j\delta}}\Big(n+1/2\Big) + \frac{1}{v^L_{j\delta}}\Big(|x|-L/2\Big)$. Ces fonctions de Green bosoniques correspondent aux fonctions de Green Keldysh G^{-+}.

B

Calcul de la fonction spectrale

Cette annexe présente le calcul de la fonction spectrale, où la fonction $A^{-+}_{+\sigma}(q,\omega)$ est tout d'abord exprimée [114] :

$$A^{-+}_{+\sigma}(q,\omega) = \mathrm{Im}\left(\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{t}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} e^{i(\omega\tilde{t}-q\tilde{x})} i\mathcal{G}^{-+}_{+\sigma}(\tilde{x},\tilde{t})\right). \tag{B.1}$$

En développant le produit sur j de la fonction de Green, on peut voir que, pour le secteur s, l'invariance par rotation de spin des interactions ($K_s = 1$) provoque la nullité du paramètre γ_s. Ainsi,

$$\begin{aligned} A^{-+}_{+\sigma}(q,\omega) &= \mathrm{Im}\left(i\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{t}}{2\pi a}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{x}}{2\pi}\left[\frac{e^{i\left(\omega\tilde{t}-q\tilde{x}+k_F\tilde{x}\right)}}{\left(1+i\frac{\tilde{t}v_F}{a}-i\frac{K_c\tilde{x}}{a}\right)^{1/2}}\right.\right. \\ &\times \left.\left.\frac{1}{\left(1+i\frac{\tilde{t}v_F}{a}-i\frac{\tilde{x}}{a}\right)^{1/2}}\frac{1}{\left(1+i\frac{\tilde{t}v_F}{a}+i\frac{K_c\tilde{x}}{a}\right)^{\gamma_c}\left(1+i\frac{\tilde{t}v_F}{a}-i\frac{K_c\tilde{x}}{a}\right)^{\gamma_c}}\right]\right), \end{aligned} \tag{B.2}$$

où $\gamma_c = \frac{1}{8}\left(K_c + \frac{1}{K_c} - 2\right)$ et $\tilde{k} = q - k_F$. Nous pratiquer un changement de variables $\tilde{t} \to s$ où :

$$s = \frac{\tilde{x}}{a} - \frac{\tilde{t}v_F}{a}. \tag{B.3}$$

Ainsi,

$$A^{-+}_{+\sigma}(q,\omega) = \mathrm{Im}\left(\frac{1}{(K_c)^{2\gamma_c+1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{ds}{2\pi}\frac{e^{-isa\frac{\omega}{v_F}}}{(1-is)^{1/2}}F(s)\right), \tag{B.4}$$

où l'on introduit $F(s)$ pour spécifier l'intégrale sur $\tilde{x}$ dont les élements dépendent de s

et de $\tilde{x}$:

$$F(s) = \frac{a^{2\gamma_c+\frac{1}{2}}i}{v_F}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{x}}{2\pi}\frac{e^{-i(-\tilde{x})\left(\omega/v_F-\tilde{k}\right)}}{\left(\frac{a}{K_c}-iasK_c^{-1}-i(-\tilde{x})(K_c^{-1}-1)\right)^{\gamma_c+\frac{1}{2}}\left(\frac{a}{K_c}-isaK_c^{-1}-i(-\tilde{x})(1+K_c^{-1})\right)^{\gamma_c}}, \tag{B.5}$$

L'intégrale sur $\tilde{x}'$ se calcule de façon analytique [187] et $F(s)$ se réexprime alors,

$$\begin{aligned} F(s) &= \frac{(i)a^{2\gamma_c+1/2}}{\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1/2)}\frac{K_c^{2\gamma_c+1/2}}{(1-K_c)^{\gamma_c+1/2}(1+K_c)^{\gamma_c}}\frac{(\omega-\tilde{k}v_F)^{2\gamma_c-1/2}}{v_F^{2\gamma_c+1/2}}\Theta(\omega-\tilde{k}v_F) \\ &\times \exp\Big\{\frac{a}{1+K_c}(\tilde{k}-\omega/v_F)\Big\}\exp\Big\{-i\frac{as}{1+K_c}(\tilde{k}-\omega/v_F)\Big\} \\ &\times {}_1F_1\Big(\gamma_c+1/2;2\gamma_c+1/2;2K_c\Big(\frac{a-isa}{1-K_c^2}\Big)(\tilde{k}-\omega/v_F)\Big), \end{aligned} \tag{B.6}$$

où ${}_1F_1(a;b;z)$ est la fonction hypergeométrique confluente, Θ la fonction de Heaviside et $\mathbf{\Gamma}$ la fonction gamma.
Or, cette fonction hypergeométrique confluente s'exprime également sous la forme d'une intégrale [188]. Donc,

$$\begin{aligned} A_{+\sigma}^{-+}(q,\omega) &= \mathrm{Im}\Bigg(i\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_c+1/2}\frac{(\omega-\tilde{k}v_F)^{2\gamma_c-1/2}}{(1-K_c^2)^{\gamma_c}(1-K_c)^{1/2}}\frac{\Theta(\omega-\tilde{k}v_F)}{\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)} \\ &\times \exp\Big\{\frac{a}{K_c}\Big(\frac{\tilde{k}v_F-\omega}{v_F+v_c}\Big)\Big\}\int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_c-1}p^{\gamma_c-1/2}\exp\Big\{\frac{2pK_ca}{1-K_c^2}(\tilde{k}-\omega/v_F)\Big\} \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{ds}{2\pi}\frac{\exp\Big\{\frac{-isa}{1-K_c^2}\Big[(1-K_c)\Big(\tilde{k}+\omega/v_c\Big)+2K_cp\Big(\tilde{k}-\omega/v_F\Big)\Big]\Big\}}{(1-is)^{1/2}}\Bigg). \end{aligned} \tag{B.7}$$

L'intégrale sur s se calcule analytiquement [187]. Ainsi $A_{+\sigma}^{-+}(q,\omega)$ devient :

$$\begin{aligned} A_{+\sigma}^{-+}(q,\omega) &= \mathrm{Im}\Bigg(i\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_c}\frac{(1+K_c^{-1})^{1/2}}{(1-K_c^2)^{\gamma_c}}\frac{(\omega-\tilde{k}v_F)^{2\gamma_c-1/2}\Theta(\omega-\tilde{k}v_F)}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)} \\ &\times \exp\Big\{-\frac{a\omega}{v_c+v_F}(1+K_c^{-1})\Big\}\int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_c-1}p^{\gamma_c-1/2} \\ &\times \Big((1-K_c)(\tilde{k}v_c+\omega)-2p(\omega-\tilde{k}v_F)\Big)^{-\frac{1}{2}}\Theta\big((1-K_c)(\tilde{k}v_c+\omega)-2p(\omega-\tilde{k}v_F)\big)\Bigg). \end{aligned} \tag{B.8}$$

En ce qui concerne l'expression de la fonction spectrale des excitations se propageant

"*vers la gauche*" ($r = -$), il y a certains changements. En effet, la formule de départ est :

$$A_{-\sigma}^{-+}(q,\omega) = i\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{t}}{2\pi a}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{x}}{2\pi}\left[\frac{e^{i\left(\omega\tilde{t}-q\tilde{x}-k_{\mathrm{F}}\tilde{x}\right)}}{\left(1+i\frac{\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{K_{\mathrm{c}}\tilde{x}}{a}\right)^{1/2}}\right. \tag{B.9}$$
$$\left.\times\ \frac{1}{\left(1+i\frac{\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{\tilde{x}}{a}\right)^{1/2}}\frac{1}{\left(1+i\frac{\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}+i\frac{K_{\mathrm{c}}\tilde{x}}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{c}}}\left(1+i\frac{\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}-i\frac{K_{\mathrm{c}}\tilde{x}}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{c}}}}\right].$$

Le changement de variables adéquat est : $s = \frac{\tilde{x}}{a} + \frac{\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}$. De plus, $\tilde{k}$ est défini par $\tilde{k} = k + k_{\mathrm{F}}$. Ainsi,

$$A_{-\sigma}^{-+}(q,\omega) = \mathrm{Im}\left(i\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}}\frac{(1+K_{\mathrm{c}}^{-1})^{1/2}}{(1-K_{\mathrm{c}}^2)^{\gamma_{\mathrm{c}}}}\frac{\left(\omega+\tilde{k}v_{\mathrm{F}}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\Theta\left(\omega+\tilde{k}v_{\mathrm{F}}\right)}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}})\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}}+1/2)}\right. \tag{B.10}$$
$$\times\ \exp\Big\{-\frac{a\omega}{v_{\mathrm{c}}+v_{\mathrm{F}}}(1+K_{\mathrm{c}}^{-1})\Big\}\int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_{\mathrm{c}}-1}p^{\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}$$
$$\left.\times\ \Big((1-K_{\mathrm{c}})(\omega-\tilde{k}v_{\mathrm{c}})-2p(\omega+\tilde{k}v_F)\Big)^{-\frac{1}{4}}\Theta\big((1-K_{\mathrm{c}})(\omega-\tilde{k}v_{\mathrm{c}})-2p(\omega+\tilde{k}v_F)\big)\right).$$

Les expressions de $A_{-\sigma}^{-+}$ et $A_{+\sigma}^{-+}$ se formulent en une seule dépendant de la chiralité r telle que la fonction spectrale d'un fil quantique s'écrit :

$$A_{r\sigma}^{-+}(q,\omega) = \mathrm{Im}\left(i\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}}\frac{(1+K_{\mathrm{c}}^{-1})^{1/2}}{(1-K_{\mathrm{c}}^2)^{\gamma_{\mathrm{c}}}}\frac{\left(\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{F}}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\Theta\left(\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{F}}\right)}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}})\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}}+1/2)}\exp\Big\{\frac{-a\omega}{v_{\mathrm{c}}+v_{\mathrm{F}}}(1+K_{\mathrm{c}}^{-1})\Big\}\right.$$
$$\times\ \frac{1}{\big((1-K_{\mathrm{c}})(\omega+r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})\big)^{1/2}}\int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_{\mathrm{c}}-1}p^{\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\left(1-p\frac{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_{\mathrm{c}})(\omega+r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})}\right)^{-\frac{1}{2}}$$
$$\left.\times\ \Theta\big((1-K_{\mathrm{c}})(\omega+r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})-2p(\omega-r\tilde{k}_r v_F)\big)\right), \tag{B.11}$$

où $\tilde{k}_r = k - rk_{\mathrm{F}}$.
Calculons maintenant la fonction spectrale "$+-$" suivante :

$$A_{r\sigma}^{+-}(q,\omega) = \mathrm{Im}\left(-\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}d\tilde{t}\int_{-\infty}^{+\infty}d\tilde{x}e^{i(\omega\tilde{t}-q\tilde{x})}(-i)\mathcal{G}_{r\sigma}^{+-}(\tilde{x},\tilde{t})\right), \tag{B.12}$$

qui, une fois le produit sur les secteurs j développé, s'exprime comme :

$$\begin{aligned} A_{r\sigma}^{+-}(q,\omega) &= \mathrm{Im}\Bigg((-i)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{x}}{2\pi a}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\tilde{t}}{2\pi}\frac{e^{i\omega t - i(k-rk_{\mathrm{F}})\tilde{x}}}{\left(1-\frac{i\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}+\frac{i\tilde{x}}{a}\right)^{1/2}} \\ &\times \frac{1}{\left(1-\frac{i\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}-\frac{i\tilde{x}K_{\mathrm{c}}}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{c}}}\left(1-\frac{i\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}+\frac{i\tilde{x}K_{\mathrm{c}}}{a}\right)^{\gamma_{\mathrm{c}}}\left(1-\frac{i\tilde{t}v_{\mathrm{F}}}{a}+r\frac{i\tilde{x}K_{\mathrm{c}}}{a}\right)^{1/2}}\Bigg). \end{aligned} \tag{B.13}$$

Par les mêmes changements de variables et les mêmes techniques de calculs utilisés précédemment, on obtient :

$$\begin{aligned} A_{r\sigma}^{+-}(q,\omega) &= \mathrm{Im}\Bigg(-i\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}}\frac{(1+K_{\mathrm{c}}^{-1})^{1/2}}{(1-K_{\mathrm{c}}^2)^{\gamma_{\mathrm{c}}}}\frac{\left(r\tilde{k}_r v_{\mathrm{F}}-\omega\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\Theta\left(r\tilde{k}_r v_{\mathrm{F}}-\omega\right)}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}})\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}}+1/2)} \\ &\times \frac{\exp\left\{\frac{a\omega}{v_{\mathrm{c}}+v_{\mathrm{F}}}\left(1+K_{\mathrm{c}}^{-1}\right)\right\}}{\left((1-K_{\mathrm{c}})(-\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})\right)^{1/2}} \\ &\times \int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_{\mathrm{c}}-1}p^{\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\left(1-p\frac{2(r\tilde{k}_r v_F-\omega)}{(1-K_{\mathrm{c}})(-\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})}\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\times \Theta\left((1-K_{\mathrm{c}})(-\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})-2p(r\tilde{k}_r v_F-\omega)\right)\Bigg). \end{aligned} \tag{B.14}$$

La partie imaginaire d'une somme étant égale à la somme des parties imaginaires, la fonction spectrale totale s'écrit :

$$\begin{aligned} A_{r\sigma}(q,\omega) &= A_{r\sigma}^{-+}(q,\omega)-A_{r\sigma}^{+-}(q,\omega) \\ &= \mathrm{Im}\Bigg(i\left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}}\frac{(1+K_{\mathrm{c}}^{-1})^{1/2}}{(1-K_{\mathrm{c}}^2)^{\gamma_{\mathrm{c}}}}\frac{1}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}})\mathbf{\Gamma}(\gamma_{\mathrm{c}}+1/2)}\frac{1}{\left(1-K_{\mathrm{c}}\right)^{1/2}} \\ &\times \Bigg\{\left(\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{F}}\right)^{2\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\Theta\left(\omega-r\tilde{k}_r v_{\mathrm{F}}\right)\exp\left\{\frac{-a\omega}{v_{\mathrm{c}}+v_{\mathrm{F}}}\left(1+K_{\mathrm{c}}^{-1}\right)\right\}(\omega+r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})^{-1/2} \\ &\times \int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_{\mathrm{c}}-1}p^{\gamma_{\mathrm{c}}-1/2}\left(1-p\frac{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_{\mathrm{c}})(\omega+r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})}\right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\times \Theta\left((1-K_{\mathrm{c}})(\omega+r\tilde{k}_r v_{\mathrm{c}})-2p(\omega-r\tilde{k}_r v_F)\right)+(\tilde{k}_r\to-\tilde{k}_r,\omega\to-\omega)\Bigg\}\Bigg). \end{aligned} \tag{B.15}$$

La forme de cette fonction montre la symétrie entre les termes issus des fonctions $''-+''$ et $''+-''$. Par la suite, nous concentrerons nos calculs sur une de ces parties, les résultats

correspondant à la deuxième se déduisant de ceux de la première.
L'intégrale sur p peut s'écrire sous la forme d'une fonction hypergéométrique grâce à la formule suivante [187] :

$$\int_0^1 dx x^{\lambda-1}(1-x)^{\mu-1}(1-\beta)^{-\nu} = B(\lambda,\mu)_2F_1(\nu,\lambda;\lambda+\mu;\beta), \quad \mathrm{Re}\,(\mu)>0, \mathrm{Re}\,(\lambda)>0, |\beta|<1 \tag{B.16}$$

où B est la fonction Beta. Les deux premières conditions pour utiliser cette transformation sont vérifiées, mais la dernière doit être traitée avec précaution en raison de la présence dans l'intégrale d'une fonction de Heaviside. Deux situations sont possibles pour obtenir la condition $\Theta\big((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)-2p(\omega-r\tilde{k}_r v_F)\big)=1$:

- $2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)<(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c) \;\Rightarrow\; \frac{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}<1$,
- $2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)>(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)$ et $0<(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c) \;\Rightarrow\; \frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}<1$, mais dans ce cas, il nous faut écrire la fonction hypergéometrique avec un argument β^{-1} tel que [187] :

$$\begin{aligned} {}_2F_1(\nu,\lambda;\lambda+\mu;\beta) &= \frac{\mathbf{\Gamma}(\lambda+\mu)\mathbf{\Gamma}(\lambda-\nu)}{\mathbf{\Gamma}(\lambda)\mathbf{\Gamma}(\lambda+\mu-\nu)}(-1)^{\nu}\beta^{-\nu}\;{}_2F_1(\nu,\nu+1-\lambda-\mu;\nu+1-\lambda;\beta^{-1}) \\ &+ \frac{\mathbf{\Gamma}(\lambda+\mu)\mathbf{\Gamma}(\nu-\lambda)}{\mathbf{\Gamma}(\nu)\mathbf{\Gamma}(\mu)}(-1)^{\lambda}\beta^{-\lambda}\;{}_2F_1(\lambda,1-\mu;\lambda+1-\nu;\beta^{-1}). \end{aligned} \tag{B.17}$$

La condition de validité de cette transformation est $|\beta^{-1}|<1$.
Ecrivons l'intégrale présente dans la formule de la fonction spectrale (la fonction Beta

est traduite en fonction Gamma) :

$$
\begin{aligned}
& \int_0^1 dp(1-p)^{\gamma_c-1}p^{\gamma_c-1/2}\left(1-p\frac{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}\right)^{-\frac{1}{2}}\Theta\big((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)-2p(\omega-r\tilde{k}_r v_F)\big) \\
= \quad & \frac{\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)}{\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1/2)} \\
\times \quad & \Bigg[\Theta\big((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)-2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)\big)\ {}_2F_1\Big(1/2,\gamma_c+1/2;2\gamma_c+1/2;\frac{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}\Big) \\
+ \quad & \Theta((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))\Theta(2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)-(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)) \\
\times \quad & \Bigg\{\frac{\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)}{\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c)}(-1)^{1/2}\left(\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}\right)^{1/2} \\
\times \quad & {}_2F_1\Big(1/2,1-2\gamma_c;1-\gamma_c;\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}\Big) \\
+ \quad & \frac{\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1/2)\mathbf{\Gamma}(-\gamma_c)}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)}(-1)^{\gamma_c+1/2}\left(\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}\right)^{\gamma_c+1/2} \\
\times \quad & {}_2F_1\Big(\gamma_c+1/2,1-\gamma_c;1+\gamma_c;\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}\Big)\Bigg\}\Bigg]. \qquad \text{(B.18)}
\end{aligned}
$$

En introduisant ce résultat dans la formule de la fonction spectrale, on obtient l'expression de la fonction spectrale :

$$
\begin{aligned}
A_{r\sigma}(q,\omega) \quad = \quad & \left(\frac{a}{v_F}\right)^{2\gamma_c}\frac{(1+K_c^{-1})^{1/2}}{(1-K_c^2)^{\gamma_c}}\frac{1}{(1-K_c)^{1/2}}\frac{1}{\mathbf{\Gamma}(1/2)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)} \\
\times \quad & \Bigg\{(\omega-r\tilde{k}_r v_F)^{2\gamma_c-1/2}\Theta(\omega-r\tilde{k}_r v_F)\exp\Big\{\frac{-a\omega}{v_c+v_F}(1+K_c^{-1})\Big\}(\omega+r\tilde{k}_r v_c)^{-1/2} \\
\times \quad & \Bigg[\frac{\mathbf{\Gamma}(\gamma_c)\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)}{\mathbf{\Gamma}(2\gamma_c+1/2)}\Theta\big((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)-2(\omega-r\tilde{k}_r v_F\big) \\
\times \quad & {}_2F_1\Big(1/2,\gamma_c+1/2;2\gamma_c+1/2;\frac{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}\Big) \\
+ \quad & \Theta((1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))\Theta(2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)-(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c))\frac{\sqrt{\pi}\mathbf{\Gamma}(\gamma_c+1/2)}{\mathbf{\Gamma}(1+\gamma_c)} \\
\times \quad & \left(\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}\right)^{\gamma_c+1/2}\ {}_2F_1\Big(\gamma_c+1/2,1-\gamma_c;1+\gamma_c;\frac{(1-K_c)(\omega+r\tilde{k}_r v_c)}{2(\omega-r\tilde{k}_r v_F)}\Big)\Bigg] \\
+ \quad & (\tilde{k}_r\to-\tilde{k}_r,\omega\to-\omega)\Bigg\}. \qquad \text{(B.19)}
\end{aligned}
$$

C

Calcul du courant moyen et des corrélations de courant

Cette annexe est dévolue aux calculs du courant moyen et des corrélations de courant à travers un nanotube de carbone connecté, à ses extrémités, à des électrodes métalliques.

C.1 Courant moyen

On effectue le changement de variables $\tau = t_1 - t_2$ et $\tau' = t - t_{1,2}$ dans la formule (4.15). Le courant moyen à travers un nanotube s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle I(x,t)\rangle &= \frac{\Gamma^2 e v_{\mathrm{F}}}{(2\pi a)^2}\sum_{\eta\eta_1\eta_2 r_1\sigma_1}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{+\infty}d\tau\,\sin(\omega_0\tau)e^{2\pi G_{\sigma_1}^{\varphi\varphi,\eta_1\eta_2}(0,\tau)} \\ &\times\; e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j,\delta}\left(G_{j\delta}^{\phi\phi,\eta_1\eta_2}(0,\tau)+r_1G_{j\delta}^{\phi\theta,\eta_1\eta_2}(0,\tau)+r_1G_{j\delta}^{\theta\phi,\eta_1\eta_2}(0,\tau)+G_{j\delta}^{\theta\theta,\eta_1\eta_2}(0,\tau)\right)} \\ &\times\; \int_{-\infty}^{+\infty}d\tau'\,\partial_x\left(G_{c+}^{\phi\phi,(\eta\eta_1)}(x,\tau')+r_1G_{c+}^{\phi\theta,\eta\eta_1}(x,\tau')-G_{c+}^{\phi\phi,\eta\eta_2}(x,\tau')-r_1G_{c+}^{\phi\theta,(\eta\eta_2)}(x,\tau')\right).\end{aligned} \tag{C.1}$$

Afin d'alléger les notations, le facteur $C^{r_1\sigma_1}$ est introduit et exprime :

$$\begin{aligned}C_{\eta_1\eta_2}^{r_1\sigma_1}(\tau) &= \sin(\omega_0\tau)\,e^{2\pi G_{\sigma_1}^{\varphi\varphi,\eta_1\eta_2}(0,\tau)} \\ &\times\; e^{\frac{\pi}{2}\sum_{j,\delta}\left(G_{j\delta}^{\phi\phi,\eta_1\eta_2}(0,\tau)+r_1G_{j\delta}^{\phi\theta,\eta_1\eta_2}(0,\tau)+r_1G_{j\delta}^{\theta\phi,\eta_1\eta_2}(0,\tau)+G_{j\delta}^{\theta\theta,\eta_1\eta_2}(0,\tau)\right)},\end{aligned} \tag{C.2}$$

qui, une fois les fonctions de Green en présence de contacts injectées, devient :

$$\begin{aligned}C_{\eta_1\eta_2}^{r_1\sigma_1}(\tau) &= \frac{\sin(\omega_0\tau)e^{-i(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau\eta_1\eta_2}{a}\right)}}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ &\times\frac{e^{-\frac{i}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau\eta_1\eta_2}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)}}{\prod_{n=1}^{+\infty}\left((\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2+(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2\right)^{\frac{1}{16}(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+})}}.\end{aligned} \tag{C.3}$$

On définit par la suite $D(\tau)$ le dénominateur de cette expression.
Le calcul du courant moyen nécessite l'écriture de la transformée de Fourier de ce facteur déinie par $\tilde{C}(\Omega) = \int dt e^{i\Omega t} C(t)$. Cependant, son expression dépend des indices Keldysh. Ainsi, lorsque $\eta_1 \neq \eta_2$,

$$\begin{aligned}
\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{+-}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \sin(\omega_0\tau) D^{-1}(\tau) \sin\Big(\Omega\tau + (1+\nu)\arctan\Big(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\Big) \\
&+ \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\Big(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\Big)\arctan\Big(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2 + (nLK_{\mathrm{c}+})^2 - (v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\Big)\Big), \quad \text{(C.4)} \\
\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{-+}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \sin(\omega_0\tau) D^{-1}(\tau) \sin\Big(\Omega\tau - (1+\nu)\arctan\Big(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\Big) \\
&+ \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\Big(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\Big)\arctan\Big(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2 + (nLK_{\mathrm{c}+})^2 - (v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\Big)\Big). \quad \text{(C.5)}
\end{aligned}$$

Ces deux formules sont réelles et possèdent les propriétés suivantes : $\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{\pm\mp}(-\Omega) = -\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{\mp\pm}(\Omega)$ et $\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{+-}(0) = -\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{-+}(0)$.

Lorsque les indices Keldysh η_1 et η_2 sont identiques, le facteur $\tilde{C}^{r_1\sigma_1}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{++}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \sin(\omega_0\tau) D^{-1}(\tau) \sin\big(\Omega\tau\big) e^{-i(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}|\tau|}{a}\right)} \\
&\times\ e^{-\frac{i}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}|\tau|}{a^2 + (nLK_{\mathrm{c}+})^2 - (v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)}, \quad \text{(C.6)} \\
\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{--}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \sin(\omega_0\tau) D^{-1}(\tau) \sin\big(\Omega\tau\big) e^{-i(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}|\tau|}{a}\right)} \\
&\times\ e^{\frac{i}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}|\tau|}{a^2 + (nLK_{\mathrm{c}+})^2 - (v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)}. \quad \text{(C.7)}
\end{aligned}$$

On observe que $\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{\pm\mp}(-\Omega) = -\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{\pm\mp}(\Omega)$. Le calcul du courant moyen utilise également les facteurs $B_{r_1\sigma_1}$ définis par

$$\begin{aligned}
B^{r_1\sigma_1}_{\eta\eta_1}(x,\tau') - B^{r_1\sigma_1}_{\eta\eta_2}(x,\tau') &= \partial_x\big(G^{\phi\phi,\eta\eta_1}_{c+}(x,\tau') + r_1 G^{\phi\theta,\eta\eta_1}_{c+}(x,\tau') \\
&- G^{\phi\phi,\eta\eta_2}_{c+}(x,\tau') - r_1 G^{\phi\theta,\eta\eta_2}_{c+}(x,\tau')\big). \quad \text{(C.8)}
\end{aligned}$$

La transformée de Fourier de ces facteurs permet ainsi d'exprimer $\langle I(x,t)\rangle$ comme :

$$\begin{aligned}
\langle I(x,t)\rangle &= \frac{-\Gamma^2 e v_{\mathrm{F}}}{(2\pi a)^2}\sum_{r_1\sigma_1}\Big[\tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{+-}(0)\Big(\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{++}(x,0) - \tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{+-}(x,0) \\
&+ \tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{-+}(x,0) - \tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{--}(x,0)\Big) \\
&+ \tilde{C}^{r_1\sigma_1}_{-+}(0)\left(\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{+-}(x,0) - \tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{++}(x,0) + \tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{--}(x,0) - \tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{-+}(x,0)\right)\Big]. \quad \text{(C.9)}
\end{aligned}$$

Or, d'après les expressions des fonctions de Green en présence de contacts définies dans l'Annexe A,

$$\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{++}(x,0) = \partial_x G^{\phi\phi,++}_{c+}(x,\Omega=0) = \frac{i\mathrm{sgn}(x)\phi_-(\Omega=0)}{(1+K_{c+})v_F}, \tag{C.10}$$

$$\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{+-}(x,0) = \partial_x G^{\phi\phi,+-}_{c+}(x,\Omega=0) = 0, \tag{C.11}$$

$$\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{-+}(x,0) = \partial_x G^{\phi\phi,-+}_{c+}(x,\Omega=0) = 0, \tag{C.12}$$

$$\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{--}(x,0) = \partial_x G^{\phi\phi,--}_{c+}(x,\Omega=0) = \frac{-i\mathrm{sgn}(x)\phi_-(\Omega=0)}{(1+K_{c+})v_F}, \tag{C.13}$$

avec $\phi_\pm(\Omega=0) = 1/(1\pm b_{c+})$.

En injectant ces expressions dans celle du courant moyen, on obtient :

$$\langle I(x,t)\rangle = \frac{16\Gamma^2 e v_F}{(2\pi a)^2}\frac{\mathrm{sgn}(x)\phi_-(0)}{(1+K_{c+})v_F}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\sin(\omega_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \tag{C.14}$$
$$\times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left((\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2+(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2\right)^{\frac{1}{16}(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+})}},$$

qui, une fois b_{c+} remplacé par son expression dépendant de K_{c+}, devient :

$$\langle I(x,t)\rangle = \frac{8\Gamma^2 e}{(2\pi a)^2}\mathrm{sgn}(x)\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \frac{\sin(\omega_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \tag{C.15}$$
$$\times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left((\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2+(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2\right)^{\frac{1}{16}(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+})}}.$$

C.2 Corrélations de courant

C.2.1 Calcul des facteurs $\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(\Omega)$ et $\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(x(x'),\Omega)$

L'expression des corrélations de courant est définie à l'équation (4.20) et les facteurs $A^{r_1\sigma_1}$ et $B^{r_1\sigma_1}$ aux formules (4.21) et (4.22). Une fois les fonctions de Green en présence

de contacts introduites dans ces définitions, le facteur $A^{r_1\sigma_1}$ s'écrit :

$$A^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(\tau) = \frac{\cos(\omega_0\tau)e^{-i(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau\eta_1\eta_2}{a}\right)}}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \times \frac{e^{-\frac{i}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau\eta_1\eta_2}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)}}{\prod_{n=1}^{+\infty}\left((\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2+(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2\right)^{\frac{1}{16}(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+})}}. \tag{C.16}$$

Les transformées de Fourier de ce facteur en fonction des indices Keldysh η_1 et η_2 sont exprimées par :

$$\begin{aligned}\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{+-}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ \cos(\omega_0\tau)D^{-1}(\tau)\sin\Big(\omega\tau+(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right) \\ &+ \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\Big)\end{aligned} \tag{C.17}$$

$$\begin{aligned}\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{-+}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ \cos(\omega_0\tau)D^{-1}(\tau)\sin\Big(\omega\tau-(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right) \\ &+ \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)\Big)\end{aligned} \tag{C.18}$$

$$\begin{aligned}\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{++}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ \cos(\omega_0\tau)D^{-1}(\tau)\sin\Big(\omega\tau\Big)e^{-i(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F|\tau|}{a}\right)} \\ &\times\ e^{-\frac{i}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F|\tau|}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)}\Big)\end{aligned} \tag{C.19}$$

$$\begin{aligned}\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{--}(\Omega) &= i\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ \cos(\omega_0\tau)D^{-1}(\tau)\sin\Big(\omega\tau\Big)e^{-i(1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F|\tau|}{a}\right)} \\ &\times\ e^{\frac{i}{8}\sum_{n=1}^{+\infty}\left(\frac{b^n_{c+}}{K_{c+}}+(-b_{c+})^nK_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F|\tau|}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right)}\Big).\end{aligned} \tag{C.20}$$

Elles possèdent les propriétés suivantes :

$$\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{+-}(-\Omega) = \tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{-+}(\Omega) \tag{C.21}$$

$$\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{+-}(0) = \tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{-+}(0) \tag{C.22}$$

$$\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{\pm\pm}(\Omega) = \tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{\pm\pm}(-\Omega) \tag{C.23}$$

C.2.2 Corrélations de courant à fréquence nulle

A fréquence nulle, les corrélations de courant s'écrivent :

$$\begin{aligned} S(x,x';\Omega=0) &= \frac{\Gamma^2 e^2 v_{\mathrm{F}}^2}{2(\pi a)^2}\sum_{\eta_1\eta_2 r_1\sigma_1}\eta_1\eta_2\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(0)\Big[\int_{-\infty}^{+\infty}d\tau_1\, B^{r_1\sigma_1}_{-\eta_1}(x,\tau_1)-B^{r_1\sigma_1}_{-\eta_2}(x,\tau_1) \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty}d\tau_2\, B^{r_1\sigma_1}_{+\eta_1}(x',\tau_2)-B^{r_1\sigma_1}_{+\eta_2}(x',\tau_2)\Big], \end{aligned} \tag{C.24}$$

où on rappelle que les facteurs $B^{r_1\sigma_1}$ sont définis par :

$$\begin{aligned} B^{r_1\sigma_1}_{-\eta_1}(x,\tau_1)-B^{r_1\sigma_1}_{-\eta_2}(x,\tau_1) &= \partial_x\Big(G^{\phi\phi,-\eta_1}_{c+}(x,\tau_1)+r_1G^{\phi\theta,-\eta_1}_{c+}(x,\tau_1) \\ &- G^{\phi\phi,-\eta_2}_{c+}(x,\tau_1)-r_1G^{\phi\theta,-\eta_2}_{c+}(x,\tau_1)\Big), \end{aligned} \tag{C.25}$$

$$\begin{aligned} B^{r_1\sigma_1}_{+\eta_1}(x',\tau_2)-B^{r_1\sigma_1}_{+\eta_2}(x',\tau_2) &= \partial_{x'}\Big(G^{\phi\phi,+\eta_1}_{c+}(x',\tau_2)+r_1G^{\phi\theta,+\eta_1}_{c+}(x',\tau_2) \\ &- G^{\phi\phi,+\eta_2}_{c+}(x',\tau_2)-r_1G^{\phi\theta,+\eta_2}_{c+}(x',\tau_2)\Big). \end{aligned} \tag{C.26}$$

Ainsi, la transformée de Fourier de ces facteurs ne donnent lieu qu'à des termes à fréquence nulle :

$$\begin{aligned} S(x,x';\Omega=0) &= \frac{2\Gamma^2 e^2 v_{\mathrm{F}}^2}{(2\pi a)^2}\sum_{\eta\eta_1\eta_2}\eta_1\eta_2\,\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{\eta_1\eta_2}(0) \\ &\times\big(\big(\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{\eta\eta_1}(x,0)-\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{\eta\eta_2}(x,0)\big)\big(\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{-\eta\eta_1}(x',0)-\tilde{B}^{r_1\sigma_1}_{-\eta\eta_2}(x',0)\big)\big). \end{aligned} \tag{C.27}$$

Une fois le développement sur les indices Keldysh effectué et en remplacant les facteurs $\tilde{B}^{r_1\sigma_1}$ par leur expression (voir première section de cette annexe), les corrélations à fréquence nulle deviennent :

$$S(x,x';\Omega=0) = \frac{16\Gamma^2 e^2 v_{\mathrm{F}}^2}{(2\pi a)^2}\tilde{A}^{r_1\sigma_1}_{+-}(0)Q^0_{x,x'}(0), \tag{C.28}$$

avec

$$Q^0_{x,x'}(0)=\frac{K_{\mathrm{c}+}^2\mid\phi_+(0)\mid^2+\mid\phi_-(0)\mid^2\,\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{(1+K_{\mathrm{c}+})^2v_{\mathrm{F}}^2}, \tag{C.29}$$

soit :

$$\begin{aligned} S(x,x';0) &= \frac{32\Gamma^2e^2}{(2\pi a)^2}\frac{1+\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{4}\int_0^{+\infty}d\tau\frac{\cos(\omega_0\tau)}{\big(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\big)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\ &\times\frac{\cos\big((1+\nu)\arctan\big(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\big)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\Big(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^nK_{\mathrm{c}+}\Big)\arctan\Big(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\Big)\big)}{\prod_{n=1}^{\infty}\Big(\big(\frac{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\big)^2+\big(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\big)^2\Big)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^nK_{\mathrm{c}+}\right)}}. \end{aligned} \tag{C.30}$$

En remplacant le coefficient b_{c+} par sa définition en termes des paramètres d'interactions coulombiennes dans les réservoirs et dans le nanotube, les corrélations de courant à fréquence nulle deviennent :

$$S(x,x';0) = \frac{8\Gamma^2 e^2}{(2\pi a)^2}(1+\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_F\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \tag{C.31}$$
$$\times \frac{\cos((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_F\tau}{a}\right)+\frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+}\right)\arctan\left(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}\right))}{\prod_{n=1}^{\infty}\left((\frac{a^2+(nLK_{c+})^2-(v_F\tau)^2}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2+(\frac{2av_F\tau}{a^2+(nLK_{c+})^2})^2\right)^{\frac{1}{16}(\frac{b_{c+}^n}{K_{c+}}+(-b_{c+})^n K_{c+})}}.$$

C.2.3 Corrélations de courant à fréquence finie

La transformée de Fourier des corrélations de courant, lorsque la fréquence est non nulle, s'écrit :

$$\begin{aligned} S(x,x',\Omega) &= \frac{\Gamma^2 e^2 v_F^2}{2(\pi a)^2}\sum_{\eta_1\eta_2 r_1\sigma_1}\eta_1\eta_2\int_{-\infty}^{+\infty}dt_1\int_{-\infty}^{+\infty}dt_2\int_{-\infty}^{+\infty}d\tau\, A_{\eta_1\eta_2}^{r_1\sigma_1}(t_1-t_2) \\ &\times \left[\left(B_{-\eta_1}^{r_1\sigma_1}(x,\tau-t_1)-B_{-\eta_2}^{r_1\sigma_1}(x,\tau-t_2)\right)\left(B_{+\eta_1}^{r_1\sigma_1}(x',\tau-t_1)-B_{+\eta_2}^{r_1\sigma_1}(x',\tau-t_2)\right)\right]. \end{aligned} \tag{C.32}$$

Il s'agit d'une convolution qui, une fois la somme sur les indices Keldysh développée, devient :

$$\begin{aligned} S(x,x';\Omega) &= \frac{\Gamma^2 e^2 v_F^2}{2(\pi a)^2}\sum_{r_1\sigma_1}\Big[\left(2\tilde{A}_{++}(0)-\tilde{A}_{++}(\Omega)+\tilde{A}_{++}(-\Omega)-\tilde{A}_{+-}(0)-\tilde{A}_{-+}(0)\right) \\ &\times \left(\tilde{B}_{-+}(x,\Omega)\tilde{B}_{++}(x',-\Omega)\right) \\ &+ \left(2\tilde{A}_{--}(0)-\tilde{A}_{--}(\Omega)+\tilde{A}_{--}(-\Omega)-\tilde{A}_{+-}(0)-\tilde{A}_{-+}(0)\right) \\ &\times \left(\tilde{B}_{--}(x,\Omega)\tilde{B}_{+-}(x',-\Omega)\right) \\ &+ \left(\tilde{A}_{+-}(-\Omega)+\tilde{A}_{-+}(\Omega)\right)\left(\tilde{B}_{--}(x,\Omega)\tilde{B}_{++}(x',-\Omega)\right) \\ &+ \left(\tilde{A}_{-+}(-\Omega)+\tilde{A}_{+-}(\Omega)\right)\left(\tilde{B}_{-+}(x,\Omega)\tilde{B}_{+-}(x',-\Omega)\right)\Big], \end{aligned} \tag{C.33}$$

où les indices r_1 et σ_1 des facteurs $\tilde{A}$ et $\tilde{B}$ ont été omis afin d'alléger les notations. Les valeurs des différents produits $\tilde{B}_{\mu\nu}(x,\Omega)\tilde{B}_{\mu'\nu'}(x',-\Omega)$ sont :

$$\begin{aligned}
\tilde{B}_{-+}(x,\Omega)\tilde{B}_{++}(x',-\Omega) &= \Theta(\Omega)\left[Q^0_{xx'}(\Omega)e^{-\frac{i\Omega}{v_F}(|x|-|x'|)} + Q^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega}{v_F}(|x|+|x'|)}\right], && \text{(C.34)}\\
\tilde{B}_{--}(x,\Omega)\tilde{B}_{++}(x',-\Omega) &= Q^0_{xx'}(\Omega)e^{-\frac{i\Omega}{v_F}(|x|-|x'|)}, && \text{(C.35)}\\
\tilde{B}_{-+}(x,\Omega)\tilde{B}_{+-}(x',-\Omega) &= \Theta(\Omega)\Big[2Q^0_{xx'}(\Omega)\cos\left(\frac{\Omega}{v_F}(|x|-|x'|)\right)\\
&+ Q^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega}{v_F}(|x|+|x'|)} + Q^+_{xx'}(\Omega)e^{-\frac{i\Omega}{v_F}(|x|+|x'|)}\Big], && \text{(C.36)}\\
\tilde{B}_{--}(x,\Omega)\tilde{B}_{+-}(x',-\Omega) &= \Theta(\Omega)\left[Q^0_{xx'}(\Omega)e^{-\frac{i\Omega}{v_F}(|x|-|x'|)} + Q^- +_{xx'}(\Omega)e^{-\frac{i\Omega}{v_F}(|x|+|x'|)}\right], \\
& && \text{(C.37)}
\end{aligned}$$

où :

$$\begin{aligned}
Q^0_{xx'}(\Omega) &= \frac{K^2_{c+}|\phi_+(\Omega)|^2 + |\phi_-(\Omega)|^2\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{4v_F^2(1+K_{c+})^2}, && \text{(C.38)}\\
Q^-_{xx'}(\Omega) &= \frac{K^2_{c+}(\phi_+(\Omega)^2 - (\phi_-(\Omega))^2\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{4v_F^2(1+K_{c+})^2}, && \text{(C.39)}\\
Q^+_{xx'}(\Omega) &= \frac{K^2_{c+}(\phi^*_+(\Omega))^2 - (\phi^*_-(\Omega))^2\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')}{4v_F^2(1+K_{c+})^2}. && \text{(C.40)}
\end{aligned}$$

Il est important de noter que les corrélations perçues par les détecteurs sont mesurées aux contacts, donc en $|x| = |x'| = L/2$. En utilisant les relations entre les facteurs $\tilde{A}^{r_1\sigma_1}$, la formule des corrélations de courant à fréquence finie devient :

$$\begin{aligned}
S(x,x';\Omega) &= \frac{16\Gamma^2e^2v_F^2}{(2\pi a)^2}Q^0_{xx'}(\Omega)\tilde{A}_{-+}(\Omega) + \frac{32\Gamma^2e^2v_F^2}{(2\pi a)^2}\Theta(\Omega)\mathrm{Re}\left[\left(Q^0_{xx'}(\Omega) + Q^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_F}}\right)\right.\\
&\times \left.\left(\tilde{A}_{++}(0) - \tilde{A}_{++}(\Omega) + \tilde{A}_{+-}(\Omega) - \tilde{A}_{+-}(0)\right)\right]. && \text{(C.41)}
\end{aligned}$$

Finalement, en remplacant $\tilde{A}_{\eta_1\eta_2}$, $Q^0_{xx'}(\Omega)$ et $Q^-_{xx'}(\Omega)$ par leurs expressions respectives, les corrélations de courant à fréquence finie s'écrivent :

$$
\begin{aligned}
S(x,x';\Omega) = {} & \frac{32\Gamma^2 e^2}{(v_{\mathrm{F}}2\pi)^2}\tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\
& \times \frac{\cos\left(\Omega\tau - (1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\right) + \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2 + \left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)}} \\
& - \frac{64\Gamma^2 e^2}{(2\pi v_{\mathrm{F}})^2}\Theta(\Omega)\Big[\mathrm{Re}\left(\tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) + \tilde{Q}^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}}\right)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)\,(\sin(\Omega\tau))}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\
& \times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\right) + \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2 + \left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)}} \\
& - \mathrm{Im}\left(\tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) + \tilde{Q}^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}}\right)\int_0^{+\infty} d\tau \frac{\cos(\omega_0\tau)\,(1-\cos(\Omega\tau))}{\left(1+(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a})^2\right)^{\frac{(1+\nu)}{2}}} \\
& \times \frac{\sin\left((1+\nu)\arctan\left(\frac{v_{\mathrm{F}}\tau}{a}\right) + \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}} + (-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)\arctan\left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}\right)\right)}{\prod_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2-(v_{\mathrm{F}}\tau)^2}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2 + \left(\frac{2av_{\mathrm{F}}\tau}{a^2+(nLK_{\mathrm{c}+})^2}\right)^2\right)^{\frac{1}{16}\left(\frac{b^n_{\mathrm{c}+}}{K_{\mathrm{c}+}}+(-b_{\mathrm{c}+})^n K_{\mathrm{c}+}\right)}}\Big],
\end{aligned}
\tag{C.42}
$$

où

$$
\begin{aligned}
& \mathrm{Re}\left(\tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) + \tilde{Q}^-_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}}\right) = \tilde{Q}^0_{xx'}(\Omega) \\
& + (\frac{v_{\mathrm{F}}}{a})^2\Big(\frac{K^2_{\mathrm{c}+}|\phi_+(\Omega)|^4}{(1+K_{\mathrm{c}+})^2}\Big[\cos\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big((1+b_{\mathrm{c}+}\cos\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big)^2 - b^2\sin^2\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big) \\
& + \sin\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)2b\Big(1+b\cos\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big)\sin\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big] + \frac{\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')|\phi_-(\Omega)|^4}{(1+K_{\mathrm{c}+})^2} \\
& \times\Big[-\cos\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big((1-b_{\mathrm{c}+}\cos\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big)^2 - b^2\sin^2\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big) \\
& + \sin\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)2b\Big(1-b\cos\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big)\sin\left(\frac{\Omega LK_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big]\Big)
\end{aligned}
\tag{C.43}
$$

et

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Im}\left(\tilde{Q}^{0}_{xx'}(\Omega)+\tilde{Q}^{-}_{xx'}(\Omega)e^{\frac{i\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}}\right)=\left(\frac{v_{\mathrm{F}}}{a}\right)^{2}\left(\frac{K_{\mathrm{c}+}^{2}|\phi_{+}(\Omega)|^{4}}{(1+K_{\mathrm{c}+})^{2}}\left[\sin\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)\left(\left(1+b_{\mathrm{c}+}\cos\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)^{2}\right.\right.\\
&\left.-b^{2}\sin^{2}\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)-\cos\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)2b\left(1+b\cos\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)\sin\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\Big]\\
&-\frac{\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(x')|\phi_{-}(\Omega)|^{4}}{(1+K_{\mathrm{c}+})^{2}}\left[\sin\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)\left(\left(1-b_{\mathrm{c}+}\cos\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)^{2}-b^{2}\sin^{2}\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)\right.\\
&\left.\left.+\cos\left(\frac{\Omega L}{v_{\mathrm{F}}}\right)2b\left(1-b\cos\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)\sin\left(\frac{\Omega L K_{\mathrm{c}+}}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right]\right)
\end{aligned}\tag{C.44}$$

D

Equations de Dyson en présence d'écrantage

Dans cette annexe est développé le calcul permettant d'otenir, à partir de la fonction de partition dans le formalisme Matsubara, les fonctions de Green bosoniques du fil quantique, de la pointe de STM et celles mixant leurs champs respectifs.

D.1 Calcul des équations de Dyson

La fonction de partition s'écrit comme une intégrale de chemin sur les champs bosoniques en temps imaginaire [179] :

$$Z[\varphi,\phi,\theta] \quad = \quad \int \mathcal{D}\varphi_\uparrow \mathcal{D}\varphi_\downarrow \mathcal{D}\phi_c \mathcal{D}\phi_s \mathcal{D}\theta_c \mathcal{D}\theta_s e^{-\int d\tau (\mathrm{L}-\mathrm{L}_{\mathrm{aux}})} \ , \tag{D.1}$$

où L est le langrangien total du système composé des trois termes issus des hamiltoniens de la pointe, du fil et d'écrantage.

Le lagrangien du fil quantique a été obtenu dans le deuxième chapitre et s'écrit :

$$\mathrm{L}_{\mathrm{fil}} \quad = \quad -\frac{1}{2}\sum_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx \begin{pmatrix} \phi_j(x,\tau) & \theta_j(x,\tau) \end{pmatrix} G_{fil}^{-1}(x,\tau) \begin{pmatrix} \phi_j(x,\tau) \\ \\ \theta_j(x,\tau) \end{pmatrix} \ , \tag{D.2}$$

où G_{fil} est une matrice 2×2 définie par

$$G_{fil}^{-1}(x,\tau) = \begin{pmatrix} \frac{K_j}{v_j}\partial_\tau^2 + \partial_x v_j K_j \partial_x & i\partial_x\partial_\tau - i\partial_\tau\partial_x \\ i\partial_x\partial_\tau - i\partial_\tau\partial_x & \frac{1}{K_j v_j}\partial_\tau^2 + \partial_x \frac{v_j}{K_j}\partial_x \end{pmatrix} \ . \tag{D.3}$$

Le lagrangien de la pointe s'écrit [95] :

$$\mathrm{L_{STM}} = -\frac{1}{2}\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\varphi_{\sigma'}(y,\tau)(G^{\varphi\varphi}_{\sigma'})^{-1}(y,\tau)\varphi_{\sigma'}(y,\tau)\ , \tag{D.4}$$

où $(G^{\varphi\varphi}_{\sigma'})^{-1}(y,\tau) = \frac{1}{2\pi}\partial_y(i\partial_\tau + u_F\partial_y)$.

Enfin, le hamiltonien décrivant les effets d'écrantage ne portant aucune contribution cinétique, le lagrangien correspondant est :

$$\mathrm{L_{Sc}} = -\sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\int_{-\infty}^{+\infty} dy\varphi_{\sigma'}(y,\tau)G^{-1}_{Sc}(x,y)\theta_c(x,\tau)\ , \tag{D.5}$$

avec $G^{-1}_{Sc}(x,y) = \partial_x\partial_y W(x,y)/(\pi\sqrt{2\pi})$.

L'extraction des fonctions de Green bosoniques nécessite l'introduction des champs auxiliaires η_{ϕ_j}, η_{θ_j} et η_{φ_σ} intervenant dans le lagrangien $\mathrm{L_{aux}}$ défini par :

$$\begin{aligned}\mathrm{L_{aux}} &= \sum_j\int_{-\infty}^{+\infty} dx(\eta_{\phi_j}(x,\tau)\phi_j(x,\tau) + \eta_{\theta_j}(x,\tau)\theta_j(x,\tau)) \\ &\quad + \sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\eta_{\varphi_{\sigma'}}(y,\tau)\varphi_{\sigma'}(y,\tau)\ .\end{aligned} \tag{D.6}$$

Nous commençons le calcul en intégrant sur les degrés de liberté du fil en utilisant la relation $G^{-1}_{fil}(x,\tau)G_{fil}(x,\tau,x',\tau') = \delta(x-x')\delta(\tau-\tau')$. Une fois introduite dans la formule de la fonctionnelle génératrice, on obtient :

$$\begin{aligned}Z[\varphi,\phi,\theta] &= \int D\varphi D\phi D\theta\ A[\phi,\theta]\exp\Bigg\{-\frac{1}{2}\sum_j\int d\mathbf{x}\int d\mathbf{x}' \\ &\times \begin{pmatrix}\eta_{\phi_j}(\mathbf{x}) & \eta_{\theta_j}(\mathbf{x}) + \sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})G^{-1}_{Sc}(x,y)\delta_{jc}\end{pmatrix} \\ &\times G_W(\mathbf{x},\mathbf{x}')\begin{pmatrix}\eta_{\phi_j}(\mathbf{x}') \\ \\ \eta_{\theta_j}(\mathbf{x}') + \sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dy'\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}')G^{-1}_{Sc}(x',y')\delta_{jc}\end{pmatrix} \\ &- \sum_{\sigma'}\int d\mathbf{y}\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y})\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}) - \frac{1}{2}\sum_{\sigma'}\int d\mathbf{y}\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})(G^{\varphi\varphi}_{\sigma'})^{-1}(\mathbf{y})\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})\Bigg\}\ ,\end{aligned} \tag{D.7}$$

où, afin d'alléger les notations, on a introduit δ_{jc} car seul le secteur de la charge est affecté par l'écrantage. De plus, le label $\mathbf{x}$ ($\mathbf{y}$) dénote le couple de coordonnées (x,τ) (respectivement (y,τ)) et $\int d\mathbf{x} \equiv \int d\tau\int_{-\infty}^{+\infty} dx$ (respectivement $\int d\mathbf{y} \equiv \int d\tau\int_{-\infty}^{+\infty} dy$).

Ainsi

$$
\begin{aligned}
A[\phi,\theta] &= \exp\left\{\frac{1}{2}\sum_j \int d\mathbf{x}\int d\mathbf{x}'\right. \\
&\times \left[\phi_j(\mathbf{x}) - \eta_{\phi_j}(\mathbf{x})G_W(\mathbf{x};\mathbf{x}')\ \theta_j(\mathbf{x}) - \left(\eta_{\theta_j}(\mathbf{x}) + \sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})G_{Sc}^{-1}(x,y)\delta_{jc}\right) G_W(\mathbf{x},\mathbf{x}')\right] \\
&\times G_W^{-1}(\mathbf{x};\mathbf{x}')\left(\begin{array}{c}\phi_j(\mathbf{x}') - \eta_{\phi_j}(\mathbf{x}')G_W(\mathbf{x};\mathbf{x}') \\ \\ \theta_j(\mathbf{x}') - (\eta_{\theta_j}(\mathbf{x}') + \sum_{\sigma'}\int_{-\infty}^{+\infty} dy'\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}')G_{Sc}^{-1}(x',y')\delta_{jc})G_W(\mathbf{x},\mathbf{x}')\end{array}\right)\Bigg\} .
\end{aligned}
\tag{D.8}
$$

L'étape de calcul suivante consiste à regrouper les termes lineaires en $\varphi_{\sigma'}$. Cela permet de mettre en lumière l'inverse du propagateur $G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}$ en présence d'écrantage. Alors,

$$
\begin{aligned}
&Z[\varphi,\phi,\theta] = \int D\varphi D\phi D\theta\ A[\phi,\theta]\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_j\Big[\int d\mathbf{x}\int d\mathbf{x}'(\eta_{\phi_j}(\mathbf{x})\ \eta_{\theta_j}(\mathbf{x}))G_W(\mathbf{x},\mathbf{x}')\begin{pmatrix}\eta_{\phi_j}(\mathbf{x}') \\ \\ \eta_{\theta_j}(\mathbf{x}')\end{pmatrix}\right. \\
&-2\sum_{\sigma'}\int d\mathbf{y}\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y})\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}) - \sum_{\sigma'}\int d\mathbf{y}\int d\mathbf{y}'\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})(\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}')\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}') \\
&+\sum_{\sigma',j}\delta_{jc}\int d\mathbf{x}\int d\mathbf{x}'\int_{-\infty}^{+\infty} dy'\left[\eta_{\phi_j}(\mathbf{x})G_j^{\phi\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}') + \eta_{\theta_j}(\mathbf{x})G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}')\right]\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}')G_{Sc}^{-1}(x',y') \\
&\left.+\sum_{\sigma',j}\delta_{jc}\int d\mathbf{x}\int d\mathbf{x}'\int_{-\infty}^{+\infty} dy\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})G_{Sc}^{-1}(x,y)\left[G_j^{\theta\phi}(\mathbf{x};\mathbf{x}')\eta_{\phi_j}(\mathbf{x}') + G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}')\eta_{\theta_j}(\mathbf{x}')\right]\Big]\right\} ,
\end{aligned}
\tag{D.9}
$$

où

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}') = (G_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}')\delta(y-y')\delta(\tau-\tau') \\
- \quad &\delta_{jc}\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x}\int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x}' G_{Sc}^{-1}(x,y)G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}')G_{Sc}^{-1}(x',y') .
\end{aligned}
\tag{D.10}
$$

Suite au développement de la matrice G_{fil}, on utilise les propriétés des fonctions de Green bosoniques dans le formalisme Matsubara : $G_j^{\phi\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}') = G_j^{\theta\phi}(\mathbf{x}';\mathbf{x})$ et $G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}') = G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x}';\mathbf{x})$. De plus, en utilisant la relation :

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}')\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(\mathbf{y};\mathbf{y}') &= \mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(\mathbf{y};\mathbf{y}')(\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}') \\
&= \delta(y-y')\delta(\tau-\tau') ,
\end{aligned}
\tag{D.11}
$$

la fonctionnelle génératrice s'écrit :

$$
\begin{aligned}
Z[\varphi,\phi,\theta] &= \int D\varphi D\phi D\theta\ A[\phi,\theta]B[\varphi]\exp\{-\frac{1}{2}\sum_j\int d\mathbf{x}\int d\mathbf{x}'(\eta_{\phi_j}(\mathbf{x})\ \eta_{\theta_j}(\mathbf{x}))G_W(\mathbf{x},\mathbf{x}')\begin{pmatrix}\eta_{\phi_j}(\mathbf{x}')\\ \\ \eta_{\theta_j}(\mathbf{x}')\end{pmatrix}\\
+\ & \frac{1}{2}\delta_{jc}\sum_{\sigma',j}\int d\mathbf{y}\int d\mathbf{y}'\int d\mathbf{x_1}\int d\mathbf{x_2'}\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1'\int_{-\infty}^{+\infty}dx_2\\
\times\ & \Big[\eta_{\phi_j}(\mathbf{x_1})G_j^{\phi\theta}(\mathbf{x_1};x_1',\tau)G_{Sc}^{-1}(x_1',y')+\eta_{\theta_j}(\mathbf{x_1})G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x_1};x_1',\tau)G_{Sc}^{-1}(x_1',y')-\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y})\Big](\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}')\\
\times\ & \Big[G_{Sc}^{-1}(x_2,y')G_j^{\phi\theta}(\mathbf{x_2'};x_2,\tau')\eta_{\phi_j}(\mathbf{x_2'})+G_{Sc}^{-1}(x_2,y')G_j^{\theta\theta}(\mathbf{x_2'};x_2,\tau')\eta_{\theta_j}(\mathbf{x_2'})-\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y}')\Big]\}\ ,
\end{aligned}
\tag{D.12}
$$

avec

$$
\begin{aligned}
B[\varphi] &= \exp\Bigg\{\frac{1}{2}\sum_{\sigma'}\int d\mathbf{y}\int d\mathbf{y}'\Big[\Big(\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y})+(-M_1(\mathbf{y})-M_2(\mathbf{y})+\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y}))\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(\mathbf{y};\mathbf{y}')\Big)\\
&\times\ (\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi})^{-1}(\mathbf{y};\mathbf{y}')\Big(\varphi_{\sigma'}(\mathbf{y}')+\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(\mathbf{y};\mathbf{y}')(-M_1(\mathbf{y})-M_2(\mathbf{y})+\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y}))\Big)\\
&-\ (-M_1(\mathbf{y})-M_2(\mathbf{y})+\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y}))\mathbf{G}_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(\mathbf{y};\mathbf{y}')(-M_1(\mathbf{y}')-M_2(\mathbf{y}')+\eta_{\varphi_{\sigma'}}(\mathbf{y}'))\Big]\Bigg\}\ ,
\end{aligned}
\tag{D.13}
$$

où $M_1(\mathbf{y})$ (respectivement $M_2(\mathbf{y})$) contient les termes mixtes en η_{ϕ_j} et en $\varphi_{\sigma'}$ (respectivement η_{θ_j} et $\varphi_{\sigma'}$) dans l'équation (D.9).

Les fonctions de Green bosoniques dans le formalisme Matsubara s'obtiennent de l'équation (D.12) en dérivant la fonctionnelle génératrice par rapport aux champs auxiliaires associés :

$$
\langle \mathrm{T}_\tau(\theta_j(\mathbf{x})\theta_j(\mathbf{x}'))\rangle \ = \ \mathbf{G}_j^{\theta\theta}(\mathbf{x};\mathbf{x}')=\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\eta_{\theta_j}(\mathbf{x})\partial\eta_{\theta_j}(\mathbf{x}')}\ .
\tag{D.14}
$$

Une fois cette opération effectuée, on obtient les équations de Dyson des fonctions de Green bosoniques. Par exemple :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{G}_j^{\theta\theta}(x,\tau;x'\tau') &= G_j^{\theta\theta}(x,\tau;x'\tau')+\delta_{jc}\sum_{\sigma'}\int d\tau_1\int d\tau_2\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1\int_{-\infty}^{+\infty}dx_2\int_{-\infty}^{+\infty}dy_1\int_{-\infty}^{+\infty}dy_2\\
&\times\ G_j^{\theta\theta}(x,\tau;x_1,\tau_1)G_{Sc}^{-1}(x_1,y_1)\mathbf{G}_{T,\sigma'}(y_1,\tau_1,y_2,\tau_2)G_{Sc}^{-1}(x_2,y_2)G_j^{\theta\theta}(x_2,\tau_2;x',\tau')\ .
\end{aligned}
\tag{D.15}
$$

D'autres combinaisons sont possibles et permettent, entre autres, l'obtention des fonc-

tions de Green mixtes. Ainsi,

$$\mathbf{G}^{\varphi\theta}_{j\sigma'}(y,\tau;x',\tau') = -\delta_{jc}\int d\tau_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(y,\tau,y_1,\tau_1) G^{-1}_{Sc}(x_1,y_1) G^{\theta\theta}_{j}(x_1,\tau_1;x',\tau') \ . \tag{D.16}$$

Afin de déterminer les équations de Dyson pour les fonctions de Green de la pointe, il est nécessaire de reprendre ce calcul en intégrant, cette fois-ci, sur les degrés de liberté de la pointe en premier. Alors, la fonction $\mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}$ est définie par :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(y,\tau;y',\tau') &= G^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(y,\tau;y',\tau') + \sum_j \delta_{jc}\int d\tau_1 \int d\tau_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 \\ &\times\ G^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(y,\tau;y_1,\tau_1) G^{-1}_{Sc}(x_1,y_1) \mathbf{G}^{\theta\theta}_{j}(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2) G^{-1}_{Sc}(x_2,y_2) G^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(y_2,\tau_2;y',\tau') \ .\end{aligned} \tag{D.17}$$

E

Fonctions de Green bosoniques en fréquence

Nous rappelons ici l'expression des fonctions de Green bosoniques en l'absence d'écrantage dans le formalisme Matsubara.

Pour un fil quantique de longueur infinie et en l'absence d'écrantage, les fonctions de Green bosoniques à température nulle sont :

$$G_c^{\phi\phi}(x,x',\omega) = \frac{1}{2|\omega|K_c} e^{-|\omega||x-x'|/v_c} , \tag{E.1}$$

$$G_c^{\theta\theta}(x,x',\omega) = \frac{K_c}{2|\omega|} e^{-|\omega||x-x'|/v_c} , \tag{E.2}$$

$$\begin{aligned} G_c^{\theta\phi}(x,x',\omega) &= G_c^{\phi\theta,0}(x,x',\omega) \\ &= \frac{\mathrm{sgn}(x-x')}{2\omega} e^{-|\omega||x-x'|/v_c} . \end{aligned} \tag{E.3}$$

La fonction de Green bosoniques de la pointe dans la situation étudiée, c'est-à-dire en $y = y' = 0$, à température nulle est :

$$G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(0,0,\omega) = \frac{\pi}{|\omega|} . \tag{E.4}$$

F

Fonctions de Green bosoniques en présence d'écrantage

F.1 Fonctions de Green bosoniques du fil en présence d'écrantage

Par un processus simple d'itération, l'équation de Dyson de la fonction de Green bosoniques $\mathbf{G}_c^{\theta\theta}$ dans le secteur de charge affecté par les interactions s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x,\tau;x'\tau') &= G_c^{\theta\theta}(x,\tau;x'\tau') + \sum_{\sigma'}\int d\tau_1 \int d\tau_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 \\ &\times G_c^{\theta\theta}(x,\tau;x_1,\tau_1) G_{Sc}^{-1}(x_1,y_1) G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(y_1,\tau_1;y_2,\tau_2) G_{Sc}^{-1}(x_2,y_2) \mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x_2,\tau_2;x',\tau') \ ,\end{aligned} \tag{F.1}$$

où l'on rappelle l'expression de l'opérateur G_{Sc}^{-1} :

$$G_{Sc}^{-1}(x,y) = \frac{1}{\pi\sqrt{2\pi}}\partial_x\partial_y W(x,y) = \frac{W_0}{\pi\sqrt{2\pi}}\delta(y)\delta(x) \ . \tag{F.2}$$

L'invariance par translation temporelle permet d'effectuer la transformée de Fourier de cette équation de Dyson et d'obtenir :

$$\mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x,x',\omega) = G_c^{\theta\theta}(x,x',\omega) + \sum_{\sigma'}\frac{W_0^2}{2\pi^3} G_c^{\theta\theta}(x,0,\omega) G_{\sigma'}^{\varphi\varphi}(0,0,\omega) \mathbf{G}_c^{\theta\theta}(0,x',\omega) \ . \tag{F.3}$$

Les fonctions de Green dans le formalisme Matsubara en l'absence d'écrantage ont été définies dans l'annexe précédente. Ainsi, en les remplaçant par leur expression dans

l'équation (F.3) et en faisant la somme sur l'indice de spin σ', il vient que :

$$\mathbf{G}_c^{\theta\theta}(x,x',\omega) \quad = \quad G_c^{\theta\theta}(x,x',\omega) + \frac{K_c\omega_{Sc}^2}{2|\omega|(\omega^2-\omega_{Sc}^2)} e^{-|\omega|K_c\frac{|x|+|x'|}{v_F}} \ , \tag{F.4}$$

où $\omega_{Sc}^2 \equiv K_c W_0^2/(2\pi^2)$ est la fréquence associée à l'écrantage. Après avoir pratiqué une transformée de Fourier inverse, on trouve, pour le second terme qui correspond à la partie d'écrantage :

$$\mathbf{G}_{c,Sc}^{\theta\theta}(x,x',\tilde{\tau}) \quad = \quad \frac{K_c\omega_{Sc}^2}{4\pi}\sum_r \int_0^{+\infty} d\omega \frac{e^{\omega\left(ir\tilde{\tau}-K_c\frac{|x|+|x'|}{v_F}\right)}}{\omega(\omega^2-\omega_{Sc}^2)} \ . \tag{F.5}$$

La fonction apparaîssant dans l'équation (F.5) peut être intégrée :

$$\begin{aligned}\int d\omega \frac{e^{\omega Z_r}}{\omega(\omega^2-\omega_{Sc}^2)} &= -\mathrm{Ei}\left(\omega Z_r\right) \\ &+\frac{1}{2}\left[e^{\omega_{Sc}Z_r}\mathrm{Ei}\left((\omega-\omega_{Sc})Z_r\right) + e^{-\omega_{Sc}Z_r}\mathrm{Ei}\left((\omega+\omega_{Sc})Z_r\right)\right] \ ,\end{aligned} \tag{F.6}$$

où Ei est la fonction d'exponentielle intégrale, et $Z_r \equiv ir\tilde{\tau} - K_c(|x|+|x'|)/v_F$.

Le passage entre formalismes Matsubara et Keldysh est obtenu par un prolongement analytique sur le temps $\tilde{\tau} \ \rightarrow \ i\tilde{t} + \tau_0$ où $\tau_0 = a/v_F$. Cela permet de retrouver la partie d'écrantage du corrélateur $\mathbf{G}_c^{\theta\theta,-+}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{c,Sc}^{\theta\theta,-+}(x,x',\tilde{t}) = \frac{K_c}{8\pi}\sum_r \Bigg[& 2i\pi r\cosh\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \\ & +2\ln\left(\chi_r\right) - e^{\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\chi_r\right) - e^{-\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\chi_r\right)\Bigg] \ ,\end{aligned} \tag{F.7}$$

où $\chi_r \equiv -r\tilde{t} - K_c(|x|+|x'|)/v_F + iar/v_F$ et où l'on a soustré les termes $\mathbf{G}_{c,Sc}^{\theta\theta,-+}(x,x,0)/2$ et $\mathbf{G}_{c,Sc}^{\theta\theta,-+}(x',x',0)/2$ afin de respecter la définition choisie pour des fonctions de Green. Les quatre fonctions de Green Keldysh, qui correspondent aux quatre arrangements possibles des indices η et η' sur les branches du contour Keldysh,

sont les élements de la matrice 2×2 définie par :

$$\mathbf{G}^{\theta\theta}_{c(K)}(x,x',\tilde{t}) = \begin{pmatrix} \begin{array}{ll} \tilde{t} > 0 \ : & \mathbf{G}^{\theta\theta}_{c}(x,x',\tilde{t}) \\ \tilde{t} < 0 \ : & \mathbf{G}^{\theta\theta}_{c}(x',x,-\tilde{t}) \end{array} & \mathbf{G}^{\theta\theta}_{c}(x',x,-\tilde{t}) \\ \mathbf{G}^{\theta\theta}_{c}(x,x',\tilde{t}) & \begin{array}{ll} \tilde{t} > 0 \ : & \mathbf{G}^{\theta\theta}_{c}(x',x,-\tilde{t}) \\ \tilde{t} < 0 \ : & \mathbf{G}^{\theta\theta}_{c}(x,x',\tilde{t}) \end{array} \end{pmatrix} . \tag{F.8}$$

De manière similaire, le calcul des autres corrélateurs permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{\phi\phi,-+}_{c,Sc}(x,x',\tilde{t}) &= \frac{\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(-x')}{8\pi K_c} \sum_r \Big[2i\pi r \cosh\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \\ &+ 2\ln\left(\chi_r\right) - e^{\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\chi_r\right) - e^{-\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \Big] , \end{aligned} \tag{F.9}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{\phi\theta,-+}_{c,Sc}(x,x',\tilde{t}) &= \frac{\mathrm{sgn}(x)}{8\pi K_c} \sum_r \Big[2i\pi r \cosh\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) + 2\ln\left(\chi_r\right) \\ &- e^{\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\chi_r\right) - e^{-\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \Big] , \end{aligned} \tag{F.10}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{\theta\phi,-+}_{c,Sc}(x,x',\tilde{t}) &= \frac{\mathrm{sgn}(x)\mathrm{sgn}(-x')}{8\pi K_c} \sum_r \Big[2i\pi r \cosh\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \\ &+ 2\ln\left(\chi_r\right) - e^{\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\chi_r\right) - e^{-\omega_{Sc}\chi_r}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\chi_r\right) \Big] . \end{aligned} \tag{F.11}$$

F.2 Fonctions de Green bosoniques de la pointe en présence d'écrantage

De l'équation (5.18), l'équation de Dyson de la fonction de Green de la pointe, en féquence et en $y = y' = 0$, s'écrit :

$$\mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega) = G^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega) + \frac{W_0^2}{\pi^3} G^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega) G^{\theta\theta}_{c}(0,0,\omega) \mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega) , \tag{F.12}$$

où l'on suppose que la pointe de STM est non magnétique. Finalement, l'équation précédente devient :

$$\mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega) = G^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega) + \frac{\pi\omega^2_{Sc}}{|\omega|(\omega^2-\omega^2_{Sc})} \ . \tag{F.13}$$

La transformée de Fourier inverse conduit à une expression similaire à celle obtenue pour les fonctions de Green bosoniques du fil quantique. Ainsi, une fois l'intégrale sur toutes les fréquences faites, le passage du formalisme Matsubara à celui de Keldysh mène à l'expression de la partie d'écrantage suivante :

$$\begin{aligned}\mathbf{G}^{\varphi\varphi,-+}_{\sigma',Sc}(0,0,\tilde{t}) &= \frac{1}{4}\sum_r \left[2\ln\left(-r\tilde{t}+ir\frac{a}{v_{\mathrm{F}}}\right) - e^{\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_{\mathrm{F}}}\right)}\mathrm{Ei}\left(-\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)\right.\\ &- \left. e^{-\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_{\mathrm{F}}}\right)}\mathrm{Ei}\left(\omega_{Sc}\left(\tilde{t}-i\frac{a}{v_{\mathrm{F}}}\right)\right)\right] \ . \end{aligned} \tag{F.14}$$

F.3 Fonctions de Green bosoniques mixtes

En fréquence, l'équation de Dyson des fonctions de Green bosoniques mixtes aux positions $y = x' = 0$ s'écrit :

$$\mathbf{G}^{\varphi\theta}_{j\sigma'}(0,0,\omega) = \frac{-W_0}{\pi\sqrt{2\pi}}\sum_{\sigma'}\mathbf{G}^{\varphi\varphi}_{\sigma'}(0,0,\omega)G^{\theta\theta}_j(0,0,\omega) \ , \tag{F.15}$$

qui devient, une fois les expressions des focntions de Green bosoniques en l'absence d'écrantage introduites :

$$\mathbf{G}^{\varphi\theta}_{j\sigma'}(0,0,\omega) = -\delta_{jc}\frac{\sqrt{\pi K_{\mathrm{c}}}}{2}\frac{\omega_{Sc}}{\omega^2-\omega_{Sc}} \ . \tag{F.16}$$

Après avoir intégré sur toutes les fréquences puis en partiquant un prolongement analytique, on obtient :

$$\mathbf{G}^{\varphi\theta,-+}_{j\sigma'}(0,0,\tilde{t}) = \frac{\delta_{jc}}{4}\sqrt{\frac{K_{\mathrm{c}}}{2}}\mathrm{sgn}(i\tilde{t}+\tau_0)\sin(\omega_{Sc}(i\tilde{t}+\tau_0)) \ . \tag{F.17}$$

Suivant le même procédé, les autres fonctions de Green mixtes s'écrivent :

$$\mathbf{G}^{\theta\varphi,-+}_{j\sigma'}(0,0,\tilde{t}) = \frac{\delta_{jc}}{4}\sqrt{\frac{K_{\mathrm{c}}}{2}}\mathrm{sgn}(i\tilde{t}+\tau_0)\sin(\omega_{Sc}(i\tilde{t}+\tau_0)) \ , \tag{F.18}$$

$$\mathbf{G}^{\varphi\phi,-+}_{j\sigma'}(0,0,\tilde{t}) = 0 \ , \tag{F.19}$$

$$\mathbf{G}^{\varphi\theta,-+}_{j\sigma'}(0,0,\tilde{t}) = 0 \ . \tag{F.20}$$

Liste des publications

- **Finite size effects, super- and sub-poissonian noise in a nanotube connected to leads**,
  M. Guigou, A. Popoff, T. Martin, and A. Crépieux, Phys. Rev. B **76**, 045104 (2007).

- **Photo-assisted shot noise in Coulomb interacting systems**,
  A. Crépieux, M. Guigou, A. Popoff, P. Devillard, T. Martin, Proceedings des 6e Rencontres du Vietnam, Hanoi (2006).

- **Screening of a Luttinger liquid wire by a STM tip : I. Spectral properties**,
  M. Guigou, T. Martin, and A. Crepieux, Phys. Rev. B **80**, 045420 (2009).

- **Screening of a Luttinger liquid wire by a STM tip : II. Transport properties**,
  M. Guigou, T. Martin, and A. Crepieux, Phys. Rev. B **80**, 045421 (2009).

Bibliographie

[1] R. Landauer. *IBM J. Res. Dev.*, 1 :233, 1957. (Cité pages 1, 28 et 34.)

[2] R. Landauer. *Phil. Mag.*, 21 :863, 1970. (Cité pages 1 et 34.)

[3] B. J. van Wees et al. *Phys. Rev. Lett.*, 60 :848, 1988. (Cité pages 1, 7 et 34.)

[4] W. Schottky. *Annalen der Physik*, 57 :541, 1918. (Cité pages 2, 38 et 96.)

[5] G. B. Lesovik, T. Martin, and J. Torres. *Phys. Rev. B*, 60 :11935, 1999. (Cité pages 2 et 39.)

[6] X. Jehl et al. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :1660, 1999. (Cité pages 2 et 39.)

[7] A. A. Kozhevnikov, R. J. Schoelkopf, and D. E. Prober. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :3398, 2000. (Cité pages 2 et 39.)

[8] R. Cron, M. F. Goffman, D. Esteve, and C. Urbina. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4104, 2001. (Cité pages 2 et 39.)

[9] L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin, and B. Etienne. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :2526, 1997. (Cité pages 2 et 39.)

[10] R. de Picciotto et al. *Nature*, 389 :162, 1997. (Cité pages 2 et 39.)

[11] M. Reznikov et al. *Nature*, 399 :238, 1999. (Cité pages 2 et 39.)

[12] I. Safi. *Annales de Physique*, 22 :463, 1997. (Cité pages 2, 61 et 107.)

[13] K. V. Pham, M. Gabay, and P. Lederer. *Phys. Rev. B*, 61 :16397, 2000. (Cité pages 2, 106 et 107.)

[14] A. Crépieux, R. Guyon, P. Devillard, and T. Martin. *Phys. Rev. B*, 67 :205408, 2003. (Cité pages 2, 95, 99, 103, 117, 121, 126 et 145.)

[15] R. H. Koch, D. J. van Harlingen, and J. Clarke. *Phys. Rev. B*, 26 :74, 1982. (Cité pages 2, 47, 48 et 113.)

[16] R. J. Schoelkopf et al. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :3370, 1997. (Cité pages 2, 47 et 113.)

[17] P. M. Billangeon, F. Pierre, H. Bouchiat, and R. Deblock. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :136804, 2006. (Cité pages 2, 48 et 113.)

[18] G. B. Lesovik and R. Loosen. *JETP Lett.*, 65 :295, 1997. (Cité pages 2, 48, 102 et 113.)

[19] R. Aguado and L. P. Kouwenhoven. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :1986, 2000. (Cité pages 2, 45, 49, 113 et 150.)

[20] M. Creux, A. Crépieux, and T. Martin. *Phys. Rev. B.*, 74 :115325, 2006. (Cité pages 2, 49 et 113.)

[21] L. D. Landau. *Sov. Phys. JETP*, 8 :70, 1959. (Cité pages 2 et 23.)

[22] S. Tomonaga. *Prog. Theor. Phys.*, 5 :544, 1950. (Cité pages 2 et 51.)

[23] J.M. Lüttinger. *J. Math. Phys.*, 4 :1154, 1963. (Cité pages 2, 51 et 55.)

[24] S. Tarucha, T. Honda, and T. Saku. *Solid State Commun.*, 94 :413, 1995. (Cité page 3.)

[25] M. Bockrath et al. *Nature*, 397 :598, 1999. (Cité pages 3, 93 et 96.)

[26] L. V. Keldysh. *Sov. Phys. JETP*, 20 :1018, 1965. (Cité pages 3, 70, 72, 100 et 145.)

[27] N. W. Ashcroft and D. Mermin. *Solid state physics*. Saunders College Plublishing, New York, 1976. (Cité pages 7, 8 et 18.)

[28] A. Tonomura et al. *American Journal of Physics*, 57 :117, 1989. (Cité page 7.)

[29] K. K. Choi, D. C. Tsui, and K. Alavi. *Phys. Rev. B*, 36 :7751, 1987. (Cité page 8.)

[30] Y. Aharonov and D. Bohm. *Phys. Rev.*, 115 :485, 1959. (Cité page 10.)

[31] R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz. *Phys. Rev. Lett.*, 54 :2696, 1985. (Cité page 11.)

[32] A. Bachtold. *Nature*, 393 :673, 1999. (Cité page 11.)

[33] B. Grbic et al. *Physica E*, 40 :1273, 2008. (Cité page 11.)

[34] A. M. Fisher et al. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :096405, 2009. (Cité page 11.)

[35] P. W. Anderson. *Phys. Rev.*, 109 :1492, 1958. (Cité page 11.)

[36] B. A. van Tiggelen, A. Lagendijk, and D. S. Wiersma. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4333, 2000. (Cité page 12.)

[37] S. E. Skipetrov and B. A. van Tiggelen. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :113901, 2004. (Cité page 12.)

[38] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. *Phys. Rev. Lett.*, 42 :673, 1979. (Cité pages 12 et 13.)

[39] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan. *Rev. Mod. Phys.*, 57 :287, 1985. (Cité page 13.)

[40] A. B. Fowler, A. Hartstein, and R. A. Webb. *Phys. Rev. Lett.*, 48 :196, 1982. (Cité page 13.)

[41] P. A. Lee, A. Douglas Stone, and H. Fukuyama. *Phys. Rev. B*, 35 :1039, 1987. (Cité pages 13 et 14.)

[42] D. Mailly, M. Sanquer, J.-L. Pichard, and P. Pari. *Europhys. Lett.*, 8 :471, 1989. (Cité page 14.)

[43] Y. Alhassid. *Rev. Mod. Phys.*, 72 :895, 2000. (Cité page 16.)

[44] P. Drüde. *Annalen der Physik*, 306 :566, 1900. (Cité page 17.)

[45] A. Sommerfeld and H. Bethe. *Elektronentheorie der Metalle*. Springer Verlag, Heidelberg, 1933. (Cité page 18.)

[46] D. J. Thouless. *Phil. Mag.*, 32 :877, 1975. (Cité page 19.)

[47] R. Kubo. *J. Phys. Soc. Japan*, 12 :570, 1957. (Cité pages 19 et 69.)

[48] D. A. Grennwood. *Proc. Phys. Soc. London*, 71 :585, 1958. (Cité pages 19 et 69.)

[49] R. Kubo, M. Toba, and N. Hashitsume. *Statistical physics II : nonequilibrium statistical mechanics*. Springer Verlag, Berlin, 1991. (Cité page 19.)

[50] E. Schrödinger. *Annalen der Physik*, 79 :621, 1926. (Cité page 19.)

[51] D. R. Hartree. *Proc. R. Soc. London*, A113 :621, 1928. (Cité page 20.)

[52] V. Fock. *Z. Phys.*, 61 :126, 1930. (Cité page 20.)

[53] J. C. Slater. *Phys. Rev.*, 34 :1293, 1929. (Cité page 20.)

[54] L. H. Thomas. *Proc. Cambridge Philo. Soc.*, 23 :542, 1927. (Cité page 22.)

[55] E. Fermi. *Z. Phys.*, 48 :73, 1928. (Cité page 22.)

[56] J. Lindhard. *MAT.-Fys. Medd.*, 28 :8, 1954. (Cité page 22.)

[57] H. J. Schulz, G. Cuniberti, and P. Pieri. *cond-mat*, page 07366, 1998. (Cité pages 25, 26, 27, 56 et 86.)

[58] D. Pines and P. Nozières. *Theory of quantum liquids*. W. A. Benjamin, Menlo Parko, California, 1966. (Cité page 25.)

[59] M. Büttiker. *Phys. Rev. Lett.*, 57 :1761, 1986. (Cité pages 30 et 34.)

[60] T. Martin and R. Landauer. *Phys. Rev. B*, 45 :1742, 1992. (Cité pages 30, 41, 42, 44 et 105.)

[61] M. Büttiker. *Phys. Rev. B*, 46 :12485, 1992. (Cité pages 30, 41, 42 et 106.)

[62] Y. M. Blanter and M. Büttiker. *Phys. Rep.*, 1 :336, 2000. (Cité pages 30 et 44.)

[63] P. Mehta and N. Andrei. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :216802, 2006. (Cité page 34.)

[64] E. N. Economou and C. M. Soukoulis. *Phys. Rev. Lett.*, 46 :618, 1981. (Cité page 35.)

[65] A. Abdellaoui and F. Benamira. *Proceedings of the VII. Petra School of Physics*, 2000. (Cité page 35.)

[66] R. Landauer. *Phys. Lett.*, 85A :91, 1981. (Cité page 35.)

[67] R. de Picciotto et al. *Nature*, 411 :51, 2001. (Cité page 35.)

[68] P. Dutta and M. P. Horn. *Rev. Mod. Phys.*, 53 :497, 1981. (Cité page 36.)

[69] M. B. Weissman. *Rev. Mod. Phys.*, 60 :537, 1988. (Cité page 36.)

[70] S. Feng, P. A. Lee, and A. D. Stone. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :1960, 1986. (Cité page 36.)

[71] J. B. Johnson. *Phys. Rev*, 32 :97, 1928. (Cité page 37.)

[72] H. Nyquist. *Phys. Rev*, 32 :97, 1928. (Cité page 37.)

[73] G. B. Lesovik. *JETP Lett.*, 49 :592, 1989. (Cité page 40.)

[74] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics part. 1*. Butterworth Heinemann, 1997. (Cité page 40.)

[75] M. Büttiker. *Phys. Rev. Lett.*, 65 :2901, 1990. (Cité page 41.)

[76] H. E. van den Brom and J. M. van Ruitenbeck. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :1526, 1999. (Cité page 41.)

[77] A. Kumar. *Phys. Rev. Lett.*, 76 :2778, 1996. (Cité page 41.)

[78] M. Reznikov et al. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :3340, 1995. (Cité page 41.)

[79] L. Di Carlo. *Phys. Rev. Lett.*, 97 :036810, 2006. (Cité page 41.)

[80] L. Di Carlo. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :156801, 2008. (Cité page 41.)

[81] H. Birk, M. J. M. de Jong, and C. Schonenberg. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :1610, 1995. (Cité page 42.)

[82] R. Hanbury-Brown and R. Q. Twiss. *Nature*, 177 :27, 1956. (Cité pages 43, 95 et 105.)

[83] W. D. Oliver et al. *Science*, 284 :299, 1999. (Cité page 44.)

[84] M. Henny et al. *Science*, 284 :296, 1999. (Cité page 44.)

[85] H. Kiesel, A. Renz, and F. Hasselbach. *Nature*, 218 :393, 2002. (Cité page 44.)

[86] S.-R Eric Yang. *Solid State Communications*, 81 :375, 1992. (Cité page 45.)

[87] V. A. Khlus. *JETP*, 66 :1243, 1987. (Cité page 45.)

[88] P. M. Billangeon. *Détection de bruit quantique mésoscopique à haute fréquence*. PhD thesis, Université de Paris-Sud, 2008. (Cité page 47.)

[89] U. Gavish, Y. Levinson, and Y. Imry. *Phys. Rev. B*, 62 :R10637, 2000. (Cité pages 47 et 102.)

[90] C. Bena and I. Safi. *Phys. Rev. B*, 76 :125317, 2007. (Cité pages 48 et 149.)

[91] I. Safi, C. Bena, and A. Crépieux. *Phys. Rev. B*, 78 :205422, 2008. (Cité pages 48, 149, 150 et 152.)

[92] M. Devoret and H. Grabert. *Single charge tunneling*. Nano Advanced Study Institute, Kluwer, 1991. (Cité page 49.)

[93] D.C. Mattis and E.H. Lieb. *J. Math. Phys.*, 6 :304, 1965. (Cité pages 51 et 60.)

[94] F.D.M. Haldane. *J. Phys. C*, 14 :2585, 1981. (Cité page 51.)

[95] X. Wen. *Int. J. Mod. Phys.*, B6 :1711, 1992. (Cité pages 56, 96 et 182.)

[96] J. Voit. *Rep. Prog. Phys.*, 58 :977, 1995. (Cité pages 56, 57, 65, 77, 80 et 86.)

[97] M. P. A. Fisher and L. I. Glazman. *cond-mat*, page 10037, 1996. (Cité pages 56 et 77.)

[98] J. Von Delft and H. Schoeller. *Annalen der Physik*, 4 :225, 1998. (Cité page 56.)

[99] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik. *Bosonization and strongly correlated systems*. Cambridge University Press, 1998. (Cité page 56.)

[100] T. Giamarchi. *Quantum Physics in One Dimension*. Oxford University Press, 2003. (Cité pages 56, 57 et 64.)

[101] J. Solyon. *Adv. Phys.*, 28 :209, 1979. (Cité pages 57 et 61.)

[102] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Plenum press, 1990. (Cité pages 58, 69, 70, 71, 74 et 80.)

[103] R. de L. Kronig. *Physica*, 2 :968, 1935. (Cité page 60.)

[104] A. P. Jauho. Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors. *Springer Solid-Sate Sciences*, 123, 1996. (Cité page 70.)

[105] A. Kamenev. *cond-mat*, page 0412296, 2005. (Cité page 70.)

[106] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics*. Oxford University Press, 2002. (Cité page 71.)

[107] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Mc Graw-Hill, New York, 1991. (Cité page 71.)

[108] V. J. Emery. *Highly Conducting One-Dimensional Solids*. Plenum, 1979. (Cité page 76.)

[109] W. Bardyszewski and L. Hedin. *Phys. Scr.*, 32 :439, 1985. (Cité page 79.)

[110] N. V. Smith. *Photoemission in Solids I : General Principles*. Springer-Verlab Berlin, 1979. (Cité page 79.)

[111] J. K. Lang and Y. Baer. *Rev. Sci. Instr.*, 50 :221, 1979. (Cité page 79.)

[112] F. J. Himpsel. *Adv. Phys.*, 32 :1, 1983. (Cité page 79.)

[113] N. V. Smith, P. Thiry, and Y. Petroff. *Phys. Rev. B*, 47 :15476, 1993. (Cité pages 79 et 87.)

[114] V. Meden and K. Schönhammer. *Phys. Rev. B*, 46 :15753, 1992. (Cité pages 81, 134, 137 et 165.)

[115] J. Voit. *J. Phys. : Condens. Matter*, 5 :8305, 1993. (Cité pages 82, 83, 86, 134 et 137.)

[116] J. Voit. *cond-mat*, page 9711064, 1997. (Cité page 83.)

[117] M. Khodas, M. Pustilnik, A. Kamenev, and L. I. Glazman. *cond-mat*, page 0702505, 2007. (Cité page 85.)

[118] C. et al. Schüller. *Phys. Rev. B*, 54 :R17304, 1996. (Cité page 87.)

[119] A. R. Goñi et al. *Phys. Rev. Lett.*, 67 :3298, 1991. (Cité page 87.)

[120] O.M. Auslaender et al. *cond-mat*, page 07065, 2005. (Cité page 87.)

[121] B. Dardel et al. *Phys. Rev. Lett.*, 67 :3144, 1991. (Cité page 87.)

[122] Y. Hwu et al. *Phys. Rev. B*, 46 :13624, 1992. (Cité page 87.)

[123] B. Dardel et al. *Europhys. Lett.*, 24 :687, 1993. (Cité page 87.)

[124] M. Nakamura et al. *Phys. Rev. B*, 49 :16191, 1994. (Cité page 87.)

[125] C. M. Varma et al. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :1996, 1989. (Cité page 87.)

[126] S. Iijima. *Nature*, 354 :56, 1991. (Cité pages 89 et 92.)

[127] W. Krätschmer et al. *Nature*, 347 :354, 1990. (Cité page 91.)

[128] Y. Saito et al. *J. Phys. Chem. Solids*, 54 :1849, 1993. (Cité page 91.)

[129] S. Iijima et al. *Nature*, 363 :603, 1993. (Cité pages 91 et 92.)

[130] D. S. Bethune et al. *Nature*, 363 :603, 1993. (Cité page 91.)

[131] A. Thess et al. *Science*, 273 :483, 1996. (Cité pages 91 et 92.)

[132] N. M. Rodriguez. *Journal of Material Research*, 8 :3233, 1993. (Cité page 91.)

[133] T. W. Odom et al. *Topics Appl. Phys.*, 80 :173, 2001. (Cité page 92.)

[134] Gallerie d'image. *mrsec.wisc.edu*. (Cité page 93.)

[135] J. Wildöer et al. *Nature*, 391 :59, 1998. (Cité page 92.)

[136] Z. Yao et al. *Nature*, 402 :273, 1999. (Cité page 93.)

[137] S. J. Tans et al. *Nature*, 386 :474, 1997. (Cité page 93.)

[138] S. J. Tans et al. *Nature*, 394 :761, 1998. (Cité page 94.)

[139] I. Safi and H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, 52 :17040, 1995. (Cité pages 94, 99, 108 et 126.)

[140] D. L. Maslov and M. Stone. *Phys. Rev. B*, 52 :5539, 1995. (Cité pages 94, 99, 108 et 126.)

[141] W. Liang et al. *Nature*, 411 :665, 2001. (Cité page 94.)

[142] C. S. Peça, L. Balents, and K. J. Wiese. *Phys. Rev. B*, 68 :205423, 2003. (Cité page 94.)

[143] P. Recher, N. Y. Kim, and Y. Yamamoto. *Phys. Rev. B*, 74 :235438, 2006. (Cité pages 94 et 113.)

[144] L. Chico et al. *Phys. Rev. Lett.*, 76 :971, 1996. (Cité page 94.)

[145] F. Dolcini, H. Grabert, I. Safi, and B. Trauzettel. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :266402, 2003. (Cité pages 94, 108, 125 et 127.)

[146] B. Trauzettel, I. Safi, F. Dolcini, and H. Grabert. (Cité pages 94, 108, 110 et 113.)

[147] F. Dolcini, B. Trauzettel, I. Safi, and H. Grabert. *Phys. Rev. B*, 71 :165309, 2005. (Cité pages 94, 108, 110, 113, 125 et 127.)

[148] A. Bachtold et al. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :6082, 2000. (Cité page 95.)

[149] S. Pugnetti, F. Dolcini, D. Bercioux, and H. Grabert. *Phys. Rev. B*, 79 :035121, 2009. (Cité pages 95 et 96.)

[150] Y. Yaish et al. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :046401, 2004. (Cité page 95.)

[151] J Kong et al. *cond-mat*, page 0502501, 2005. (Cité page 95.)

[152] B. J. LeRoy et al. *Phys. Rev. B*, 72 :075413, 2005. (Cité page 95.)

[153] S. Spamaz et al. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :026801, 2006. (Cité page 95.)

[154] G. Grüner. *Density Waves in solids*. Addison-Wesley, 1994. (Cité page 96.)

[155] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. *Physical properties of carbon nanotube*. Imperial College, 1998. (Cité page 97.)

[156] C. L. Kane and E. J. Mele. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :1932, 1997. (Cité page 97.)

[157] R. Egger and A. O. Gogolin. *Eur. Phys. J. B*, 3 :281, 1998. (Cité pages 98 et 99.)

[158] V. V. Ponomorenko. *Phys. Rev. B*, 52 :8666, 1995. (Cité pages 99, 108 et 126.)

[159] R. Deblock, E. Onac, L. Guervich, and L. P. Kouwenhoven. *Science*, 301 :203, 2003. (Cité pages 102 et 113.)

[160] A. V. Lebedev, A. Crépieux, and T. Martin. *Phys. Rev. B*, 71 :075416, 2005. (Cité pages 102, 109, 110, 113, 115, 117, 121 et 161.)

[161] A. Crépieux. *Approche de Dirac pour l'effet Hall anormal et fluctuations hors équilibre dans les liquides de Luttinger*. Thèse d'habilitation à diriger des recherches, 2005. (Cité page 106.)

[162] M. Guigou, A. Popoff, A. Crépieux, and T. Martin. *Phys. Rev. B*, 76 :045104, 2007. (Cité pages 110 et 144.)

[163] A. Thielmann, M. H. Hettler, J. König, and G. Schön. *Phys. Rev. B*, 71 :045341, 2005. (Cité page 113.)

[164] E. Onac et al. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :026803, 2006. (Cité page 113.)

[165] M. Büttiker and R. Landauer. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :1739, 1982. (Cité page 118.)

[166] A. Crépieux, M. Guigou, A. Popoff, P. Devillard, and T. Martin. *Proceedings of the 6th Rencontres du Vietnam, Hanoi*, 2006. (Cité page 118.)

[167] G. B. Lesovik and L. S. Levitov. *Phys. Rev. B*, 72 :538, 1994. (Cité page 118.)

[168] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. *Appl. Phys. Lett.*, 40 :178, 1982. (Cité page 124.)

[169] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :57, 1982. (Cité page 124.)

[170] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. *Phys. Rev. Lett.*, 50 :120, 1983. (Cité page 124.)

[171] B. Gao et al. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :196802, 2005. (Cité page 124.)

[172] G. Dujardin et al. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :3085, 1998. (Cité page 124.)

[173] R. Li, J. Berndl and W. D. Schneider. *Phys. Rev. Lett.*, 76 :1888, 1996. (Cité page 124.)

[174] T. Giamarchi and H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, 37 :325, 1988. (Cité page 125.)

[175] A. Luther and I. Peschel. *Phys. Rev. B*, 9 :2911, 1974. (Cité page 125.)

[176] R. Egger and H. Grabert. *Phys. Rev. Lett.*, 77 :538, 1996. (Cité page 125.)

[177] M. F. Lin and D. S. Chuu. *Phys. Rev. B*, 56 :4996, 1997. (Cité page 125.)

[178] S. Eggert. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4413, 2000. (Cité page 125.)

[179] M. E. Peskin and D. V. Schroeder. *An introduction to quantum field theory*. West-View Press, 1995. (Cité pages 128 et 181.)

[180] C. L. Kane and M. P. Fisher. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :1220, 1992. (Cité page 128.)

[181] L. H. Pan et al. *Appl. Phys. Lett.*, 65 :2151, 1994. (Cité page 131.)

[182] S. Patil, A. V. Kulkarni, and C. V. Dharmadhikari. *J. Appl. Phys.*, 88 :6940, 2000. (Cité page 131.)

[183] G. Mesa, E. Dobato-Fuentes, and J. J. Saenz. *J. Appl. Phys.*, 79 :39, 1996. (Cité page 131.)

[184] X. de la Broïse, M. Lanoo, and C. Delerue. *J. Appl. Phys.*, 82 :5589, 1997. (Cité page 131.)

[185] M. Guigou, T. Martin, and A. Crépieux. *arXiv : cond-mat*, page 0904.4019, 2009. (Cité page 143.)

[186] M. Guigou, T. Martin, and A. Crépieux. *arXiv : cond-mat*, page 0905.3842, 2009. (Cité page 144.)

[187] I. S. Gradstheyn and I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic, New York, 1965. (Cité pages 166 et 169.)

[188] I. S. Gradstheyn and I. M. Ryzhik. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, 1970. (Cité page 166.)

Résumé :

Cette thèse s'inscrit dans le domaine de la physique mésoscopique. Plus particulièrement, on s'est intéressé aux effets de taille finie et aux effets de l'écrantage causé par une pointe de STM dans un fil quantique, ceci à travers les comportements du courant, du bruit non-symétrisé et de la conductance. Ces études reposent sur, d'une part, la théorie des liquides de Luttinger qui permet de décrire les systèmes 1D d'électrons fortement corrélés et d'autre part, le formalisme Keldysh permettant de considérer des situations hors équilibre.

Le bruit présente un comportement non poissonien, résultant des effets de taille finie. A travers le transport photo-assisté, il est également montré que ces effets masquent ceux des interactions coulombiennes. En considérant la proximité entre la pointe de STM, qui sert de sonde comme d'injecteur d'électrons, et un fil quantique, des effets d'écrantage apparaissent. Il est montré qu'ils jouent un rôle similaire à ceux des interactions coulombiennes.

Mots-clefs : transport quantique, physique mésoscopique, liquides de Lüttinger, formalisme de Keldysh, courant, bruit quantique, corrélations croisées, conductance, écrantage, nanotube de carbone, pointe de STM, systèmes d'électrons fortement corrélés, interations coulombiennes.

Abstract :

This thesis takes place in the field of condensed matter. More precisely, we focus on the finite size effects and the screening effects caused by a STM tip in a quantum wire. For that, we use, first, the Luttinger liquid theory, which allows to describe strongly correlated systems and secondly, the Keldysh formalism, which is necessary to treat the out-of-equilibrium systems. For these studies, we consider, the currant, the noise and the conductance.

The noise presents a non-poissonian behaviour, when finite size effects appear. Through the photo-assisted transport, it is shown that those effects hide the effects of the Coulomb interactions. Considering the proximity between the STM tip, used as a probe or as an injector, and a quantum wire, screening effects appear. We can conclude that they play a similar role to those of Coulomb interactions.

Keywords : transport, mesoscopic physics, Lüttinger liquids, Keldysh formalism, current, shot noise, cross-correlations, conductance, screening, carbon nanotube, STM tip, strongly correlated electron systems, Coulomb interactions.