



HAL
open science

Effet de l'interaction Coulombienne sur la localisation d'Anderson dans le gaz bidimensionnel d'électrons

Geneviève Fleury

► **To cite this version:**

Geneviève Fleury. Effet de l'interaction Coulombienne sur la localisation d'Anderson dans le gaz bidimensionnel d'électrons. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2010. Français. NNT: . tel-00516820

HAL Id: tel-00516820

<https://theses.hal.science/tel-00516820>

Submitted on 11 Sep 2010

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.

THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE PARIS VI

Spécialité

PHYSIQUE THEORIQUE

présentée par :

Geneviève Fleury

pour obtenir le grade de DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI

Sujet de la thèse :

**Effet de l'interaction Coulombienne
sur la localisation d'Anderson
dans le gaz bidimensionnel d'électrons**

soutenue le 29 janvier 2010 devant le jury composé de :

M. Bernard Bernu Examineur
M. Gilles Montambaux Rapporteur
Mme Lucia Reining Présidente du jury
M. Laurent Saminadayar Examineur
M. Dima Shepelyansky Rapporteur
M. Xavier Waintal Directeur de thèse

préparée au Service de Physique de l'Etat Condensé du CEA Saclay

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à Xavier Waintal pour avoir accepté d'encadrer mon travail de thèse. J'ai conscience d'avoir eu beaucoup de chance en collaborant avec toi et il est certain que je garderai un très bon souvenir de ces années de thèse. Si les choses se sont à mon sens si bien passées, c'est d'abord parce que tu as su m'orienter sur un sujet porteur, pour lequel je me suis surprise à me passionner. Mais un bon sujet ne fait pas tout et je devine que mon quotidien de thésarde serait vite devenu un enfer sans tes nombreux conseils et encouragements. J'ai effectivement pu bénéficier à tes côtés d'un encadrement au jour le jour qui m'a permis d'éviter les longues périodes d'errance, tout en gardant ma liberté d'action. J'ai peut-être même un peu abusé de ta disponibilité, surtout lors de la rédaction de ce manuscrit, et pourtant, je n'ai pas le souvenir que tu aies une seule fois esquivé mes questions. J'ai aussi beaucoup apprécié pendant toutes ces années ton enthousiasme sans faille et ta remarquable capacité à motiver tes troupes. Pour toutes ces raisons, mille fois merci.

Je tiens également à exprimer ma vive reconnaissance envers Bernard Bernu, Gilles Montambaux, Lucia Reining, Laurent Saminadayar et Dima Shepelyansky qui m'ont fait le plaisir de faire partie de mon jury de thèse. Merci pour vos questions et pour l'intérêt que vous avez porté à mon travail. Merci particulièrement à G. Montambaux et D. Shepelyansky qui se sont chargés de l'écriture des rapports et à L. Reining qui a bien voulu assumer la fonction de présidente du jury.

J'ai bénéficié au SPEC de conditions de travail exceptionnelles, dans une ambiance à la fois fort sympathique et très enrichissante. Je remercie ici son directeur, Eric Vincent, pour m'y avoir accueillie et pour m'avoir régulièrement encouragée dans mon travail.

Un grand merci aux membres du groupe Nanoélectronique avec qui j'ai passé la plupart de mes pauses déjeuners. Je pense notamment aux expérimentateurs du rez-de-chaussée, permanents comme thésards ou post-docs, Christian Glattli, Patrice Roche, Fabien Portier, Keyan Bennaceur, Phuong-Anh Huynh, Joseph Dufouleur, Preden Roulleau, Ivana Petkovic, Jérémie Guignard, Eva Zakka-Bajjani et les nombreux stagiaires qui ont participé à la dynamique du groupe. Double merci à Eva à qui je devrais en fait consacrer une page spéciale de remerciements. Je n'oublie pas non plus les théoriciens du second, Simone Borlenghi-Garoià, Axel Freyn, Adel Abbout et plus récemment Gabriel Lemarié pour son aide en Latex. Je tiens également à exprimer toute ma gratitude envers Jean-Louis Pichard qui a montré un intérêt constant à mon travail pendant toutes ces années. Merci pour tes précieuses remarques lorsque je préparais la soutenance.

Les longues après-midis passées devant l'ordinateur auraient été bien monotones sans mes

partenaires de bureau successifs, Kyril Kazymyrenko, Valentin Rychkov et Gwenaëlle Jasmin-Lebras. Merci à vous.

Je remercie profondément Pascale Beurtey, Laurent Sengmanivanh et Philippe Caresmel qui ont résolu pour moi d'innombrables problèmes informatiques en tous genres. Merci aussi à Manuel Flores qui m'a aidée à compiler les codes sur les grosses machines du CCRT.

Je n'oublie pas les autres membres du SPEC qui ont été nombreux à me témoigner leur sympathie. Je pense notamment à plusieurs thésards et post-docs, Caroline Thibierge-Crauste (et Olivier), Christian Borghesi, Quentin Le Masne, Diana Garcia Lopez, François Nguyen, Charis Quay, Sébastien Petit-Watelot (je ne vous cite pas tous), au groupe cryogénie avec qui j'ai partagé quelques repas et aux secrétaires du SPEC, en particulier Nathalie Royer, qui ont toujours fait preuve de beaucoup de gentillesse et de patience avec moi.

Je remercie aussi Pascal Simon grâce à qui j'ai espéré pouvoir rentabiliser intelligemment mes calculs de fonction de réponse. Le projet souffre encore de quelques problèmes mais j'espère que nous pourrons prochainement co-signer un papier.

Enfin, merci à tous ceux qui m'ont aidée à mener à bien mes études, malgré les difficultés. Je serai rapide car le caractère quelque peu formel de ces remerciements ne vont convient pas. Merci entre autres à mes parents René et Marie-Agnès, à mes frères Bruno et Clément et à Nadia. Encore un grand merci aussi à Eva. Et puis bien sûr, merci à Anthony. Merci de m'avoir supportée pendant toutes ces années (tu y mettras le sens que tu veux) et d'avoir toujours fait de ton mieux pour me rassurer.

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Introduction | 9 |
| Guide de lecture | 15 |
| 1 Le gaz bidimensionnel d'électrons désordonné : point de vue des années 80 | 17 |
| Résumé du chapitre 1 | 18 |
| 1.1 Présentation du système étudié : le gaz 2D | 19 |
| 1.1.1 Paramètre r_s comme mesure de l'importance des interactions | 19 |
| 1.1.2 Paramètre $k_F l$ comme mesure de l'importance du désordre | 21 |
| 1.2 Vers la détermination du diagramme de phase désordre/interaction | 22 |
| 1.2.1 Le concept de métal et d'isolant | 22 |
| 1.2.2 Exploration expérimentale du diagramme de phase | 23 |
| 1.2.3 Première ébauche du diagramme de phase | 24 |
| 1.3 Problème sans interaction : électrons dans un système désordonné | 26 |
| 1.3.1 De la solution classique aux premières corrections quantiques | 27 |
| 1.3.2 Localisation d'Anderson | 29 |
| 1.3.3 Théorie d'échelle de la localisation | 31 |
| 1.4 Effets nuisibles au transport des interactions électroniques | 34 |
| 1.4.1 Approche effective : théorie de Landau du liquide de Fermi | 34 |
| 1.4.2 Solution à forte interaction et faible désordre : cristal de Wigner | 35 |
| 1.4.3 Effet conjoint désordre/interaction dans certaines limites | 37 |
| 2 Observation de comportements métalliques dans des échantillons bidimensionnels | 41 |
| Résumé du chapitre 2 | 42 |
| 2.1 Quelques notions sur les échantillons expérimentaux | 43 |
| 2.1.1 Transistor à effet de champ Si-MOSFET | 43 |
| 2.1.2 Hétérostructure semi-conductrice | 45 |
| 2.2 Comportement métallique inattendu | 46 |
| 2.3 Analyse critique des échantillons « métalliques » | 50 |
| 2.3.1 Diagramme de phase expérimental | 51 |
| 2.3.2 Importance des interactions | 53 |
| 2.3.3 Le paradoxe du désordre | 53 |
| 2.3.4 Des échantillons à « haute » température | 54 |
| 2.4 Indice expérimental : rôle du spin | 56 |
| 2.4.1 Effet d'un champ magnétique parallèle | 56 |
| 2.4.2 Susceptibilité de spin au voisinage de la transition métal-isolant | 60 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.5 | Indice expérimental : rôle des vallées | 62 |
| 2.5.1 | Effet métallique accru en présence de dégénérescence de vallées | 62 |
| 2.5.2 | Equivalence entre les degrés de liberté de spin et de vallée | 62 |
| 2.6 | Revue des propositions théoriques | 63 |
| 2.6.1 | Approche par le liquide de Fermi à faible interaction : calculs perturbatifs | 64 |
| 2.6.2 | Approche par le cristal de Wigner à forte interaction | 66 |
| 2.6.3 | Théories semi-classiques « sans » interaction | 67 |
| 2.6.4 | Modèles de percolation | 69 |
| 2.6.5 | Autres propositions théoriques | 70 |
| 2.7 | Quelques tentatives numériques | 71 |
| 3 | Notre modèle : généralisation à N corps du modèle d'Anderson | 75 |
| | Résumé du chapitre 3 | 76 |
| 3.1 | Définition du réseau | 77 |
| 3.2 | Hamiltonien du modèle en seconde quantification | 78 |
| 3.3 | Correspondance entre les modèles discret et continu | 80 |
| 3.3.1 | Calcul de l'énergie de Fermi E_F | 80 |
| 3.3.2 | Calcul du paramètre de désordre $k_F l$ | 81 |
| 3.3.3 | Calcul du paramètre d'interaction r_s | 82 |
| 3.4 | Effets de taille finie | 82 |
| 3.4.1 | Effets de ν fini et limite continue | 83 |
| 3.4.2 | Effets de N fini et limite thermodynamique | 83 |
| 4 | Méthodes Monte Carlo Quantique à température nulle | 87 |
| | Résumé du chapitre 4 | 88 |
| 4.1 | Vers une méthode stochastique | 89 |
| 4.1.1 | Rappels de probabilité : processus de Markov et matrice stochastique | 90 |
| 4.1.2 | Principe des méthodes Monte Carlo Quantique | 92 |
| 4.2 | Première approche variationnelle : VMC | 94 |
| 4.2.1 | Calcul d'intégrales en Monte Carlo et algorithme Metropolis | 94 |
| 4.2.2 | Application au calcul d'observables quantiques | 96 |
| 4.2.3 | Intermède technique : algorithme « update » pour le calcul des déterminants | 98 |
| 4.3 | Approche en terme d'équation différentielle : GFMC | 99 |
| 4.3.1 | Description de l'algorithme GFMC | 99 |
| 4.3.2 | Calcul d'observables en GFMC | 103 |
| 4.3.3 | Problème de signe et approximation Fixed Node | 106 |
| 4.3.4 | Limites du GFMC | 107 |
| 4.4 | Approche en terme d'intégrale de chemin : RQMC | 108 |
| 4.4.1 | Principe du RQMC et comparaison avec le GFMC | 108 |
| 4.4.2 | Algorithme utilisé pour l'échantillonnage des chemins | 111 |
| 4.4.3 | Calcul d'observables en RQMC | 112 |
| 4.4.4 | Limites du RQMC | 115 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5 | Notre approche pour étudier la localisation d'Anderson en présence d'interaction | 117 |
| | Résumé du chapitre 5 | 118 |
| 5.1 | Choix des fonctions guides sous la forme Slater-Jastrow | 119 |
| 5.1.1 | Fonction Jastrow et condition de « cusp » | 120 |
| 5.1.2 | Fonction guide « Liquide » | 121 |
| 5.1.3 | Fonction guide « Hartree » | 121 |
| 5.2 | Comment mesurer les propriétés de localisation du gaz 2D ? | 125 |
| 5.2.1 | Conductance de Thouless comme mesure de localisation | 126 |
| 5.2.2 | Lien avec le coefficient de diffusion en temps imaginaire | 128 |
| 5.2.3 | Discussion du rôle de l'approximation Fixed Node | 131 |
| 5.2.4 | Lois de distribution des coefficients de diffusion | 133 |
| 5.3 | Extrapolation à la limite thermodynamique : théorie d'échelle | 134 |
| 5.3.1 | Dépendance du coefficient de diffusion avec la taille du système | 135 |
| 5.3.2 | Calcul de la fonction d'échelle β | 136 |
| 5.3.3 | Extraction de la longueur de localisation ξ à partir de $\beta(g)$ | 139 |
| 6 | Effets des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson à température nulle | 145 |
| | Résumé du chapitre 6 | 146 |
| 6.1 | Systèmes à une composante de pseudo-spin | 148 |
| 6.1.1 | Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction | 148 |
| 6.1.2 | Etude de la longueur de localisation ξ^{1C} : localisation par les interactions | 148 |
| 6.2 | Systèmes à deux composantes de pseudo-spin | 151 |
| 6.2.1 | Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction | 151 |
| 6.2.2 | Etude de la longueur de localisation ξ^{2C} : délocalisation par les interactions | 152 |
| 6.2.3 | Test de l'approximation Fixed Node | 157 |
| 6.3 | Systèmes à quatre composantes de pseudo-spin | 158 |
| 6.3.1 | Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction | 158 |
| 6.3.2 | Etude de la longueur de localisation ξ^{4C} : délocalisation drastique par les interactions | 160 |
| 6.4 | Conclusion : description du gaz 2D par la théorie du liquide de Fermi | 163 |
| 7 | Mécanisme à l'origine des comportements métalliques observés à basse densité | 165 |
| | Résumé du chapitre 7 | 166 |
| 7.1 | Calcul de l'énergie de polarisation E_p en Monte Carlo Quantique | 167 |
| 7.1.1 | Définition de l'énergie de polarisation | 167 |
| 7.1.2 | Validation technique : effets de taille finie en N sur E_p | 169 |
| 7.1.3 | Validation technique : effets de réseau en ν sur E_p | 170 |
| 7.1.4 | Effets des interactions et du désordre sur E_p | 172 |
| 7.2 | Energie caractéristique des comportements métalliques : l'énergie de polarisation | 175 |
| 7.2.1 | Cas des Si-MOSFETs | 176 |
| 7.2.2 | Cas des hétérostructures GaAs | 179 |
| 7.2.3 | Conclusion partielle : contraintes sur les possibles mécanismes responsables des comportements métalliques | 181 |

| | | |
|-------|--|------------|
| 7.3 | Mécanisme proposé : délocalisation par les interactions et dépendance en polarisation | 182 |
| 7.3.1 | Origine du mécanisme | 183 |
| 7.3.2 | Diagramme de phase numérique désordre/interaction et comparaison au diagramme expérimental | 187 |
| 7.3.3 | Points d'accord semi-quantitatifs entre notre scénario et les données expérimentales | 190 |
| 7.3.4 | Positionnement de notre scénario par rapport aux autres théories proposées | 190 |
| | Conclusion et perspectives | 193 |
| | Bibliographie | 197 |

Introduction

On étudie dans cette thèse les effets conjoints du désordre et des interactions coulombiennes dans le gaz bidimensionnel d'électrons. L'objectif est de répondre à la question controversée de l'existence de métaux à deux dimensions : est-ce que des électrons confinés dans un plan bidimensionnel désordonné peuvent conduire le courant, strictement parlant à température nulle ? La question n'est pas seulement théorique car depuis plusieurs décennies, les physiciens de la matière condensée sont capables de fabriquer de tels systèmes quantiques à deux dimensions. On peut citer par exemple les transistors Si-MOSFETs, composants de base des microprocesseurs de nos ordinateurs, ou encore les hétérostructures semi-conductrices, que l'on retrouve dans nos téléphones portables. Dans ces dispositifs, l'idée est de piéger les électrons dans un puits de potentiel très fin à l'interface entre deux semi-conducteurs (ou un semi-conducteur et un isolant), de sorte que le mouvement des électrons devienne strictement bidimensionnel, dans le plan de l'interface. Comme les procédés de fabrication ne sont pas encore parfaits, des impuretés et des défauts se répartissent aléatoirement dans le matériau, d'où la présence d'un potentiel de désordre dans lequel évoluent les électrons, corrélés entre eux par l'interaction coulombienne. Dans cette thèse, nous nous intéressons aux propriétés de conduction du système bidimensionnel lorsque désordre et interactions entrent en compétition.

Dogme des années 1980 : pas de métal à 2D (§1)

En l'absence d'interaction, il est connu que le désordre, aussi petit soit-il, conduit à la localisation des électrons, via un processus quantique d'interférence destructive entre les fonctions d'onde électroniques réfléchies par les impuretés. C'est ce qu'on appelle la localisation d'Anderson [14]. En localisant les porteurs de charge dans une région finie de l'espace, ce phénomène inhibe la conduction électrique du système, le rendant ainsi isolant, du moins tant que celui-ci est quantiquement cohérent c'est-à-dire à basse température. En s'appuyant sur cet argument théorique étayé par une théorie d'échelle dite de la localisation [1], la communauté s'est ainsi convaincue qu'un système bidimensionnel d'électrons indépendants devait nécessairement être isolant. Dans certaines limites extrêmes [6, 75, 291], les interactions électron-électron pouvaient être prises en compte mais à chaque fois, il s'avérait qu'elles n'aidaient pas au transport, bien au contraire (voir le diagramme de phase 1). C'est ainsi qu'à la fin des années 80, il était admis qu'il ne pouvait exister d'état métallique à deux dimensions. A l'époque, les expériences semblaient confirmer ce paradigme [36, 273], du moins dans la région accessible, faiblement corrélée, du diagramme de phase désordre/interaction (région 1 de la figure 1). En effet, la mesure de la dépendance en température T de la résistivité ρ des échantillons persistait à montrer un comportement divergent $d\rho/dT < 0$, interprété comme la signature à basse température d'un état isolant (par définition de résistivité infinie, ou conductance nulle, à température nulle).

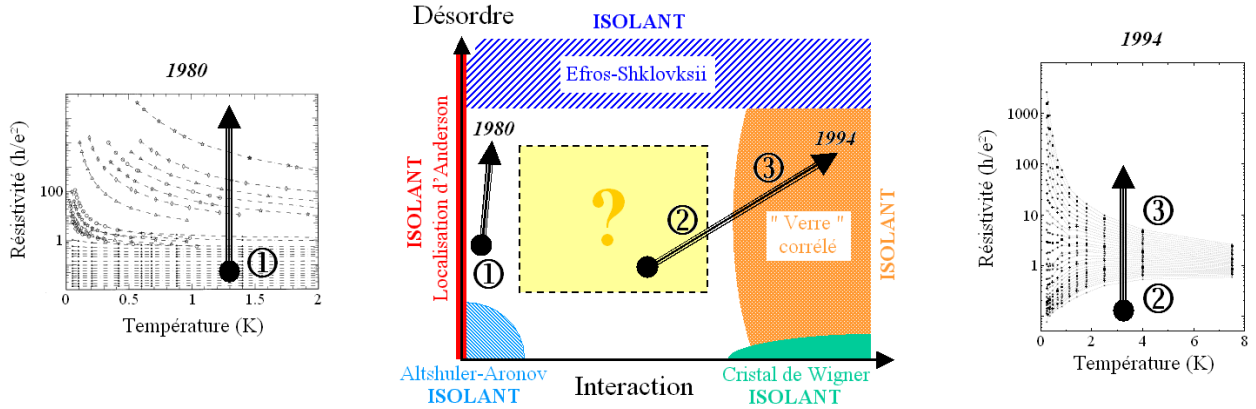


FIG. 1 — Diagramme de phase désordre/interaction du gaz bidimensionnel d'électrons. Dans les limites externes, le système est trouvé théoriquement isolant à température nulle. Au centre du diagramme, on ne sait pas. Les flèches indiquent les trajectoires de deux échantillons expérimentaux typiques des années 80 et 90, lorsque leur densité est diminuée. Dans les zones 1 (figure de gauche, d'après [122]) et 3 (courbes du haut de la figure de droite, d'après [135]), on trouve toujours un comportement isolant de la résistivité avec la température, en accord avec la théorie. En revanche, dans la région 2 (courbes du bas de la figure de droite), des comportements métalliques sont observés : la résistivité décroît au fur et à mesure que la température est diminuée, ce qui laisse présager d'une résistivité finie à température nulle. L'un des objectifs de cette thèse est d'expliquer ces étranges comportements métalliques.

Révolution de 1994 : observation de comportements métalliques à 2D (§2)

Lorsqu'en 1994 [134], S. V. Kravchenko annonce avoir observé des comportements métalliques dans des Si-MOSFETs ($d\rho/dT > 0$, courbes du bas de la figure 1 de droite), la communauté reste d'abord sceptique, tant ce résultat semblait incompatible avec les lois physiques établies depuis plusieurs décennies. Puis, après confirmation dans divers échantillons, l'incrédulité fit place à la polémique : en quelques années, des centaines de publications parurent sur le sujet, les opinions s'affrontèrent lors de multiples conférences et des modèles théoriques, plus ou moins saugrenus, affluèrent de toutes parts. Pourtant à ce jour, aucun consensus n'a encore été trouvé quant à l'origine de ces comportements métalliques et leur persistance ou non à plus basse température. Pour comprendre les nouvelles données expérimentales, la première question à se poser est de savoir quelles sont les nouvelles caractéristiques des échantillons « métalliques », par rapport à ceux des années 80, et ainsi qu'est-ce qui justifie que les comportements métalliques n'aient pas été observés avant. En réalité, la seule nouveauté des Si-MOSFETs utilisés dans les expériences de Kravchenko (et autres expériences similaires) est leur très haute mobilité, permettant de réaliser des mesures à des densités beaucoup plus basses qu'auparavant. De ce fait, ces échantillons parviennent à explorer la zone centrale du diagramme de phase, inaccessible par les théories analytiques, où désordre et interaction entrent en compétition. De plus, si la densité est basse, la température de Fermi T_F des porteurs l'est également et donc, même si la température absolue T paraît extrêmement faible dans ces expériences (de quelques dizaines de millikelvins à quelques kelvins), elle ne l'est pas en comparaison de la température de Fermi ($T/T_F \approx 20\%$). Ce point est crucial car il signifie que les comportements métalliques impliquent les états excités du système et pas seulement l'état fondamental à température nulle. Enfin, les expériences ont

mis en évidence le rôle essentiel des degrés de liberté de spin et de vallée. Il a en effet été montré qu'un champ magnétique Zeeman polarisant tous les spins des porteurs supprime les comportements métalliques et par ailleurs, que ceux-ci sont beaucoup plus importants dans les Si-MOSFETs, possédant deux vallées (*i.e.* deux mers de Fermi) dégénérées que dans les hétérostructures n'en possédant qu'une [2].

Problématiques de la thèse et méthodes d'approche (§3, §4 et §5)

Le thème central de cette thèse est l'étude des effets des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson, dans le gaz bidimensionnel à température nulle. L'objectif est double. D'une part, nous espérons satisfaire des interrogations d'ordre théorique : les interactions renforcent-elles la localisation ou au contraire, aident-elles au transport électronique ? Que devient la théorie d'échelle lorsque les interactions sont prises en compte ? Est-elle préservée de sorte que l'on puisse décrire le gaz 2D corrélé par la théorie du liquide de Fermi et continuer à conclure à l'absence d'état métallique à température nulle ? Ou est-ce qu'au contraire les corrélations électron-électron viennent la briser ? Si oui, sont-elles en mesure de stabiliser une phase métallique à température nulle ? D'autre part, nous souhaitons mettre à profit ce questionnement pour expliquer les comportements métalliques expérimentaux. Ceux-ci ont justement été observés dans un domaine où ni désordre, ni interactions peuvent être négligés et il se pourrait donc bien que la clé du mystère réside dans les corrélations électroniques et leur effet sur la localisation d'Anderson. Pour répondre à toutes ces questions, nous avons construit un modèle, simple mais réaliste, contenant comme ingrédients, le désordre, les interactions coulombiennes, le spin électronique et l'éventuel degré de liberté de vallée. Puis nous avons développé une approche numérique alliant Monte Carlo quantique pour résoudre le problème quantique à N corps et théorie d'échelle pour extraire la limite thermodynamique [89]. Cette approche nous permet de calculer diverses énergies du modèle pour les comparer à celles impliquées dans les expériences mais aussi, et c'est bien là que se situe l'essentiel de la difficulté, la longueur de localisation du système en présence d'interaction.

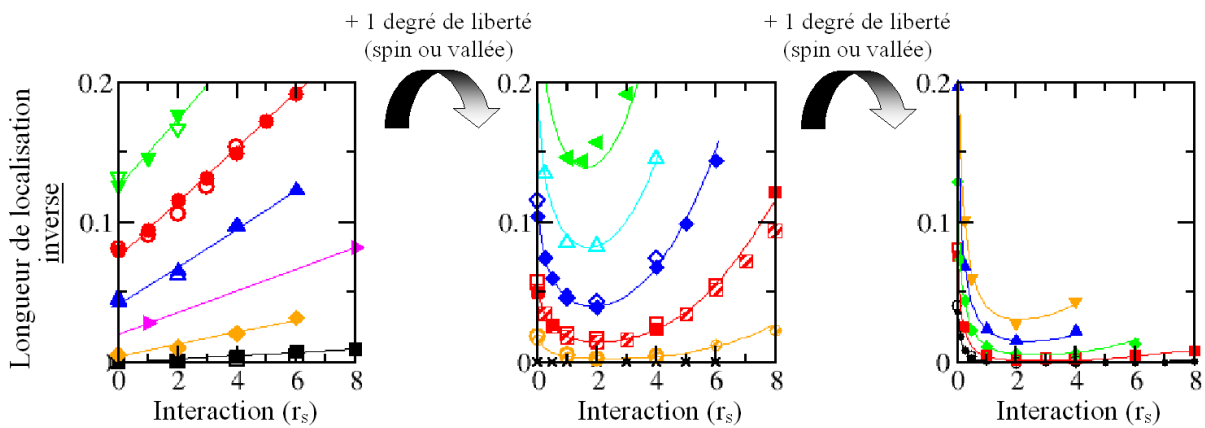


FIG. 2 – Effets des interactions sur la longueur de localisation inverse du gaz bidimensionnel d'électrons, pour différents désordres, d'après nos résultats Monte Carlo Quantique. A gauche, le système est polarisé en spin dans une vallée. Au milieu, il est non-polarisé en spin dans une vallée (ou polarisé en spin dans deux vallées). Et à droite, il est non-polarisé en spin dans deux vallées.

Résultats : localisation d'Anderson et corrélations électroniques (§6)

Dans tous les cas (systèmes polarisés ou non en spin, dans une ou deux vallées dégénérées), nous trouvons que la théorie d'échelle de la localisation est préservée en présence d'interaction. Ainsi, les corrélations électron-électron ne permettent pas de stabiliser un état métallique et l'on a en fait toujours un isolant, au sens strict de température nulle. Ce n'est pas pour autant que la localisation d'Anderson est insensible aux interactions électroniques et dans cette compétition, un autre facteur est déterminant : le nombre de degré de liberté internes, de spin ou de vallée, des électrons. Ainsi, nos données montrent que les interactions localisent le système sans spin et sans vallée alors qu'elles délocalisent le système avec spin ou vallée, et cet effet de délocalisation est accru dans le système non-polarisé en spin dans deux vallées (voir la figure 2). Cependant, même si la longueur de localisation devient très grande grâce aux interactions, elle reste toujours finie et donc à la limite thermodynamique (*i.e.* à température nulle), le système est isolant.

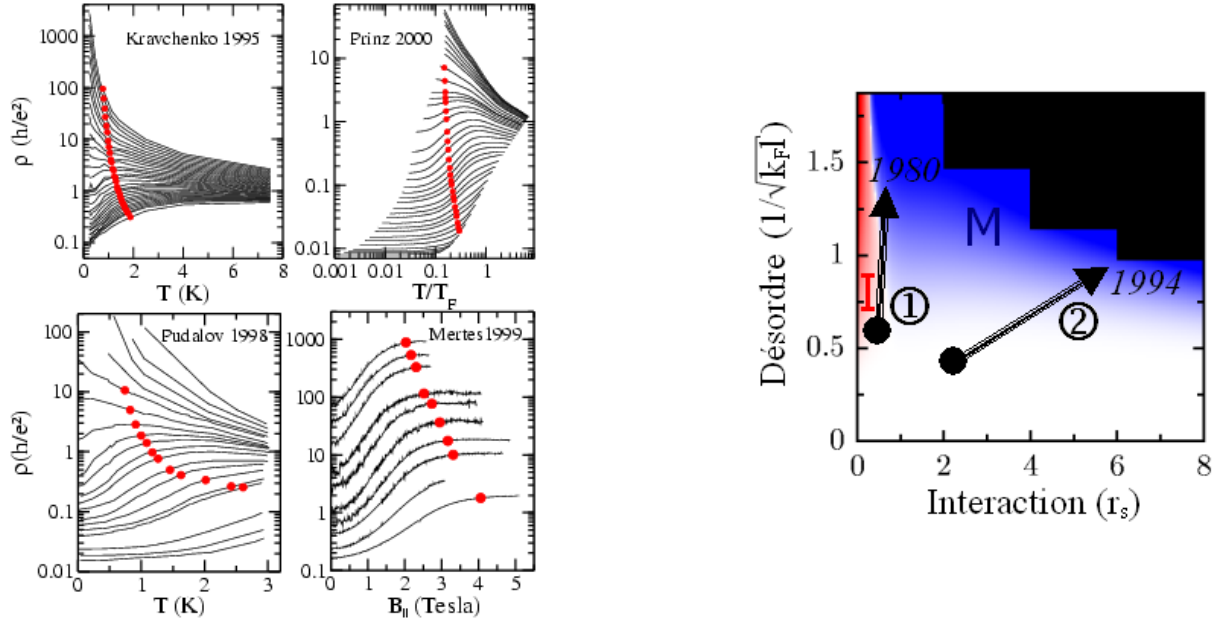


FIG. 3 – A gauche : données expérimentales de résistivité ρ en fonction de la température T (ou T/T_F avec T_F la température de Fermi) pour différentes densités de part et d'autre de la « transition métal-isolant » (d'après [135, 201, 210]). On a rajouté les points rouges dont l'abscisse est donnée par l'énergie de polarisation E_p calculée *ab initio* pour chaque courbe et convertie en température de polarisation T_p ($E_p = k_B T_p$). Manifestement, la température associée à l'augmentation de la résistivité dans la « phase métallique » est la température de polarisation du gaz 2D. La quatrième figure montre un exemple de mesure de magnétorésistance parallèle dans un échantillon dont la densité est variée (d'après [161]). Les points rouges correspondent aux champs magnétiques de polarisation calculés *ab initio*, où nous prédisons la saturation de la résistivité, en excellent accord avec les observations expérimentales. A droite : diagramme de phase désordre/interaction obtenu numériquement, à comparer au diagramme 1. La région blanche correspond au régime diffusif, la région rouge au régime isolant et la région bleue à un « métal » apparent.

Résultats : origine des comportements métalliques (§7)

Pour comprendre les comportements métalliques expérimentaux, nous nous sommes d'abord intéressés à l'échelle d'énergie (thermique ou Zeeman) associée à la variation de la résistivité dans la « phase métallique ». Sans paramètre ajustable, nous avons montré grâce à notre méthode Monte Carlo Quantique que cette échelle d'énergie correspond à l'énergie de polarisation du système, c'est-à-dire l'énergie qu'il faut apporter au système pour polariser tous les spins des porteurs. La figure 3 de gauche témoigne de ce résultat. Cette découverte nous a conduit à comparer, partant de notre modèle, les propriétés de localisation des systèmes polarisés et non-polarisés, pour différents degrés d'interaction et de désordre. En présence d'assez fortes interactions, nous trouvons que le système polarisé est plus localisé que le système non-polarisé (région bleue du diagramme numérique 3) et donc conduit beaucoup moins bien, à l'inverse du cas faiblement corrélé (région rouge de ce même diagramme). Selon nous, cette inversion des propriétés de localisation est à l'origine des comportements métalliques : lorsque la température est augmentée (ou un champ magnétique Zeeman est appliqué), les états polarisés, plus localisés, se peuplent et la résistance du système augmente. Le scénario qui se dégage ainsi de nos résultats permet de rendre compte des principales caractéristiques expérimentales : diagramme de phase (voir la figure 3), rôle de la dégénérescence de vallées, effet d'un champ magnétique, énergie caractéristique ... En particulier, il met en exergue le rôle essentiel des interactions électron-électron dans les observations expérimentales, tout en supportant l'idée que le système est en fait isolant à température nulle, en accord avec le paradigme d'Anderson.

Guide de lecture

| INTRODUCTION À LA PROBLÉMATIQUE : SYNTHÈSE BIBLIOGRAPHIQUE | |
|--|--|
| Chapitre 1 | On présente le système étudié dans la thèse, à savoir le gaz bidimensionnel d'électrons désordonné. La question est de savoir si ce système est métallique ou isolant en fonction des degrés de désordre et d'interaction électron-électron. On expose différentes théories montrant, dans certaines limites extrêmes de désordre et d'interaction, que ces deux ingrédients, pris ensemble ou séparément, conduisent à des états isolants. Une attention particulière est portée à l'étude de la localisation d'Anderson sans interaction, due au désordre. On conclut qu'à la fin des années 80, l'idée communément admise était qu'il ne pouvait exister de métal à 2D. |
| Chapitre 2 | On présente une série d'expériences (initiées par S. V. Kravchenko en 1994) ayant mis en évidence des comportements métalliques dans des échantillons bidimensionnels de basse densité et de haute mobilité, c'est-à-dire dans un régime intermédiaire de désordre et d'interaction. Celles-ci ont considérablement relancé le débat sur la question de l'existence de métaux à 2D. On les analyse de façon à dégager les ingrédients physiques essentiels à l'observation de ces comportements métalliques. On discute également des différentes théories proposées pour expliquer ces expériences. |

| MODÈLE ET MÉTHODE | |
|------------------------------------|---|
| Chapitre 3 | On introduit le modèle étudié tout au long de la thèse. N électrons sont disposés sur un réseau bidimensionnel de V sites, de sorte que $N/V \ll 1$ pour retrouver la limite continue. Chacun de ces électrons a un degré de liberté de spin (up ou down) et un degré de liberté de vallée (vallée a ou b). Ils sont plongés dans un potentiel de désordre blanc (modèle d'Anderson) et interagissent via la répulsion coulombienne. |
| Chapitre 4 | Ce chapitre, indépendant des autres, peut être sauté en première lecture. On y présente les deux méthodes numériques Monte Carlo Quantique que nous avons utilisées pour calculer le fondamental de notre modèle à température nulle, ou plus précisément, divers observables physiques dans cet état fondamental. |
| Suite du tableau page suivante ... | |

| MODÈLE ET MÉTHODE | |
|--------------------------|--|
| Chapitre 5 | <p>Nous expliquons comment nous avons procédé pour étudier, en Monte Carlo Quantique, la localisation d'Anderson en présence d'interaction électronique. L'idée est de mesurer les propriétés de localisation du système à l'aide de la conductance de Thouless puis de les extrapoler à la limite thermodynamique en faisant de la théorie d'échelle. Notre méthode nous permet ainsi d'extraire la longueur de localisation du système bidimensionnel corrélé, à la limite thermodynamique et à température nulle, pour différents degrés de désordre et d'interactions électroniques.</p> |

| RÉSULTATS | |
|-------------------|--|
| Chapitre 6 | <p>On étudie à proprement parler les effets des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson dans le gaz bidimensionnel. On montre que la fonction d'échelle β de la théorie d'échelle de la localisation est inchangée en présence d'interaction, ce qui implique que le gaz 2D corrélé est toujours isolant à la limite thermodynamique. On montre également que les interactions électroniques localisent le système polarisé en spin et en vallée tandis qu'elles ont un effet de délocalisation sur le système non polarisé en spin, qui est accru par la double dégénérescence de vallée.</p> |
| Chapitre 7 | <p>On propose dans ce chapitre un mécanisme simple pour expliquer les comportements métalliques observés dans les expériences à température finie (voir le chapitre 2). On montre tout d'abord, par des calculs Monte Carlo Quantique sans paramètre ajustable, que l'énergie caractéristique des comportements métalliques est l'énergie de polarisation du système. Puis, on explique que ces comportements métalliques peuvent se comprendre en remarquant que les interactions électroniques ont pour effet d'inverser l'inégalité entre les longueurs de localisation des systèmes polarisés et non polarisés, par rapport au cas sans interaction, sans aucun doute isolant.</p> |

Chapitre 1

Le gaz bidimensionnel d'électrons désordonné : point de vue des années 80

Sommaire

| | |
|---|-----------|
| Résumé du chapitre 1 | 18 |
| 1.1 Présentation du système étudié : le gaz 2D | 19 |
| 1.1.1 Paramètre r_s comme mesure de l'importance des interactions | 19 |
| 1.1.2 Paramètre $k_F l$ comme mesure de l'importance du désordre | 21 |
| 1.2 Vers la détermination du diagramme de phase désordre/interaction 22 | |
| 1.2.1 Le concept de métal et d'isolant | 22 |
| 1.2.2 Exploration expérimentale du diagramme de phase | 23 |
| 1.2.3 Première ébauche du diagramme de phase | 24 |
| 1.3 Problème sans interaction : électrons dans un système désordonné 26 | |
| 1.3.1 De la solution classique aux premières corrections quantiques | 27 |
| 1.3.2 Localisation d'Anderson | 29 |
| 1.3.3 Théorie d'échelle de la localisation | 31 |
| 1.4 Effets nuisibles au transport des interactions électroniques | 34 |
| 1.4.1 Approche effective : théorie de Landau du liquide de Fermi | 34 |
| 1.4.2 Solution à forte interaction et faible désordre : cristal de Wigner | 35 |
| 1.4.3 Effet conjoint désordre/interaction dans certaines limites | 37 |

Résumé du chapitre 1

On étudie le gaz bidimensionnel d'électrons, interagissant via la répulsion coulombienne, en présence d'un potentiel de désordre. À la limite thermodynamique, le système est entièrement paramétrisé par les paramètres adimensionnés r_s (rapport entre la distance entre particules et le rayon de Bohr) et $1/k_F l$ (k_F vecteur d'onde de Fermi et l libre parcours moyen élastique), qui mesurent respectivement l'importance des interactions et du désordre dans le système. Ceux-ci sont directement reliés à la densité électronique n_s ($r_s \propto 1/\sqrt{n_s}$ et $k_F l \propto n_s$), si bien que lorsque la densité est diminuée dans les expériences, c'est à la fois le désordre et les interactions qui sont augmentés. L'objectif est d'établir le diagramme de phase du gaz bidimensionnel à température nulle (phase métallique ou isolante) en fonction des paramètres d'interaction r_s et de désordre $1/k_F l$.

Sans interaction ($r_s = 0$), il est prédit par la théorie d'échelle de la localisation qu'un désordre infinitésimal est suffisant pour rendre isolant le gaz bidimensionnel à température nulle. Cette théorie s'appuie sur l'hypothèse forte que la fonction $\beta = \frac{d \log g}{d \log L}$, donnant la dépendance de la conductance g (en unité de e^2/h) en fonction de la taille L du système, ne dépend que de g et pas de L ou d'autres paramètres. Cette fonction est estimée en interpolant entre les limites connues de forte conductance (où g est donnée par la loi d'Ohm et les corrections de localisation faible) et faible conductance (où g est exponentiellement petite car les fonctions d'onde électroniques sont exponentiellement localisées dans une région finie de l'espace par interférences destructives sur les impuretés (localisation d'Anderson)). À 2D, on a toujours $\beta < 0$ et donc un isolant à la limite thermodynamique (voir la figure 1.5). Cette théorie d'échelle a été développée sans interaction et vérifiée numériquement dans cette limite. Est-elle encore valable dans un système corrélé? C'est une des questions posées dans cette thèse, à laquelle on répondra au chapitre 6.

L'effet des interactions électron-électron a été étudié dans certaines limites de faible/fort désordre et faible/forte interaction, là où le problème peut être résolu par une approche théorique. Dans chacune de ces limites, il apparaît à température nulle que les interactions sont nuisibles au transport et renforcent le comportement isolant du gaz bidimensionnel (voir la figure 1.2). Ainsi jusqu'au début des années 90, la communauté fut convaincue de l'inexistence de métaux à deux dimensions. À l'époque, les mesures expérimentales (limitées à des systèmes de haute densité faiblement corrélés) semblaient confirmer ce paradigme. Mais en 1994, de nouveaux échantillons ont permis l'exploration du régime de désordre et d'interaction intermédiaires et contre toute attente, des comportements métalliques furent observés. Ces expériences, répétées depuis, restent largement inexplicées malgré la multitude de scénarios proposés. Elles seront présentées et discutées au chapitre 2.

Ce travail de thèse est consacré dans son intégralité à l'étude du gaz bidimensionnel d'électrons interagissant via la répulsion coulombienne, en présence d'un potentiel de désordre. La question posée se formule simplement : ce système peut-il ou non conduire le courant à température nulle ? Au delà du défi théorique soulevé, c'est la compréhension de la physique des transistors, peuplant par millions les processeurs de nos ordinateurs, qui est en jeu. Pendant plus de trente ans, la communauté avait de fortes raisons de penser que tout gaz d'électrons bidimensionnel est nécessairement isolant. Mais en 1994, cette idée a été remise en cause par l'observation de comportements métalliques dans des transistors à effet de champ (Si-MOSFET) de très basse densité, fortement corrélés.

Dans ce chapitre introductif, nous présentons notre système d'étude et introduisons les paramètres d'interaction r_s et de désordre $k_F l$ qui le caractérisent entièrement. Puis nous exposons les arguments traditionnels (antérieurs aux expériences de 1994) selon lesquels il n'existe pas d'état métallique à deux dimensions. Le plus important est sans doute donné par la théorie d'échelle de la localisation d'Anderson qui prédit, en l'absence d'interaction électronique, qu'un désordre aussi petit soit-il est suffisant pour rendre isolant le gaz bidimensionnel. Les autres permettent de prendre en compte les interactions dans certaines limites et conduisent également à un état isolant.

1.1 Présentation du système étudié : le gaz 2D

On considère N électrons en interaction, évoluant dans un système bidimensionnel de surface S , en présence d'un potentiel aléatoire $v(\vec{r})$. Ce système est décrit par le Hamiltonien suivant :

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{i=1}^N v(\vec{r}_i) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (1.1)$$

- Le premier terme est le terme d'énergie cinétique. m désigne ici la masse effective de l'électron, prenant en compte la structure de bande du matériau sous-jacent.
- Le second terme est le terme de désordre. \vec{r}_i est le vecteur position de l'électron numéro i dans la surface S . On suppose que le désordre est découplé du spin électronique (on ne traitera pas le cas d'impuretés magnétiques). Le plus souvent (et on le précisera), on se limitera au cas d'un potentiel aléatoire $v(\vec{r})$ blanc (c'est-à-dire décorrélé : $v(\vec{r})v(\vec{r}') = \gamma\delta(\vec{r} - \vec{r}')$).
- Le troisième terme est celui d'interaction coulombienne entre les électrons. Chaque électron interagit avec les $N - 1$ autres. ($-e$) désigne la charge de l'électron et ϵ la constante diélectrique du milieu.

Insistons sur le fait que nous ne prendrons jamais en compte le terme d'interaction spin-orbite dans notre Hamiltonien.

1.1.1 Paramètre r_s comme mesure de l'importance des interactions

On introduit le paramètre sans dimension r_s défini par :

$$r_s = a/a_B, \quad (1.2)$$

où $a_B = 4\pi\hbar^2\epsilon/(me^2)$ est le rayon de Bohr et a est défini par l'intermédiaire de la densité électronique $n_s = N/S$ selon :

$$a = 1/\sqrt{\pi n_s}. \quad (1.3)$$

a s'interprète comme la distance moyenne entre électrons. Ainsi, le paramètre r_s s'exprime en fonction de la densité électronique n_s selon :

$$\boxed{r_s = \frac{me^2}{4\pi\hbar^2\epsilon\sqrt{\pi n_s}}} \quad (1.4)$$

r_s comme facteur d'échelle

Sans désordre, r_s est l'unique paramètre physique du problème. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer le Hamiltonien du système propre (cristal parfait) :

$$H_{clean} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

et d'effectuer le changement de variable $\vec{r} \equiv a\vec{u}$ de façon à exprimer les distances en unité de a . Le Laplacien Δ s'écrit alors $\Delta = \frac{1}{a^2}\Delta'$, d'où :

$$H_{clean} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\Delta'_i + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon a|\vec{u}_i - \vec{u}_j|}.$$

Dans les unités de l'énergie de Rydberg $E_{Ryd} = \frac{me^4}{32\hbar^2\pi^2\epsilon^2}$, H_{clean} devient :

$$\tilde{H}_{clean} \equiv \frac{H_{clean}}{E_{Ryd}} = \sum_{i=1}^N -\left(\frac{4\pi\hbar^2\epsilon/(me^2)}{a}\right)\Delta'_i + 2\frac{4\pi\hbar^2\epsilon/(me^2)}{a} \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{u}_i - \vec{u}_j|},$$

soit :

$$\boxed{\tilde{H}_{clean} = -\frac{1}{r_s^2} \sum_{i=1}^N \Delta'_i + \frac{2}{r_s} \sum_{i<j} \frac{1}{|\vec{u}_i - \vec{u}_j|}} \quad (1.5)$$

On trouve donc que le Hamiltonien \tilde{H}_{clean} ne dépend que de N et de r_s , si bien qu'à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$), le paramètre r_s seul caractérise le système sans désordre.

Interprétation énergétique de r_s

Il s'avère que ce paramètre r_s , qui caractérise entièrement à lui seul le système sans désordre, rend compte de l'importance des interactions dans le système. En effet, l'énergie d'interaction E_{int} s'estime à $e^2/4\pi\epsilon a$ par particule et l'énergie cinétique E_{cin} , à $\hbar^2/2ma^2$, si bien que le rapport entre ces deux énergies s'évalue par :

$$\boxed{\frac{E_{int}}{E_{cin}} \approx \frac{e^2/4\pi\epsilon a}{\hbar^2/2ma^2} \approx r_s} \quad (1.6)$$

Cette estimation s'obtient d'ailleurs aussi en comparant les deux termes du Hamiltonien (1.5) : $E_{int}/E_{cin} \approx \frac{2/r_s}{1/r_s^2} \approx r_s$. Ainsi, plus r_s est grand (c'est-à-dire plus la densité n_s est faible d'après la relation (1.4)), plus on s'attend à un effet important des interactions. Ceci peut sembler contre-intuitif puisque lorsque l'on diminue la densité n_s , la distance moyenne a entre

deux électrons augmente et donc l'énergie d'interaction à proprement parler, en $1/a$, diminue. Cependant, comme l'énergie cinétique en $1/a^2$ décroît encore plus vite avec a , le rapport $\frac{E_{int}}{E_{cin}} \propto a \propto r_s$, caractéristique de l'importance des interactions dans le système, croît finalement avec a et r_s .

Remarque sur la validité de l'estimation (1.6) $r_s \approx E_{int}/E_{cin}$

La relation (1.6) a été justifiée ci-dessus, sans désordre, en supposant que chaque électron est « délocalisé » sur une longueur de l'ordre de a (la distance moyenne entre électrons). Elle devient fautive pour des électrons localisés sur une longueur ξ plus petite que a . Ainsi, à très fortes interactions, dans le cristal de Wigner (voir 1.4.2), les électrons sont localisés autour des sites du cristal sur une longueur $\xi \propto a^{3/4}$ et l'on trouve $E_{int}/E_{cin} \propto \sqrt{r_s}$ [80]. De même, à très fort désordre, les électrons sont localisés sur une longueur de localisation $\xi \ll a$ par piégeage ou localisation d'Anderson (voir 1.3.2), si bien que $E_{int}/E_{cin} \propto \sqrt{n_s} \propto 1/r_s$ (valable à $r_s \gg 1$ de sorte que $\xi \gg a$). Dans ce cas, c'est à forte densité que l'effet des interactions est dominant. Il faut donc être prudent quant à l'usage de r_s comme paramètre contrôlant l'importance des interactions. Précisons néanmoins que dans le cadre de cette thèse, nous étudierons uniquement des systèmes où $\xi > a$, pour lesquels la relation (1.6) est valable.

1.1.2 Paramètre $k_F l$ comme mesure de l'importance du désordre

Intéressons nous à présent au désordre que l'on décrit ici par une assemblée de centres diffuseurs. On introduit les deux longueurs caractéristiques suivantes :

- l , le libre parcours moyen élastique. l correspond à la distance moyenne parcourue par l'électron entre deux collisions sur des centres diffuseurs, conservant l'énergie. Cette longueur est caractéristique du potentiel aléatoire $v(\vec{r})$. Elle est reliée à la vitesse des électrons v_F (prise ici au niveau de Fermi) et au temps de collision élastique τ séparant deux évènements de collision, par $l = v_F \tau$.
- λ_F , la longueur d'onde de Fermi des électrons. λ_F est reliée au vecteur d'onde de Fermi k_F par $k_F = \frac{2\pi}{\lambda_F}$ et k_F est lui-même relié à la densité électronique n_s par $k_F = \sqrt{4\pi n_s/M}$, où M est le degré de dégénérescence de degrés de liberté internes (de spin ou de vallée¹).

• Lorsque $l \gg \lambda_F$ (soit $k_F l \gg 1$), le problème est très bien décrit dans le cadre d'une approximation classique où la nature ondulatoire des électrons est négligée. En l'absence d'interaction électronique, la conductivité σ du système (qui coïncide avec la conductance g à deux dimensions²) est alors donnée par la formule de Drude :

$$g = \sigma = \frac{e^2}{h} \frac{M k_F l}{2} . \quad (1.7)$$

• En revanche, lorsque l devient de l'ordre de λ_F , voire plus petit (soit $k_F l \sim 1$ ou $k_F l < 1$), il est indispensable de prendre en compte la nature ondulatoire des électrons qui conduit à des effets d'interférence. En particulier, la formule de Drude (1.7) n'est plus valable. On s'intéressera dans la section 1.3.2 aux propriétés du gaz bidimensionnel d'électrons dans ce régime de désordre.

Ainsi, le paramètre sans dimension $k_F l$ peut être utilisé comme indicateur de l'intensité du

¹Le degré de liberté de vallée correspond à la possibilité pour l'électron d'occuper divers minima de la bande de conduction du matériau logeant le gaz 2D. On en reparlera au §2.1.

²En effet, à faible désordre, la loi d'Ohm stipule que $g = \sigma L^{d-2}$ où d est la dimension de l'espace et L la taille du système. En particulier, à 2D, $g = \sigma$.

désordre vu par les électrons : plus $k_F l$ est petit, plus le désordre est important. Remarquons que la conductance exprimée en unité du quantum de conductance e^2/h est aussi une bonne mesure du désordre, tant que les interactions entre électrons peuvent être négligées, puisqu'elle s'identifie dans ce cas à $k_F l$ (d'après la formule de Drude (1.7) à 2D). En revanche, en présence d'interaction, seul $k_F l$ est un bon paramètre pour caractériser l'importance du désordre.

Par ailleurs, il est possible de montrer, pour un désordre blanc à deux dimensions et en supposant une relation de dispersion quadratique, que $k_F l$ est relié à la densité électronique n_s selon :

$$k_F l = \frac{4\pi\hbar^4}{Mm^2\gamma} n_s, \quad (1.8)$$

où γ est la constante caractérisant le bruit blanc, $\overline{v(\vec{r})v(\vec{r}')} = \gamma\delta(\vec{r} - \vec{r}')$. On montrera d'ailleurs cette dépendance au §3.3.2 dans le cas particulier du modèle d'Anderson (désordre blanc discrétisé). Ainsi, plus la densité électronique est faible, plus le désordre est important dans le système.

1.2 Vers la détermination du diagramme de phase désordre/interaction

La problématique générale qui sert de cadre à cette thèse est la détermination du diagramme de phase du gaz bidimensionnel d'électrons à température nulle. Autrement dit, on cherche à savoir, en fonction des paramètres d'interaction r_s et de désordre $k_F l$, si notre système d'étude est métallique ou isolant.

1.2.1 Le concept de métal et d'isolant

Un matériau est dit métallique si ses électrons sont capables de conduire le courant à l'état fondamental, c'est-à-dire si sa conductivité électrique σ est non nulle à température nulle ($\sigma(T=0) \neq 0$). Sinon il est dit isolant. Dans une vision à un corps où les électrons sont considérés indépendants, la première condition à remplir pour que le système puisse conduire le courant est que la densité d'états ne soit pas nulle au niveau de Fermi. Si au contraire il existe une bande d'énergie interdite autour de ce niveau (gap), le matériau est nécessairement isolant. Cependant, cette condition sur la densité d'états n'est pas suffisante pour distinguer un métal d'un isolant. Pour qu'un matériau soit métallique, il faut de plus que sa fonction d'onde électronique soit complètement délocalisée au niveau de Fermi. Dans les cristaux parfaits, cette seconde condition est toujours remplie mais en présence d'impuretés, il arrive que des états deviennent localisés dans une région finie de l'espace si bien qu'ils ne peuvent plus conduire le courant. Cette localisation est due au désordre introduisant des déphasages entre les fonctions d'onde électroniques et elle est connue sous le nom de localisation d'Anderson. On en reparlera en détail au §1.3.2. Etant intimement lié à la nature ondulatoire des électrons, ce phénomène de localisation ne peut se produire que sur distances inférieures ou égales à la longueur de cohérence de phase L_Φ qui est la longueur caractéristique sur laquelle l'électron garde sa phase. Comme celle-ci est reliée à la température T selon $L_\Phi \propto 1/T^p$, la limite théorique de température nulle est équivalente à la limite thermodynamique où $L_\Phi \rightarrow \infty$. Ainsi, pour qu'un matériau soit métallique au sens strict de température nulle, il est nécessaire que sa

fonction d'onde électronique soit délocalisée dans tout l'espace (on dit qu'elle est étendue). Bien sûr, en pratique, il suffit qu'elle le soit sur la taille de l'échantillon pour que les électrons puissent conduire le courant.

Dans ce travail de thèse, on considérera toujours le cas où la densité d'états est non nulle au niveau de Fermi et l'on se concentrera sur le caractère étendu ou localisé des fonctions d'onde électroniques.

1.2.2 Exploration expérimentale du diagramme de phase

Rigoureusement, la notion de métal et d'isolant est uniquement définie à température nulle mais bien sûr, dans les expériences, la température du gaz d'électrons n'est jamais nulle. Pour sonder le caractère métallique ou isolant du système, on mesure la dépendance en température de la conductivité, en refroidissant au maximum (il est possible de descendre jusqu'à quelques millikelvins). Le plus souvent, on dit que le système a un comportement métallique si sa conductivité augmente quand on baisse la température, puisqu'on peut alors s'attendre à une conductivité non nulle à température nulle. À l'inverse, on dit que le système a un comportement isolant si sa conductivité diminue lorsqu'il est refroidi.

Pour explorer expérimentalement le diagramme de phase désordre/interaction du gaz bi-dimensionnel, deux paramètres sont directement modifiables dans le dispositif expérimental. Le premier est la mobilité μ de l'échantillon, reliée à la conductance g par :

$$g = e \mu n_s . \quad (1.9)$$

A priori, μ dépend de la température T et de la densité de porteurs n_s mais s'il est bien précisé à quelle température et densité, la mobilité de l'échantillon est mesurée, celle-ci peut être considérée comme une grandeur caractéristique du désordre de l'échantillon, qui ne varie pas pendant la durée des mesures. Typiquement, on retiendra que plus elle est élevée, plus l'échantillon est propre. Le second paramètre est la densité de porteurs n_s , reliée au paramètre d'interaction r_s et au paramètre de désordre $k_F l$ par les équations (1.4) et (1.8). D'après ces équations, lorsque l'on varie la densité dans un échantillon donné, on explore le diagramme de phase (désordre $1/\sqrt{k_F l}$ /interaction r_s) selon une ligne droite passant par l'origine, de pente $1/\eta$, la constante η étant donnée par :

$$\eta \equiv r_s \sqrt{k_F l} = \frac{e^2}{2\pi\epsilon\sqrt{M}\gamma} . \quad (1.10)$$

Ainsi, lorsque l'on augmente par exemple la densité dans un échantillon, c'est à la fois le désordre et l'interaction que l'on diminue, même si la mobilité de l'échantillon reste fixe³. Pour estimer la constante η à partir des données expérimentales, ne connaissant pas γ , on se place dans la limite des très hautes densités. On se retrouve alors dans le régime diffusif ($k_F l \gg 1$) et l'on peut de plus négliger les interactions entre électrons car $r_s \ll 1$, si bien que l'on peut appliquer la loi d'Ohm (1.7) qui, combinée avec la relation (1.9), permet d'exprimer $k_F l$ en fonction de n_s et de la mobilité μ à très haute densité et basse température : $k_F l = 2h\mu n_s / eM$. On trouve ainsi :

$$\boxed{\eta \equiv r_s \sqrt{k_F l} = \frac{2\sqrt{\mu}e^{3/2}m}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar^{3/2}\sqrt{M}}} . \quad (1.11)$$

³L'un des avantages des calculs numériques, que l'on exploitera par la suite, est de pouvoir modifier indépendamment désordre et interaction dans le système.

En résumé, comme cela est représenté sur la figure 1.2, à chaque échantillon correspond une droite $y = x/\eta$ dans le diagramme de phase (désordre $1/\sqrt{k_{Fl}}$ /interaction r_s), dont la pente est donnée par l'intermédiaire de la mobilité μ de l'échantillon mesurée à haute densité et basse température et sur laquelle on se déplace en variant la densité de porteurs. C'est ainsi que le diagramme de phase désordre/interaction peut être exploré expérimentalement. Remarquons toutefois que le paramètre $\eta = r_s\sqrt{k_{Fl}}$ ne reste constant, lorsque l'on varie la densité n_s , que pour des désordres blancs (pour lesquels la relation (1.8) s'applique). En pratique, le désordre est corrélé spatialement et les électrons de la mer de Fermi écrantent partiellement les composantes à longue portée du désordre, de vecteur d'onde $k \leq k_F(n_s)$. Ainsi, on s'attend à ce que la mobilité diminue (et donc à ce que η augmente) lorsque la densité de porteurs est diminuée, puisqu'alors l'écrantage est moins efficace et les électrons deviennent sensibles à des composantes du désordre à plus longue portée. Dans la suite, on négligera ces effets.

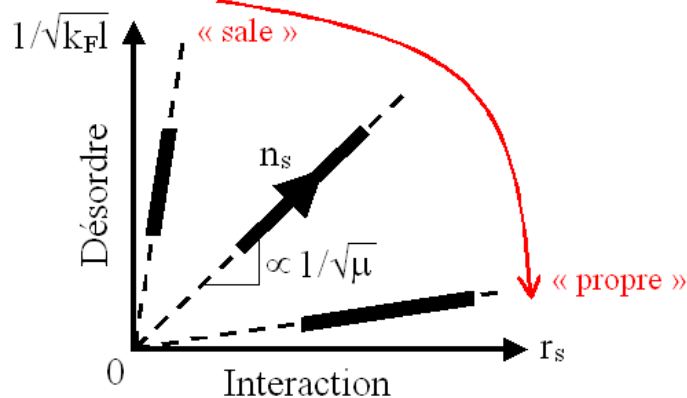


FIG. 1.1 – Représentation schématique de la trajectoire de trois échantillons dans le diagramme de phase (désordre $1/\sqrt{k_{Fl}}$ /interaction r_s), lorsque la densité de porteurs n_s est diminuée. Chaque échantillon parcourt un segment de droite, s'extrapolant à l'origine, dont la pente est directement reliée à la mobilité μ de l'échantillon en question, mesurée à haute densité et basse température.

1.2.3 Première ébauche du diagramme de phase

D'un point de vue théorique, la question de l'existence de métaux à deux dimensions a été traitée dans certaines limites extrêmes de désordre et d'interaction du diagramme de phase. A chaque fois, le gaz bidimensionnel d'électrons a été trouvé isolant à température nulle. Nous passons ici rapidement en revue les différentes théories qui ont ainsi conduit la communauté à penser qu'il ne pouvait exister d'état métallique à deux dimensions, puis nous reviendrons sur chacune d'entre elles dans la suite de ce chapitre :

- *sans interaction électronique*, la théorie d'échelle de la localisation d'Anderson [1] prédit qu'un désordre infinitésimal est suffisant pour localiser les fonctions d'onde électroniques et rendre le système isolant (voir §1.3.3).
- *dans la limite de faible désordre* ($k_{Fl} \gg 1$) *et faible interaction*, les calculs perturbatifs d'Altshuler-Aronov [6] montrent que les interactions dépeuplent le niveau de Fermi et diminuent la conductance du système, renforçant ainsi le caractère isolant (voir §1.4.3).
- *dans la limite classique de très fort désordre* ($k_{Fl} \ll 1$), la loi d'Efros-Shklovskii [75] nous apprend que les interactions annulent la densité d'états au niveau de Fermi et sont donc nuisibles à la conductance du système (voir §1.4.3).

- dans la limite de très fortes interactions et très faible désordre, le système cristallise sous la forme d'un cristal de Wigner [291] qui est accroché par le désordre et est donc isolant (voir §1.4.2).
- dans la limite de très fortes interactions et très fort désordre, la phase du gaz d'électrons n'est pas connue précisément. Il peut s'agir d'un verre de Wigner, fortement corrélé mais sans ordre. Ce qui est sûr, c'est que le système ne peut qu'être isolant. On ne cherchera pas à en savoir plus sur cette phase.

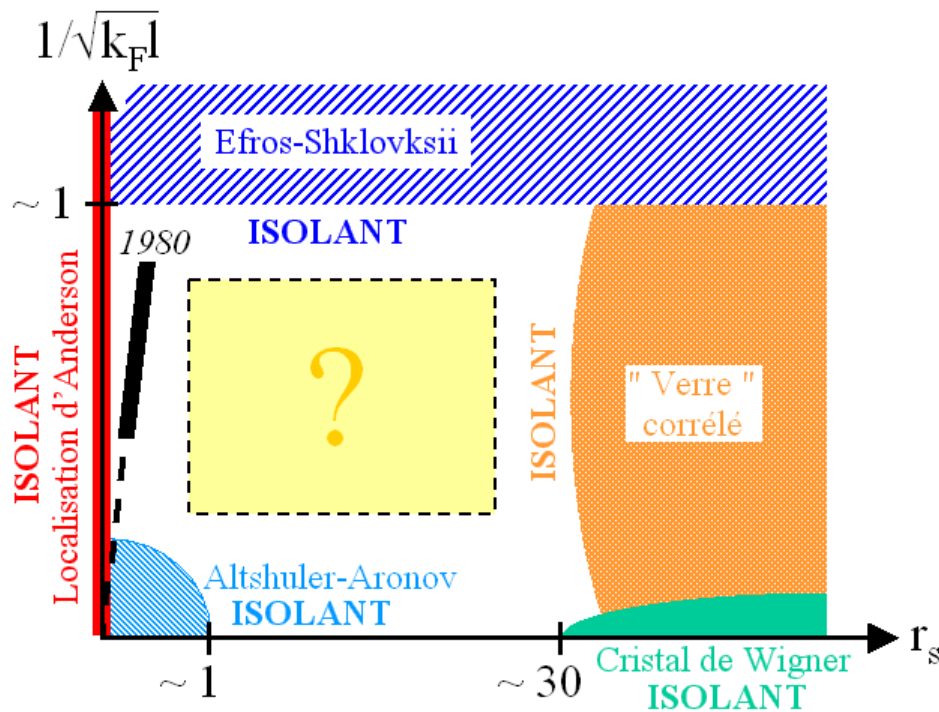


FIG. 1.2 – Diagramme de phase désordre/interaction du gaz bidimensionnel d'électrons à température nulle, tel qu'il était compris au début des années 90. Dans les limites externes, le système est isolant. Le segment noir sur la gauche indique la zone du diagramme dans laquelle se situaient les expériences des années 80, ne montrant que des comportements isolants. La zone centrale est inaccessible par des approches analytiques mais peut être explorée depuis peu expérimentalement. Des comportements métalliques y ont été observés mais restent inexpliqués.

Ces conclusions nous permettent de compléter le diagramme de phase du gaz bidimensionnel d'électrons à température nulle. Le diagramme obtenu est présenté sur la figure 1.2. Nous mettons en garde le lecteur sur le fait qu'il s'agit d'une représentation schématique simplifiée (il ne faudra donc pas donner de sens aux formes choisies pour les frontières). De plus, ce diagramme résume uniquement les théories antérieures aux années 90, jugées solides. Il faut donc le voir comme un point de départ, certes incomplet mais non controversé. Le message de ce diagramme est clair : dans toutes les limites où une théorie solide avait pu être développée à la fin des années 80, le désordre et/ou l'interaction conduisait à un état isolant. C'est pourquoi il était communément admis qu'il ne pouvait exister de métal à deux dimensions. Les expériences réalisées à l'époque semblaient confirmer ce paradigme [36, 66, 273] puisque seuls des comportements isolants étaient observés, même à très basse température. Cela dit, la mobilité des échantillons de l'époque n'étaient pas très élevée (au maximum 10^4 cm⁻²/Vs

pour des Si-MOSFETs), si bien qu'ils ne pouvaient explorer que la zone faiblement corrélée du diagramme, selon des lignes droites, comme nous l'avons expliqué à la section précédente. Pour donner une idée, la trajectoire typique d'un échantillon de l'époque dans le diagramme désordre/interaction a été représentée sur la figure 1.2 par un segment noir en gras.

A ce jour, aucune théorie analytique n'a été capable de traiter le régime intermédiaire de désordre et d'interaction car le problème est beaucoup trop complexe. En revanche, expérimentalement, la région centrale du diagramme est devenue accessible depuis une quinzaine d'années. Contre toute attente, des comportements métalliques y ont été observés et ils restent largement inexplicables. Dans cette thèse, nous proposons d'explorer à l'aide de méthodes numériques cette zone controversée du diagramme de phase, là où désordre et interaction entrent en compétition.

Dans la suite de ce chapitre, nous présentons une à une les différentes théories mentionnées ci-dessus et figurant sur le diagramme 1.2. Nous commençons par le cas du système désordonné sans interaction, qui est trouvé nécessairement isolant à 2D. Nous discuterons ensuite à la section suivante 1.4 des théories traitant des effets des interactions électron-électron.

1.3 Problème sans interaction : électrons dans un système désordonné

Dans cette partie, on considère un gaz de N électrons *sans interaction*, en présence d'un potentiel aléatoire $v(\vec{r})$ dû au désordre dans le système. Formellement, le fondamental de ce système est le déterminant de Slater des états propres du Hamiltonien à un corps :

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + v(\vec{r}) . \quad (1.12)$$

En général, il n'est pas possible de résoudre analytiquement ce problème (et en particulier de calculer la conductance g qui est la quantité intéressante pour discuter des propriétés de transport du gaz d'électrons). Le problème est effectivement complexe du fait de la nature ondulatoire des électrons. Il est important de rappeler à ce stade que le désordre (statique) n'est pas une source de décohérence. Autrement dit, la cohérence de phase électronique n'est pas détruite par le désordre. C'est pourquoi la présence du potentiel aléatoire $v(\vec{r})$ peut engendrer des effets d'interférences électroniques, à l'origine de phénomènes physiques très riches dont la localisation d'Anderson. La longueur caractéristique sur laquelle ces effets sont observables est la longueur de cohérence de phase L_ϕ . En général, elle doit être comparée à la taille L du système mais dans la suite, pour simplifier, on prendra $L = L_\phi$.

Nous commençons par présenter les approximations usuelles permettant de « résoudre » le problème à faible désordre. Puis nous introduisons les bases de la localisation d'Anderson, qui est le phénomène central étudié dans cette thèse. Nous insistons notamment sur la théorie d'échelle de la localisation dont le résultat principal est l'absence d'état métallique à deux dimensions.

Dans l'ensemble de cette section, aucune hypothèse n'est *a priori* faite sur la dimension d du système. Nous insisterons néanmoins sur le cas bidimensionnel.

1.3.1 De la solution classique aux premières corrections quantiques

On se limite ici aux systèmes faiblement désordonnés ($k_{Fl} \gg 1$). Les fonctions d'onde électroniques sont décrites par des ondes planes qui diffusent sur les impuretés. Nous précisons que les résultats énoncés ci-dessous sont valables dans le cas d'un modèle de désordre gaussien, pour lequel le désordre n'a pas de corrélations à longue distance. Le désordre blanc en est l'exemple le plus simple. Le lecteur pourra trouver compléments et démonstrations dans la référence [4] dont nous nous sommes inspirés (en particulier dans les chapitres 1, 4 et 7).

Les propriétés physiques du gaz d'électrons diffusés par des impuretés sont décrites pas la probabilité $P(\vec{r}, \vec{r}')$ pour un paquet d'onde électronique de se propager d'un point \vec{r} en un point \vec{r}' . Celle-ci s'écrit en fonction des amplitudes complexes $a_i(\vec{r}, \vec{r}')$, chaque a_i décrivant l'amplitude complexe de probabilité d'emprunter le chemin i pour aller de \vec{r} à \vec{r}' (voir la figure 1.3(a)) :

$$P(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{i,j} a_i^*(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}, \vec{r}') .$$

En particulier, on s'intéresse à la probabilité $\overline{P}(\vec{r}, \vec{r}')$ moyennée sur le potentiel aléatoire (c'est-à-dire sur les différentes configurations des centres diffuseurs) car celle-ci est directement reliée à la conductivité électrique σ . On décompose $\overline{P}(\vec{r}, \vec{r}')$ en deux contributions : celle donnée par les couples de chemins identiques (passant par les mêmes impuretés, dans le même ordre) et celle donnée par les couples de chemins distincts :

$$\overline{P}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i \overline{|a_i(\vec{r}, \vec{r}')|^2} + \sum_{i \neq j} \overline{a_i^*(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}, \vec{r}')} . \quad (1.13)$$

Le premier terme correspond au processus classique de diffusion multiple sur les impuretés tandis que le second terme contient les corrections quantiques dues aux interférences entre les différents chemins.

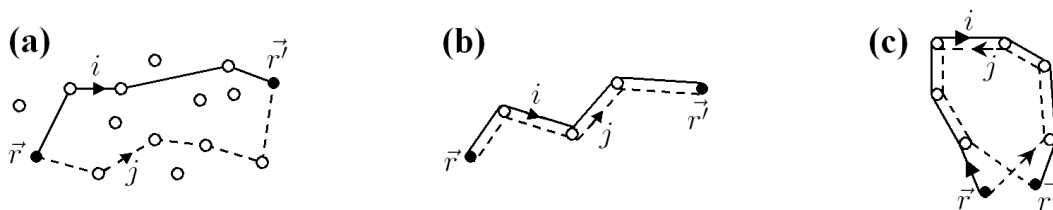


FIG. 1.3 – (a) Trajectoires typiques i et j de diffusion multiple sur les impuretés représentées par \circ . Les \bullet correspondent à des points quelconques du milieu. (b) Schéma du diffuson. (c) Schéma du cooperon. Dans le diffuson, les chemins i et j sont identiques et parcourus dans le même sens alors que dans le cooperon, ils forment une boucle parcourue dans des directions opposées.

Solution classique : approximation du diffuson

Dans le premier terme de l'équation (1.13), aucune phase n'apparaît. Ainsi ce terme n'est pas à l'origine d'effets de cohérence quantique : c'est la probabilité classique. Celle-ci prend en compte toutes les trajectoires appariées, parcourues dans le même sens, appelées diffusons

(voir la figure 1.3(b)). Elle est associée à la conductivité classique σ_D dite de Drude :

$$\sigma_D = M \frac{\pi^{d/2} e^2}{\Gamma(d/2 + 1) h} \left(\frac{k_F}{2\pi} \right)^{d-1} l, \quad (1.14)$$

où M est, rappelons-le, la dégénérescence de degrés de liberté internes et Γ , la fonction gamma d'Euler. La conductance classique g_D se déduit par la loi d'Ohm :

$$g_D(L) = \sigma_D L^{d-2}, \quad (1.15)$$

où L est la taille du système. Rappelons que l'expression (1.14) de la conductivité de Drude peut également se dériver dans le cadre de l'équation de Blotzmann, c'est-à-dire directement par une approche classique.

L'approximation classique (ou approximation du diffuson) est valable à faible désordre, dans le régime dit diffusif où $k_F l \gg 1$.

Correction quantique de localisation faible : contribution du cooperon

Le second terme de l'équation (1.13) est à l'origine des effets d'interférences quantiques. A faible désordre ($k_F l \gg 1$), il est dominé par la contribution des cooperons (voir la figure 1.3(c)), c'est-à-dire des couples de trajectoires (i, j) formant une même boucle parcourue dans des sens opposés. Dans un système invariant par renversement du temps, les deux trajectoires i et j acquièrent une même phase dans la boucle et interfèrent constructivement. Par conséquent, la probabilité de retour à l'origine $\overline{P}(\vec{r}, \vec{r})$ est doublée (par rapport à l'expression classique). Il s'ensuit une petite contribution négative $\delta\sigma_{WL}$ à la conductivité de Drude, appelée correction de localisation faible (« weak localization ») :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{quasi-1d} & : \delta\sigma_{WL} = -M \frac{e^2}{h} \frac{1}{S} (L - l) \\ d = 2 & : \delta\sigma_{WL} = -M \frac{e^2}{\pi h} \log \frac{L}{l} \\ d = 3 & : \delta\sigma_{WL} = -M \frac{e^2}{2\pi h} \left(\frac{1}{l} - \frac{1}{L} \right) \end{array} \right. \quad (1.16)$$

où le premier cas est celui d'un fil quasi-unidimensionnel de section S .

Puisque que l'on parle ici de localisation (faible), il est intéressant d'introduire une nouvelle longueur caractéristique ξ , dite longueur de localisation, qui estime la distance sur laquelle les électrons sont localisés. On peut l'évaluer en disant que ξ est la longueur typique pour laquelle la correction de localisation faible compense le terme de Drude ($\sigma_D + \delta\sigma_{WL} \approx 0$). D'après les équations (1.14) et (1.16), ξ est donnée à deux dimensions par :

$$\boxed{\xi_{2D} = l \exp \left(\frac{\pi}{2} k_F l \right)}. \quad (1.17)$$

Ainsi, la longueur de localisation ξ_{2D} augmente exponentiellement lorsque le désordre est diminué ($k_F l$ augmenté). *A priori*, l'équation (1.17) n'est valable que dans le régime diffusif où $k_F l \gg 1$. Pourtant, cette estimation perturbative de la longueur de localisation est souvent utilisée à plus fort désordre dans le régime de localisation d'Anderson (introduite au §1.3.2). Et cela à juste titre. On le montrera numériquement au §5.3.3.

Remarque sur les corrections de localisation faible (1.16)

L'équation (1.16) donne les corrections de localisation faible dans un système invariant par renversement du temps, où les trajectoires appariées (i, j) sont en cohérence de phase. Si cette invariance est brisée, par exemple par l'application d'un champ magnétique, le terme de localisation faible est supprimé et on observe une augmentation de la conductivité [31]. La correction de localisation faible (1.16) est aussi modifiée si un déphasage est introduit entre les chemins i et j (même sans brisure de l'invariance par renversement du temps). C'est le cas par exemple en présence d'un couplage spin-orbite. La correction $\delta\sigma_{WL}$ peut même devenir positive [113] : on passe alors d'un phénomène de localisation à un phénomène d'« antilocalisation ».

Développement perturbatif de la conductance dans le régime diffusif $k_F l \gg 1$

Ainsi, dans le régime de faible désordre $k_F l \gg 1$, il est possible de calculer perturbativement en $1/k_F l$ la conductivité σ du système, puis d'en déduire la conductance g par la loi d'Ohm $g = \sigma L^{d-2}$. Dans le cas bidimensionnel auquel nous nous intéressons, la conductance s'identifie à la conductivité et l'on peut écrire grâce à la formule de Drude (1.14) et aux corrections de localisation faible (1.16) :

$$g = \frac{e^2 M k_F l}{h} \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{1}{k_F l} \right) \frac{2}{\pi} \log \frac{L}{l} + O \left(\frac{1}{(k_F l)^2} \right) \right]. \quad (1.18)$$

Cette formule perturbative est limitée à l'ordre 1 en $1/k_F l$. Il se trouve que la correction suivante en $(1/k_F l)^2$ est déjà très difficile à calculer et on ne peut donner que des arguments concernant sa dépendance avec la taille du système [99]. Quant aux corrections d'ordres supérieurs, elles sont à ce jour incalculables ...

Le problème faiblement désordonné, sans interaction, est donc en soi un casse-tête pour le théoricien. Dans la suite, on s'intéresse aux propriétés du système à plus fort désordre. A cause des effets de cohérence quantique, la nature des fonctions d'onde électroniques est complètement modifiée et on ne peut plus les décrire par des ondes planes.

1.3.2 Localisation d'Anderson

Le concept de localisation d'Anderson⁴ a été introduit par Philip W. Anderson en 1958 dans son célèbre article « *Absence of diffusion in certain random lattices* » [14]. Il obtiendra d'ailleurs le prix Nobel pour cette découverte en 1977. L'idée est que dans un système suffisamment désordonné ($k_F l \leq 1$), les ondes électroniques diffusées par les impuretés interfèrent de manière destructive, si bien que l'électron se retrouve (exponentiellement) localisé sur une certaine longueur caractéristique ξ , appelée longueur de localisation. Nous insistons sur le fait que la localisation d'Anderson est une localisation quantique due à la nature ondulatoire des électrons. Il ne faut pas la confondre avec un simple piégeage classique (« trapping »). Dans ce cas, la particule est localisée dans un fort puits de potentiel car elle n'a tout simplement pas l'énergie suffisante pour s'en échapper. Au contraire, dans le régime de localisation d'Anderson, la particule est en mesure de se propager classiquement (car son énergie est plus grande que l'amplitude du désordre) mais quantiquement, elle est « bloquée » car localisée dans une région finie de l'espace (voir la figure 1.4). Comme les fonctions d'onde électroniques sont

⁴On parle aussi de localisation forte, par opposition à la localisation faible dans le régime diffusif $k_F l \gg 1$. Les corrections de localisation faible peuvent être considérées comme les prémices, à faible désordre, de la localisation d'Anderson. Le lien entre les deux phénomènes n'est néanmoins pas évident.

exponentiellement localisées dans ce régime, on s'attend à une décroissance exponentielle de la conductance g avec la taille L du système :

$$g(L) \propto \exp\left(-\frac{L}{\xi}\right). \quad (1.19)$$

La conséquence en est dramatique pour le transport : si au niveau de Fermi, tous les électrons sont localisés sur une longueur de localisation ξ alors à la limite thermodynamique (c'est-à-dire à température nulle) le courant ne peut plus circuler et la conductance s'annule : $g(T = 0) = 0$. On parle alors d'isolant d'Anderson. A température finie, le transport est néanmoins possible (voir la remarque ci-dessous).

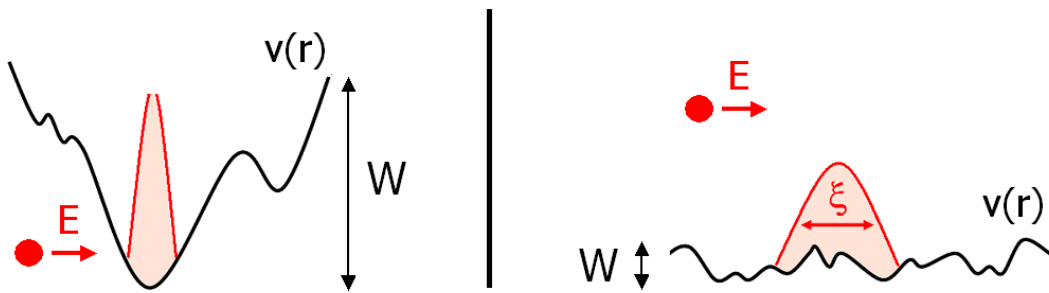


FIG. 1.4 – Propagation d'une particule quantique d'énergie E dans un potentiel aléatoire $v(r)$ d'amplitude W . A gauche (régime de « trapping »), la particule est piégée classiquement dans le puits de potentiel car $E \ll W$. A droite (régime de localisation d'Anderson), la particule est localisée par interférences destructives sur le potentiel bien que classiquement, elle puisse se propager. ξ est la longueur typique de localisation.

Remarque sur la dépendance en température de la conductivité dans l'isolant d'Anderson : loi de Mott (ou « variable range hopping »)

A température non nulle, le transport est possible dans l'isolant d'Anderson par activation thermique. En effet, si proche du niveau de Fermi les électrons sont exponentiellement localisés sur une longueur ξ , la probabilité p de sauter d'un état vers un autre état, séparé d'une distance r , est proportionnelle au recouvrement des deux fonctions d'onde $\exp(-r/\xi)$ et au facteur de Boltzmann $\exp(-\Delta E/k_B T)$, où ΔE est la différence d'énergie entre les deux états, k_B la constante de Boltzmann et T la température. On a donc :

$$p \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi} - \frac{\Delta E}{k_B T}\right).$$

Si de plus les électrons sont répartis spatialement de manière homogène, on a : $\Delta E \propto 1/(r^d \rho(E_F))$ où $\rho(E_F)$ est la densité d'états volumique prise ici au niveau de Fermi et d la dimension de l'espace. La distance r_{max} qui maximise p est alors donnée par :

$$r_{max} = \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/(d+1)} \quad \text{où } T_0 \text{ est une constante.}$$

On en déduit la dépendance en température de la conductivité σ , proportionnelle à p :

$$\sigma \propto \exp - \left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/(d+1)}. \quad (1.20)$$

La formule (1.20) est connue sous le nom de loi de Mott [167]. Une démonstration rigoureuse peut être trouvée dans [247, 42]. Ainsi, dans l'isolant d'Anderson, le transport peut être activé par la température entre des états localisés, éloignés spatialement mais proches en énergie. On parle de mécanisme de transport par « variable range hopping ».

La localisation d'Anderson a été vérifiée expérimentalement avec des photons [290], des ultrasons [114], des micro-ondes [60] ou encore des atomes froids [35]. Dans les systèmes d'électrons, il est plus difficile de la révéler car les interactions électroniques se rajoutent inévitablement au problème. Toutefois, l'observation dans des Si-MOSFETs d'une dépendance exponentielle de la conductivité avec la température, du type loi de Mott, a été interprétée comme une signature de la localisation d'Anderson [273].

D'un point de vue théorique, elle est encore mal comprise. Des milliers d'articles ont été écrits à son sujet. Le lecteur pourra notamment consulter, en guise d'introduction, les articles de revue [132, 276, 145]. Le cas unidimensionnel a été résolu analytiquement et il a été montré rigoureusement que tous les états sont exponentiellement localisés, quelque soit l'amplitude du désordre (même pour un désordre infiniment petit) [150]. En revanche, le cas bidimensionnel (auquel nous nous intéressons dans cette thèse) est encore insoluble mathématiquement. Des arguments physiques, plus intuitifs que techniques, ont néanmoins permis de montrer qu'à 2D, tous les états sont aussi localisés, quelque soit l'amplitude du désordre. En particulier, on a toujours un isolant à température nulle. Ces arguments sont développés dans la prochaine section.

1.3.3 Théorie d'échelle de la localisation

Dans cette section, g est la conductance du système exprimée en unité du quantum de conductance e^2/h . g est donc sans dimension. D'après ce que nous avons vu au §1.1.2, g peut être considérée comme une mesure de l'importance du désordre dans le système (décorrélé).

L'objectif de la théorie d'échelle est de décrire comment la conductance g évolue avec la taille L du système, en dimension d quelconque. Rappelons qu'à priori, g dépend de la taille L du système mais aussi d'autres paramètres comme l'amplitude du désordre, l'énergie de Fermi, la densité d'électrons ..., regroupés ici sous l'appellation générique α_i .

La première approche est celle de Thouless [267]. Il considère un système de volume $(bL)^d$, constitué de b blocs de volume L^d . Par des arguments énergétiques, il suggère que la conductance $g(bL)$ du système de volume $(bL)^d$ ne doit dépendre que de la conductance $g(L)$ d'un bloc et du nombre de blocs b :

$$g(bL, \alpha_i) = f(g(L, \alpha_i), b) . \quad (1.21)$$

A la limite continue, cette hypothèse revient à supposer l'existence d'une longueur ξ , indépendante de la taille du système, telle que la conductance g ne dépende que du rapport $\frac{L}{\xi}$:

$$g(L, \alpha_i) = F \left(\frac{L}{\xi(\alpha_i)} \right) . \quad (1.22)$$

Ainsi, différents couples (L, ξ) de rapports L/ξ égaux conduisent à la même conductance g . Cela revient à introduire une sorte d'équivalence entre varier la taille L du système et varier les autres paramètres α_i , comme notamment le désordre. Le paramètre ξ s'identifie comme la longueur de localisation du système thermodynamique.

Fonction d'échelle β à un paramètre

Une formulation équivalente de (1.22) a été donnée en 1979 par E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello et T. V. Ramakrishnan (dit « gang of four ») [1]. Elle s'énonce

en disant que la fonction $\beta(g, L, \alpha_i) = d \log g(L, \alpha_i) / d \log L$ dépend uniquement de g et pas de la taille L ou des autres paramètres α_i :

$$\boxed{\beta(g) = \frac{d \log g}{d \log L}}. \quad (1.23)$$

L'hypothèse (1.23) est une conséquence directe de l'hypothèse (1.22). Elle peut aussi être considérée comme la version différentielle de (1.21).

La fonction β est appelée fonction d'échelle à un paramètre. Il est possible de déterminer ses limites asymptotiques à faible et forte conductance :

- à forte conductance, dans le régime diffusif ($k_F l \gg 1$), la conductance est donnée par la loi d'Ohm (1.15) donc :

$$\beta(g) = d - 2. \quad (1.24)$$

Les corrections de localisation faible vérifient aussi la loi d'échelle (1.23) et conduisent à :

$$\beta(g) = d - 2 - \frac{a_d}{g}, \quad (1.25)$$

où $a_d = \frac{4\pi^{d/2-1}}{(2\pi)^d \Gamma(d/2)}$ [285].

- à faible conductance, dans le régime localisé ($k_F l \leq 1$), la conductance est exponentiellement petite (équation (1.19)) et donc :

$$\beta(g) = \log \frac{g}{g_0}, \quad (1.26)$$

où g_0 est une constante numérique d'ordre 1.

La courbe complète de $\beta(g)$ est déduite en supposant que l'on puisse interpoler entre ces deux limites. L'allure de la fonction β est représentée sur la figure 1.5(a).

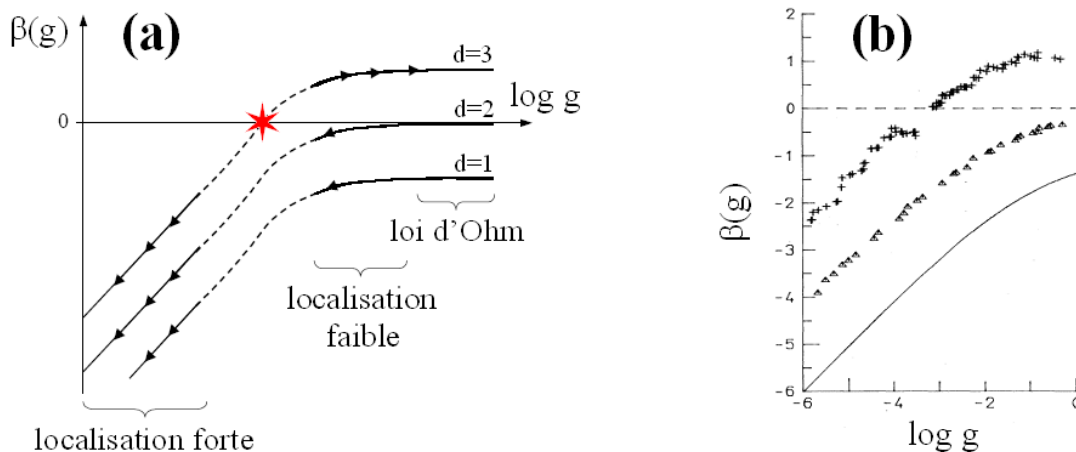


FIG. 1.5 – (a) Allure de la fonction $\beta(g)$ en fonction de $\log g$ en dimension $d = 1, 2$ et 3 (figure adaptée de [147]). Les flèches indiquent l'évolution de la conductance g quand on augmente la taille du système. (b) Calcul numérique de la fonction β sans interaction, dans [154].

Conséquences de la théorie d'échelle sur le transport électronique

Le signe de $\beta(g)$ est directement relié au caractère métallique ou isolant du système. En effet, si $\beta = d \log g / d \log L < 0$ alors la conductance g diminue lorsque la taille du système augmente. A la limite thermodynamique ($L \rightarrow \infty$), la conductance s'annule $g \rightarrow 0$ et le système est isolant. En revanche, si $\beta > 0$, le système est métallique. On constate sur la figure 1.5 (a) que :

- à une et deux dimensions, β est toujours strictement négative. Le système est donc isolant, même si le désordre est infiniment petit. Autrement dit, un désordre infinitésimal suffit à localiser les états sur une longueur de localisation ξ finie. Insistons sur le fait qu'il s'agit d'un isolant théorique à température nulle, et d'états localisés au sens thermodynamique. Bien sûr, pour un échantillon de taille finie, ξ peut devenir beaucoup plus grande que la taille du système si le désordre est suffisamment faible ($\beta \lesssim 0$) et alors pour toute considération pratique (expérimentale), le système est « métallique » (le courant peut passer).
- à trois dimensions, β s'annule en changeant de signe, comme l'indique le symbole étoile sur la figure 1.5 (a). Cela signifie qu'il existe une transition métal-isolant induite par le désordre.

Précisons que la dimension 2 est une dimension critique pour la localisation. En effet, d'après cette théorie d'échelle, il n'existe pas d'état métallique à deux dimensions mais dès la dimension $2 + \epsilon$ ($\epsilon \ll 1$), il existe une transition métal-isolant.

Vérification numérique de la théorie d'échelle sans interaction

Il est important de rappeler que la théorie d'échelle est basée sur l'hypothèse forte (1.22) (ou de manière équivalente (1.21) ou (1.23)). Celle-ci a été justifiée par des arguments « intuitifs » et vérifiée dans certaines limites mais de façon générale, elle résiste aux démonstrations analytiques. En revanche, il est possible de la tester numériquement. Ainsi, dès le début des années 80, A. MacKinnon et B. Kramer dans [153, 155] et J.-L. Pichard et G. Sarma dans [191, 192] ont vérifié l'existence du scaling à un paramètre (1.22), en résolvant numériquement et de manière exacte, le problème désordonné sans interaction (au centre de bande). Dans [154], A. MacKinnon et B. Kramer ont également calculé la fonction d'échelle β . Leurs résultats, présentés sur la figure 1.5(b) sont en très bon accord avec l'allure de β prédite par la théorie d'échelle (figure 1.5(a)). L'ensemble de ces travaux numériques ont donc permis de vérifier le bien-fondé de la théorie d'échelle, sans interaction.

L'une des questions posées dans cette thèse est de savoir si la théorie d'échelle de la localisation reste valable en présence d'interactions électroniques. En particulier, l'absence d'état métallique à 2D, prédit par la théorie d'échelle, persiste-t-elle si l'on introduit les corrélations? *A priori*, les arguments à la base de la théorie d'échelle ne prennent pas en compte les interactions et donc la question est entière. Nous présenterons au chapitre 5 une nouvelle méthode numérique, que nous avons développée, qui permet de calculer la fonction β avec interaction. Nous montrerons ensuite au chapitre 6, grâce à cette méthode, que la théorie d'échelle semble résister aux interactions.

1.4 Effets nuisibles au transport des interactions électro-niques

Dans cette section, nous passons en revue les théories bien connues traitant des effets de l'interaction électron-électron sur les propriétés de transport du gaz bidimensionnel. Nous commençons par un bref aparté sur la théorie de Landau du liquide de Fermi, selon laquelle les propriétés du gaz corrélé sont essentiellement les mêmes que celle du gaz sans interaction. Cette théorie semi-phénoménologique s'est souvent avérée très efficace mais elle ne dit pas dans quelle mesure elle est applicable au gaz bidimensionnel désordonné. Ensuite, nous présentons d'autres théories dont les domaines de validité sont annoncés comme très restrictifs (cristal de Wigner à forte interaction/faible désordre, corrections d'Altshuler-Aronov à faible interaction/faible désordre et loi d'Efros-Shklovskii à très fort désordre). Chacune conduit à un état isolant.

1.4.1 Approche effective : théorie de Landau du liquide de Fermi

La description théorique d'un système de fermions en interaction est extrêmement complexe. L'idée formulée par L. D. Landau à la fin des années 50 [143, 144], puis développée dans [175, 195, 194, 3], est de décrire les propriétés d'un tel système en se limitant aux excitations de basses énergies (autour du niveau de Fermi E_F), à basse température ($k_B T \ll E_F$). Dans cette limite, ces excitations sont supposées avoir une durée de vie très longue devant les autres temps de relaxation du système. C'est pourquoi chacune d'entre elles peut être traitée comme une quasi-particule indépendante des autres (ou très faiblement couplée), l'interaction étant prise en compte en renormalisant certains paramètres physiques comme la masse de la particule. En particulier, la notion d'énergie de Fermi persiste pour ces quasi-particules. Dans un système d'électrons, cette notion formelle de quasi-particule peut être appréhendée par l'image d'un électron accompagné de son nuage électronique écrantant l'interaction coulombienne. Ainsi, dans la théorie de Landau du liquide de Fermi, le problème à N corps se réduit à un problème effectif à un corps, au prix d'une renormalisation de certains paramètres. Ceux-ci, particulièrement difficiles à calculer, sont déterminés de façon phénoménologique, en les ajustant de manière à rendre compte au mieux des quantités mesurées expérimentalement.

La théorie de Landau s'est avérée extrêmement efficace et a ainsi permis de décrire une large classe de systèmes en physique du solide, même quand les interactions sont relativement fortes. A ce sujet, il est important de comprendre que cette théorie est non perturbative et est donc *a priori* valable pour des interactions aussi grandes que l'on veut. Ceci explique pourquoi des approches perturbatives en champ moyen (développées rigoureusement pour $r_s \ll 1$) continuent à s'appliquer à plus fortes interactions, dans un régime où les corrélations électroniques sont en principe trop importantes pour être négligées. Pour en revenir au gaz bidimensionnel d'électrons, celui-ci est bien décrit par un liquide de Fermi, en l'absence de désordre et à interactions « modérées ».

Cependant, il existe aussi de nombreuses situations où la théorie de Landau du liquide de Fermi ne s'applique pas. En effet, l'une des hypothèses fortes de cette théorie est l'existence d'une évolution continue du système sans interaction au système corrélé, au fur et à mesure que l'interaction est augmentée de manière adiabatique (de sorte que l'on puisse établir une correspondance biunivoque entre les états du système réel corrélé et ceux du système sans interaction). Dans certains cas, cette hypothèse n'est pas vérifiée et la théorie de Landau faillit.

On peut citer par exemple :

- le cas des systèmes unidimensionnels corrélés. Ceux-ci doivent être décrits par la théorie du liquide de Luttinger et non pas celle du liquide de Fermi [231, 277].
- le cas d’une interaction attractive, qui conduit à la formation d’un état supraconducteur [24].
- le cas d’une interaction répulsive trop forte, qui implique une réorganisation complète de la structure électronique. C’est le cas de l’isolant de Mott, ou du cristal de Wigner présenté à la prochaine section 1.4.2.

Ainsi, la théorie de Landau du liquide de Fermi est une théorie phénoménologique, non perturbative, dont le domaine de validité est à déterminer par confrontation à l’expérience. En particulier, on se demandera dans cette thèse si cette théorie est correcte pour décrire le gaz bidimensionnel d’électrons en présence de désordre (notamment dans le régime quantique de localisation d’Anderson). Nos résultats présentés au chapitre 6 semblent indiquer qu’elle le soit.

1.4.2 Solution à forte interaction et faible désordre : cristal de Wigner

Sans désordre et à température nulle, l’état stable du gaz bidimensionnel d’électrons résulte d’un compromis entre le terme d’énergie cinétique, qui tend à délocaliser les électrons, et le terme d’énergie Coulombienne qui tend à les repousser les uns des autres. A faible interaction, l’énergie cinétique l’emporte : le système est un liquide d’électrons itinérants délocalisés, bien décrit (comme nous venons de le voir à la section précédente 1.4.1) par la théorie de Landau du liquide de Fermi. En revanche, à fortes interactions ($r_s \gg 1$), c’est l’énergie d’interaction Coulombienne qui domine le comportement des électrons. Pour minimiser l’énergie électrostatique, les électrons maximisent la distance les séparant de leurs voisins, en s’arrangeant sur les noeuds d’un réseau périodique (hexagonal à 2D [38]), appelé cristal de Wigner (voir la figure 1.6). L’invariance par translation du liquide est donc brisée. Bien sûr, un électron ne peut pas être précisément localisé sur un noeud du réseau car sinon l’énergie cinétique de confinement divergerait (d’après le principe de Heisenberg) et déstabiliserait le cristal. Ainsi, finalement, chaque électron est confiné autour d’un noeud du cristal, sur une distance non nulle minimisant l’énergie totale du système. Tant que cette distance est plus petite que la distance moyenne entre électrons (a), le cristal de Wigner est bien défini.

Précisons que l’existence d’un tel cristal a été prédite théoriquement à deux et trois dimensions par E. Wigner dans les années 30 [291]. Depuis il a été observé expérimentalement à deux dimensions [142, 17], mais toujours pas à trois dimensions.

Fusion quantique du cristal de Wigner

Une importante littérature est consacrée à l’étude de la transition entre le cristal de Wigner (à fortes interactions) et le liquide de Fermi (à faibles interactions). A température finie, la fusion du cristal de Wigner est due aux fluctuations thermiques qui engendrent des défauts dans le cristal [129, 169, 296]. A température nulle, ce sont les fluctuations quantiques (liées à l’énergie cinétique) qui provoquent la fusion. Typiquement, deux scénarios ont été proposés pour cette fusion quantique dans le gaz bidimensionnel (sans désordre).

- Le premier scénario suppose que la transition est directe entre le cristal de Wigner et le liquide de Fermi. La valeur critique r_s^* du paramètre d’interaction à laquelle la transition

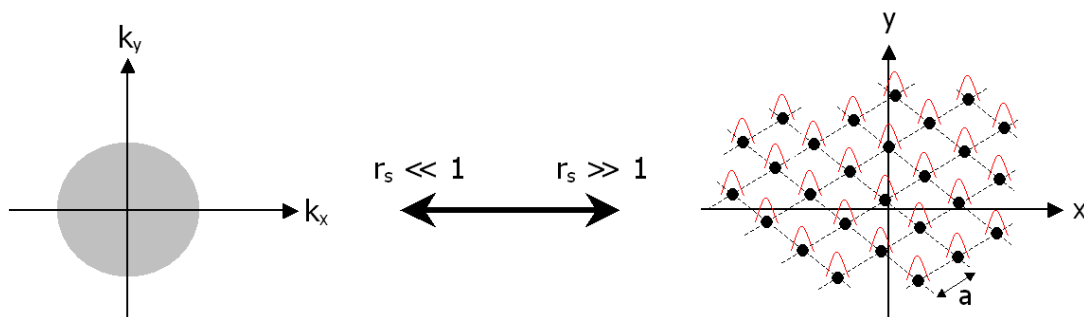


FIG. 1.6 – Passage du liquide de Fermi à faible interaction ($r_s \ll 1$) au cristal de Wigner à forte interaction ($r_s \gg 1$), illustré pour le cas bidimensionnel (sans désordre). Dans le liquide de Fermi, la surface de Fermi est bien définie (c'est un disque) et les électrons sont délocalisés spatialement. À l'inverse, dans le cristal de Wigner, les électrons sont localisés autour des sites du cristal mais la notion de surface de Fermi n'a plus de sens.

se produit, a été déterminée numériquement par B. Tanatar et D. M. Ceperley dans [263] : $r_s^* = 37 \pm 5$. Pour cela, les auteurs ont calculé très précisément l'énergie du système $E(r_s)$ pour la phase liquide et la phase solide, à l'aide d'une méthode Monte Carlo Quantique très proche de celle que nous utiliserons par la suite (voir le chapitre 4). Ils ont ainsi trouvé que la phase liquide est plus stable que le cristal de Wigner pour $r_s \leq r_s^* \approx 37$, et inversement. Ce résultat a été confirmé par F. Rapisarda et G. Senatore dans [221]. Dans cet article, les auteurs montrent de plus que le liquide non polarisé est stable pour $r_s \lesssim 20$ tandis que pour $20 \lesssim r_s \lesssim 37$, c'est le liquide polarisé qui devient le plus stable. Ainsi, le spin électronique peut être oublié à fortes interactions ($r_s > 20$) mais il doit être pris en compte à faibles interactions.

- Le second scénario envisage l'existence d'une (ou plusieurs) phase(s) intermédiaire(s) entre le liquide et le cristal. Il s'appuie sur divers arguments théoriques que nous ne développerons pas [16, 92, 176, 259]. D'un point de vue numérique, l'existence d'une phase hybride à interaction r_s intermédiaire a d'abord été défendue par J.-L. Pichard *et al* dans [121, 170, 171]. Dans ces travaux, les auteurs utilisent des méthodes de diagonalisation exacte et sont donc limités à l'étude de petits systèmes. Par la suite, la limite thermodynamique a été étudiée par H. Falakshahi pendant sa thèse [80], avec le même code Monte Carlo Quantique que celui que nous avons utilisé. Le résultat principal est l'existence d'une nouvelle phase stable entre le liquide de Fermi et le cristal de Wigner (pour $30 \leq r_s \leq 80$). Dans cette phase hybride, les électrons sont à la fois localisés sur un réseau triangulaire et délocalisés dans tout le système [81, 287].

Propriétés de conduction du cristal de Wigner

Le cristal de Wigner a été introduit ci-dessus en l'absence de désordre. Si l'on applique une différence de potentiel à un tel cristal, il se déplace dans son ensemble, sans dissipation. Sa résistivité est donc nulle : c'est un métal. En revanche, en présence d'un faible désordre⁵ (même très faible), le mouvement de translation du solide cristallin est bloqué par les impu-

⁵La première question à se poser est celle de la stabilité du cristal de Wigner malgré la présence du désordre. D'après les calculs numériques effectués dans [57], la présence d'un faible désordre favoriserait à deux dimensions la formation d'une phase corrélée ordonnée du type cristal de Wigner (la transition se ferait alors à des r_s de l'ordre de 10 plutôt que 30). Ces travaux restent cependant à être confirmés.

retés. On dit que le cristal de Wigner est accroché par le désordre. Dans ce cas, les électrons du solide ne peuvent pas conduire le courant : le cristal de Wigner est donc isolant.

Remarque : ne pas confondre cristal de Wigner et isolant de Mott

Le cristal de Wigner et l'isolant de Mott sont deux exemples de systèmes électroniques fortement corrélés, dans lesquels les électrons sont localisés (et bloqués) sur un réseau par une forte interaction répulsive. Mais il existe une différence d'importance entre ces deux systèmes. En effet, dans la physique de l'isolant de Mott [165, 166], un réseau ionique sous-jacent est pris en compte. Typiquement, on considère un électron par ion (bande à moitié remplie). A fortes interactions, chaque électron se localise sur un site du réseau ionique (qui est alors entièrement occupé) et un gap apparaît autour du niveau de Fermi. Ceci se comprend facilement dans un modèle de Hubbard où l'ajout d'un électron dans le système, sur un site déjà occupé, coûte une énergie d'interaction U (supposée plus grande que le gain en énergie cinétique). Ainsi, la densité d'états est nulle au niveau de Fermi : le système est isolant. Au contraire, dans le cristal de Wigner, ce réseau ionique n'existe pas ou est ignoré en se plaçant en bord de bande. Le caractère isolant du système n'est pas dû à la présence d'un gap dans la densité d'états mais à un faible désordre qui accroche le cristal.

1.4.3 Effet conjoint désordre/interaction dans certaines limites

Nous partons ici du gaz bidimensionnel désordonné et regardons l'effet des interactions. On a vu au §1.3 que même sans interaction, le problème est trop complexe pour être résolu à désordre arbitraire. Ainsi, les théories présentées ci-dessous sont limitées à des régimes extrêmes de faible et fort désordre. Cela signifie qu'elles ne traitent en aucun cas de l'effet des interactions sur le régime quantique de localisation d'Anderson. Dans leur domaine de validité, elles montrent que les interactions dépeuplent le niveau de Fermi et sont donc nuisibles au transport.

Effet des interactions sur le problème désordonné dans le régime diffusif

L'effet d'interactions répulsives dans le gaz bidimensionnel d'électrons a été étudié au début des années 80 par B. L. Altshuler et A. G. Aronov [7] à faible désordre, dans le régime diffusif ($k_F l \gg 1$). Les auteurs utilisent une méthode diagrammatique permettant essentiellement de calculer perturbativement les corrections Hartree-Fock au diffuson [4]. Dans l'article initial [7], seul le premier ordre en interaction est calculé mais il est aussi possible de sommer à tout ordre la classe des diagrammes Hartree-Fock [84, 6]. Dans cette approximation, la correction $\delta\sigma_{ee}$ à la conductivité de Drude σ_D , due aux interactions, s'écrit :

$$\delta\sigma_{ee} = -\frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \left(2 - \frac{3}{2}\tilde{F}\right) \log\left(\frac{\hbar}{k_B T\tau}\right), \quad (1.27)$$

à basses températures $k_B T \ll \hbar/\tau$ (*i.e.* dans le régime diffusif). Ici τ est le temps moyen de diffusion élastique et \tilde{F} est un paramètre donnant l'importance du terme d'Hartree par rapport au terme de Fock (dépendant de la dégénérescence de spin et de la portée des interactions). Pour des électrons sans spin (polarisés) et une interaction coulombienne, $\tilde{F} = (4/3)\log 2$ et donc on a toujours $\delta\sigma_{ee} < 0$. Autrement dit, les interactions renforcent le caractère isolant du gaz bidimensionnel d'électrons⁶. Signalons que cette diminution de la conductivité s'associe

⁶D'autres travaux, contemporains de ceux d'Altshuler et Aronov, et basés sur des méthodes de renormalisation, ont montré qu'avec spin, la correction $\delta\sigma_{ee}$ peut devenir positive et même stabiliser un métal [47, 85]. Cependant, ces conclusions n'ont pas été prises au sérieux, dans la mesure où elles outrepassaient le domaine de validité de la théorie. Nous en reparlerons au §2.6.1.

à une diminution de la densité d'états au niveau de Fermi [6, 4]. Elle est du même ordre de grandeur que la correction de localisation faible à 2D (1.16) mais d'origine physique très différente.

Pour aller un peu plus loin dans la compréhension de l'équation (1.27), on peut signaler que le facteur $(2 - \frac{3}{2}\tilde{F})$ traduit une compétition entre la contribution du terme de Fock (le « 2 ») qui tend à faire baisser la conductance et celle du terme d'Hartree (le « $-\frac{3}{2}\tilde{F}$ ») qui tend à l'augmenter. Ceci peut s'interpréter en disant que le terme d'Hartree délocalise le système, en lissant le potentiel aléatoire. En revanche, le terme de Fock qui décrit l'échange entre électrons (indiscernabilité) localise le système. Il est important de garder en mémoire cette interprétation car elle constitue l'une des seules compréhensions « intuitives » que l'on peut avoir concernant l'effet des interactions sur le problème désordonné.

Enfin, nous insistons sur le fait que la correction d'Altshuler-Aronov (1.27) n'est valable qu'à faibles interactions (tant que le système peut être décrit par un liquide de Fermi) et faible désordre ($k_F l \gg 1$). En particulier, la correction a été calculée uniquement sur le diffuson, qui ne contient pas les effets quantiques du désordre. La correction au cooperon (première trace quantique du désordre) a également été calculée dans [6]. Elle est trouvée proportionnelle à celle du diffuson, et de même signe pour l'interaction Coulombienne.

Effet des interactions sur le problème désordonné dans le régime de « trapping »

On se place à présent dans la limite inverse de très fort désordre, dit régime de « trapping ». Chaque électron (« piégé » par le désordre) est supposé localisé sur un seul site, de sorte que le recouvrement entre les fonctions d'onde peut être négligé. On se ramène ainsi à un problème classique, sans énergie cinétique. En l'absence d'interaction, le système a une densité d'états constante.

L'effet des interactions coulombiennes sur un tel système a été étudié par A. L. Efros et B. I. Shklovskii en 1975 [75] (le fait que les interactions soient à longue portée est essentielle). Les auteurs ont montré que la densité d'états $\rho(E)$ proche du niveau de Fermi E_F est diminuée par les interactions selon :

$$\rho(E) \sim (E - E_F)^{d-1} , \quad (1.28)$$

où d est la dimension de l'espace. Autrement dit, les interactions dépeuplent le niveau de Fermi. On parle de gap de Coulomb, même s'il ne s'agit pas d'un véritable gap puisque la densité d'états s'annule seulement au niveau de Fermi ($E = E_F$). Les arguments conduisant à l'équation (1.28) sont exposés ci-dessous.

Bien sûr, le gap de Coulomb est nuisible aux propriétés de transport du système. Plus précisément, la loi de Mott (1.20) (voir la remarque du §1.3.2) donnant la dépendance $\sigma(T)$ de la conductivité en fonction de la température dans l'isolant d'Anderson, sans interaction, doit être corrigée. Elle devient :

$$\sigma(T) \propto \exp - \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} , \quad (1.29)$$

quelque soit la dimension d . L'équation (1.29) est connue sous le nom de loi d'Efros-Shklovskii.

Enfin, la prise en compte de l'énergie cinétique (négligée jusqu'à présent) peut conduire à la fermeture du gap de Coulomb si les fluctuations quantiques compense l'effet des interactions. Typiquement, la fermeture est attendue pour $r_s \sim 1$ [187, 286]. Ainsi, dans l'isolant d'Anderson, la dépendance en température de la conductivité est donnée par la loi de Mott

à faible interaction ($r_s \lesssim 1$) et par la loi d'Efros-Shklovskii à forte interaction ($r_s \gtrsim 1$). Cette transition constitue un effet flagrant des interactions coulombiennes, observable expérimentalement [123].

Justification de la loi d'Efros-Shklovskii (1.28) et (1.29)

On présente ici la dérivation effectuée dans [75]. Celle-ci a été ensuite complétée dans [73]. On considère un système classique d'électrons dans un potentiel v . L'énergie du fondamental est donnée par :

$$E_0 = \sum_i n_i E_i = \sum_i n_i \left(v_i + \frac{U}{2} \sum_{j \neq i} \frac{n_j}{r_{ij}} \right),$$

où E_i est l'énergie d'un électron au site i , v_i la valeur du potentiel v au site i , r_{ij} la distance entre deux sites i et j , n_i le nombre d'occupation au site i (0 ou 1) et $U = e^2/4\pi\epsilon$ le paramètre d'interaction. Bien que le système soit corrélé, on peut définir à température nulle une énergie de Fermi E_F telle que tous les états d'énergie inférieure soient occupés et tous les autres soient vides.

Partant du fondamental à température nulle, on suppose qu'un état excité de basse énergie s'obtient en déplaçant un électron d'un site occupé i (d'énergie $E_i < E_F$) vers un site inoccupé j (d'énergie $E_j > E_F$). L'énergie nécessaire pour créer cette excitation particule/trou est nécessairement positive (par définition d'une excitation) et est donnée par :

$$\Delta E_{ij} = E_j - E_i - \frac{U}{2r_{ij}} > 0.$$

La soustraction du dernier terme $U/2r_{ij}$ permet d'annuler l'énergie d'interaction entre i et j contenue dans E_j , puisqu'après le mouvement, le site i est vide.

Puisqu'on s'intéresse aux états de basse énergie, les états i et j sont pris proches du niveau de Fermi, dans un intervalle de largeur ϵ : $E_j - E_i < \epsilon$. Ceci entraîne d'une part $U/2r_{ij} < \epsilon$, d'après l'inégalité sur ΔE_{ij} . D'autre part, on peut supposer que les $N(\epsilon)$ états de cet intervalle sont répartis aléatoirement dans l'espace de volume L^d donc $N(\epsilon) \sim (L/r_{ij})^d$. On en déduit pour la densité d'états volumique :

$$\rho(\epsilon) \equiv \frac{1}{L^d} \frac{N(\epsilon)}{\epsilon} < A \frac{\epsilon^{d-1}}{U^d},$$

où A est une constante. Cette inégalité est supposée être une égalité, ce qui donne (1.28).

Il est ensuite trivial de retrouver la loi d'Efros-Shklovskii (1.29) pour la conductivité $\sigma(T)$ en reprenant la démonstration de la loi de Mott (1.20). La seule différence est qu'à présent (avec interactions), la densité d'états n'est pas constante autour du niveau de Fermi mais est donnée par (1.28).

Au terme de ce chapitre, il apparaît que dans toutes les limites étudiées, le désordre et les interactions conduisent le gaz bidimensionnel vers un état isolant. Ainsi, à la fin des années 80, il semblait ne pas y avoir de place pour un métal dans le diagramme de phase du gaz 2D. A l'époque, les expériences confirmaient ce scénario. Dans ce contexte, on comprend que la communauté soit d'abord restée sceptique lorsqu'en 1994, S. V. Kravchenko *et al* annoncent avoir observé des comportements métalliques dans des MOSFETs au Silicium [134]. Mais rapidement, il a bien fallu admettre la contradiction entre les théories développées antérieurement et les nouvelles mesures expérimentales qui persistaient à montrer d'étranges comportements métalliques. C'est ainsi que, parallèlement aux efforts expérimentaux, l'activité théorique a été relancée. Aujourd'hui, quinze ans après, aucun consensus n'a encore été trouvé. Ce que l'on sait sur ces comportements métalliques, c'est qu'ils apparaissent au « centre » du diagramme de phase désordre/interaction dans un régime qui jusqu'alors était resté inexploré. Or, la théorie d'échelle de la localisation, qui prédit toujours un isolant à température nulle, a été développée pour un désordre quelconque mais en négligeant les interactions électron-électron.

Il se pourrait donc bien que la clé de ces comportements métalliques réside dans les interactions électroniques et leur effet sur la localisation d'Anderson. A ce sujet, D. Shepelyansky a montré en 1994 qu'une interaction répulsive locale peut partiellement briser la localisation d'Anderson et ainsi faire augmenter la conductance du système [243]. Ce résultat a suscité un fort engouement de la part de la communauté puisque l'idée communément admise à l'époque était que désordre et interaction étaient au contraire nécessairement nuisibles au transport. Cependant, le modèle utilisé ne considérait que deux particules à une dimension et il n'était pas du tout sûr que l'effet observé persiste pour des modèles plus proches des systèmes expérimentaux. Dans cette thèse, nous proposons d'explorer à l'aide de méthodes numériques le « centre » du diagramme de phase, où localisation d'Anderson et interactions sont indissociables, en nous appuyant sur un modèle simple mais réaliste de gaz bidimensionnel.

Nous présentons dans le prochain chapitre une brève revue des « nouvelles » expériences montrant des comportements métalliques à 2D, ainsi qu'un aperçu des différents scénarios proposés pour les expliquer.

Chapitre 2

Observation de comportements métalliques dans des échantillons bidimensionnels

Sommaire

| | |
|--|-----------|
| Résumé du chapitre 2 | 42 |
| 2.1 Quelques notions sur les échantillons expérimentaux | 43 |
| 2.1.1 Transistor à effet de champ Si-MOSFET | 43 |
| 2.1.2 Hétérostructure semi-conductrice | 45 |
| 2.2 Comportement métallique inattendu | 46 |
| 2.3 Analyse critique des échantillons « métalliques » | 50 |
| 2.3.1 Diagramme de phase expérimental | 51 |
| 2.3.2 Importance des interactions | 53 |
| 2.3.3 Le paradoxe du désordre | 53 |
| 2.3.4 Des échantillons à « haute » température | 54 |
| 2.4 Indice expérimental : rôle du spin | 56 |
| 2.4.1 Effet d'un champ magnétique parallèle | 56 |
| 2.4.2 Susceptibilité de spin au voisinage de la transition métal-isolant | 60 |
| 2.5 Indice expérimental : rôle des vallées | 62 |
| 2.5.1 Effet métallique accru en présence de dégénérescence de vallées | 62 |
| 2.5.2 Equivalence entre les degrés de liberté de spin et de vallée | 62 |
| 2.6 Revue des propositions théoriques | 63 |
| 2.6.1 Approche par le liquide de Fermi à faible interaction : calculs perturbatifs | 64 |
| 2.6.2 Approche par le cristal de Wigner à forte interaction | 66 |
| 2.6.3 Théories semi-classiques « sans » interaction | 67 |
| 2.6.4 Modèles de percolation | 69 |
| 2.6.5 Autres propositions théoriques | 70 |
| 2.7 Quelques tentatives numériques | 71 |

Résumé du chapitre 2

A la fin des années 80, on pensait que tout gaz bidimensionnel d'électrons était nécessairement isolant et donc que la résistivité d'un tel système devait diverger à température nulle (voir le chapitre 1). Les expériences semblaient d'ailleurs confirmer ce paradigme. Pourtant, en 1994, S. V. Kravchenko *et al* ont observé dans des Si-MOSFETs des comportements métalliques, c'est-à-dire une baisse de la résistivité ρ quand la température T est diminuée (§2.2). Depuis, cette expérience a été reproduite dans divers échantillons (dans des Si-MOSFETs mais aussi dans des gaz d'électrons ou de trous à l'interface d'hétérostructures GaAs, AlAs ou SiGe).

La nouveauté des échantillons présentant un comportement métallique, par rapport à ceux des années 80 toujours isolants, est leur très haute mobilité rendant possible la réalisation de mesures expérimentales à très basse densité. Trois conséquences s'en suivent (§2.3) :

- ces nouveaux gaz 2D sont beaucoup plus corrélés que les anciens. Le paramètre d'interaction r_s est de l'ordre de 5 – 10 dans la « phase métallique ».
- le désordre $k_F l$ est à peu près le même, car le fait que $k_F l$ diminue avec la densité est compensé par le fait qu'il augmente avec la mobilité. Au final, on a $k_F l \approx 1$ ce qui signifie que les effets d'interférence quantique liés au désordre (localisation d'Anderson) sont *a priori* présents.
- la température de Fermi T_F est beaucoup plus basse dans les nouveaux échantillons et donc le rapport T/T_F n'est pas si petit. Plus précisément, la température caractéristique à laquelle la résistivité varie dans la « phase métallique » est de l'ordre de $T/T_F \approx 20\%$. Ce n'est donc pas seulement l'état fondamental à $T = 0$ qui est impliqué dans ces expériences mais aussi les états excités.

Par ailleurs, il a été montré que les comportements métalliques sont supprimés par l'application d'un champ magnétique parallèle (dans le plan du gaz 2D) suffisamment fort pour polariser le spin de tous les porteurs. Ainsi, les expériences nous montrent que le spin est un ingrédient essentiel dans l'observation des comportements métalliques (§2.4). Il en est de même pour le degré de liberté de vallée, associé à la dégénérescence de la structure de bande du matériau logeant le gaz 2D. En effet, la chute de la résistivité dans la « phase métallique » est beaucoup plus importante dans les Si-MOSFETs possédant deux vallées, que dans les hétérostructures GaAs n'en possédant qu'une (§2.5).

Malgré la multitude de travaux théoriques proposant une explication aux comportements métalliques, la communauté n'est encore parvenue à aucun consensus (§2.6). Il est vrai que le problème n'est pas simple car à la fois le désordre et les interactions sont importants dans ces systèmes de basse densité. Certains auteurs défendent l'existence d'une vraie phase métallique à température nulle, stabilisée par les interactions. D'autres adoptent un point de vue conservateur, selon lequel les comportements métalliques ne seraient qu'un effet de température finie, disparaissant à très basse température. D'un point de vue numérique, plusieurs travaux ont montré un effet de délocalisation par les interactions mais ils sont limités à de trop petits systèmes pour pouvoir conclure quant à la limite thermodynamique (§2.7).

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux expériences qui ont relancé le débat sur la question de l'existence de métaux à deux dimensions. Pour donner une idée du trouble qu'elles ont suscité au sein de la communauté, signalons que plus de 500 publications ont été recensées sur le sujet depuis l'observation des premiers comportements métalliques dans des Si-MOSFETs, par S. V. Kravchenko *et al*, en 1994 [134]. Ainsi, nous n'essaierons pas de faire une liste exhaustive des différents résultats expérimentaux ou propositions théoriques s'y rapportant. Le lecteur ayant besoin d'une telle information pourra consulter les articles de revue [2, 136, 147, 207].

Nous commençons ce chapitre par une description des échantillons utilisés dans les expériences. Il est inutile de la lire si ces dispositifs sont familiers au lecteur. Puis, nous rentrons dans le vif du sujet en présentant les principales expériences ayant montré des comportements métalliques. Notre objectif est double. D'une part, nous essayons de dégager les ingrédients physiques essentiels à la discussion de ces comportements, car nous les utiliserons ensuite pour construire notre modèle au chapitre 3. D'autre part, nous souhaitons introduire suffisamment le lecteur au sujet pour qu'il puisse lire à profit le chapitre 7 où nous analyserons minutieusement ces données expérimentales, à la lumière de nos résultats numériques. Nous finissons le chapitre par une discussion des différentes tentatives, théoriques et numériques, d'explication des comportements métalliques. Celle-ci peut être sautée en première lecture, sans compromettre la compréhension de nos résultats aux chapitres suivants.

2.1 Quelques notions sur les échantillons expérimentaux

Dans cette partie, nous expliquons brièvement comment il est possible de fabriquer expérimentalement des gaz bidimensionnels d'électrons (ou de trous). Deux dispositifs sont présentés : le Si-MOSFET (Silicium metal-oxide-semiconductor field-effect transistor) et l'hétérostructure semi-conductrice, en particulier l'hétérostructure GaAs/GaAlAs. L'accent est mis sur les caractéristiques différentes des deux types de gaz bidimensionnels formés dans ces dispositifs : dans les Si-MOSFETs, les porteurs du gaz 2D ont une double dégénérescence de vallées et sont sensibles à un désordre à courte portée alors que dans les hétérostructures GaAs/GaAlAs, le désordre est à plus longue portée et les porteurs n'occupent qu'une seule vallée.

2.1.1 Transistor à effet de champ Si-MOSFET

Principe de formation d'un gaz 2D dans un Si-MOSFET

Le Si-MOSFET est un transistor à effet de champ bien connu, en tant que composant de base de nos ordinateurs ou téléphones portables. Comme cela est représenté sur la figure 2.1 (a), il est constitué d'une bicouche semi-conducteur Si/isolant SiO₂ sur laquelle est déposé un mince film métallique (grille) porté à un potentiel V_g . Si V_g est positif (par rapport à celui du semi-conducteur Si), les électrons du Silicium sont attirés vers la grille mais restent bloqués par l'isolant au niveau de l'interface Si/SiO₂. Plus précisément, le champ électrique \vec{E} entre la grille et le semi-conducteur, dû à l'application d'une tension sur la grille, conduit à une déformation de la structure de bande selon la direction z (définie sur la figure 2.1 (a)), qui se calcule par l'équation de Poisson. Ainsi apparaît un puits de potentiel triangulaire selon z , à l'interface Si/SiO₂, dans lequel les niveaux électroniques sont quantifiés. A basse

température, seul le premier niveau est occupé et les électrons forment alors un gaz purement bidimensionnel¹, à l'interface Si/SiO₂. En pratique, le procédé est rendu plus efficace en dopant positivement le Silicium. Remarquons qu'il est aussi possible de fabriquer un gaz bidimensionnel de trous en appliquant une tension $V_g < 0$ et en dopant négativement le Silicium. Dans les deux cas (gaz 2D de trous ou d'électrons), la densité de porteurs n_s peut être modifiée en variant la profondeur du puits de potentiel par l'intermédiaire de V_g . n_s est ensuite mesurée en présence d'un champ magnétique perpendiculaire \vec{B} via la pente de la résistance Hall en fonction de B ou la fréquence des oscillations Shubnikov de Haas.

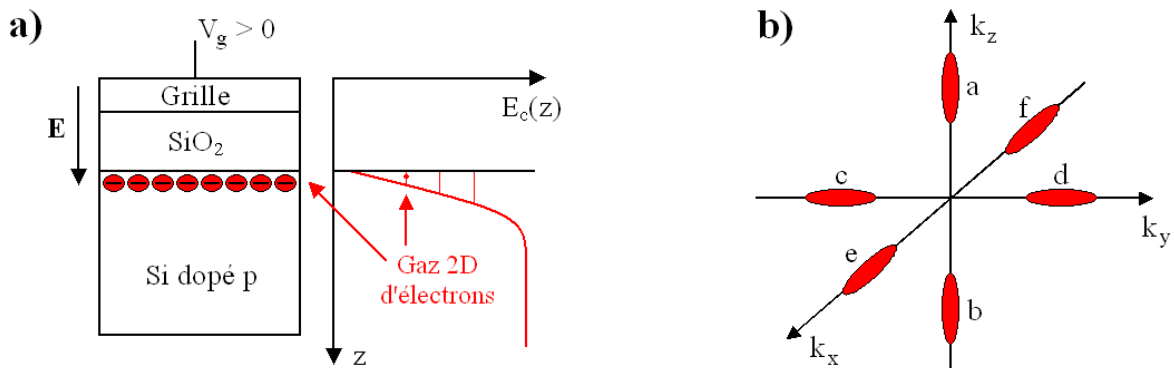


FIG. 2.1 – (a) Réalisation d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans un Si-MOSFET, à l'interface Si/SiO₂, par application d'une tension de grille $V_g > 0$. Le profil du minimum de la bande de conduction $E_c(z)$ présente un puits de potentiel à l'interface, dans lequel les électrons sont piégés. (b) Surfaces iso-énergétiques de la bande de conduction (la plus basse) du Silicium, dans l'espace réciproque. Dans un Si-MOSFET orienté selon l'une des directions k_x , k_y ou k_z , il ne reste plus pour le gaz 2D que deux vallées dégénérées de plus basse énergie, parmi les six.

Principales caractéristiques des gaz 2D formés dans les Si-MOSFETs

Il est important de mentionner les caractéristiques des gaz bidimensionnels formés dans les Si-MOSFETs, qu'il faudra comparer à celles des gaz bidimensionnels formés dans les hétérostructures (voir §2.1.2). Ainsi, dans les Si-MOSFETs, le désordre est dû à la présence de défauts à l'interface Si/SiO₂ et est donc essentiellement à courte portée. De plus, les interactions coulombiennes entre les électrons du gaz bidimensionnel sont écrantées par les charges positives du métal. Enfin (et c'est sans doute le point le plus important), la dégénérescence de la structure de bande du Silicium induit une double dégénérescence de vallées pour les électrons du gaz 2D. En effet, le minimum de la bande de conduction du Silicium n'est pas centrée dans la zone de Brillouin ($k = 0$) mais est atteint en six différents points de cette zone, distincts du centre. On parle de semi-conducteur à gap indirect. Comme cela est représenté sur la figure 2.1 (b), les surfaces iso-énergétiques de cette bande de conduction, appelées vallées, correspondent à des ellipsoïdes centrées autour de ces six points [20]. Si à présent, on confine les électrons à l'interface Si/SiO₂ et que de plus, le Silicium est orienté de sorte que les

¹Le gaz d'électrons formé est bidimensionnel dans le sens où les électrons n'ont pas de degré de liberté selon la direction z . Le gaz a néanmoins une épaisseur non nulle, à cause de la largeur finie du puits de potentiel qui induit une extension finie des fonctions d'onde électroniques selon z . Celle-ci entraîne notamment des effets orbitaux et modifie l'énergie coulombienne, par rapport au cas strictement bidimensionnel. On la négligera dans notre modèle.

directions z et k_z de la figure 2.1 coïncident, alors les deux vallées a et b deviennent énergétiquement favorables par rapport aux autres vallées c, d, e et f . Finalement, le gaz d'électrons a donc une double dégénérescence de vallées² et dans chacune, l'énergie est bien décrite par une relation quadratique (car la projection des vallées a et b dans le plan $k_z = 0$ est un disque). Par symétrie, on arrive à la même conclusion que le Silicium soit orienté dans les directions k_x, k_y ou k_z , notées dans la littérature [100], [010] et [001]. Dans la suite, la dégénérescence de vallées pourra simplement être comprise comme un degré de liberté supplémentaire pour l'électron (occuper la vallée a autour de k_1 ou occuper la vallée b autour de k_2), au même titre que le degré de liberté de spin (avoir un spin up ou un spin down).

Le lecteur pourra trouver dans la revue [15] des compléments sur les Si-MOSFETs et leurs vallées.

2.1.2 Hétérostructure semi-conductrice

Principe de formation d'un gaz 2D dans une hétérostructure

Il est aussi possible de former un gaz bidimensionnel de porteurs à l'interface entre deux semi-conducteurs de gaps différents, par exemple GaAs et GaAlAs. Le principe de ces dispositifs, appelés hétérostructures semi-conductrices, est illustré sur la figure 2.2. La bicouche GaAs/GaAlAs est surmontée d'une mince couche de GaAlAs, dopée négativement (par du Silicium), qui fournit des électrons libres au système. Ceux-ci cherchent à peupler le GaAs car la bande de conduction de ce semiconducteur est plus basse énergétiquement que celle du GaAlAs. En contrepartie, les électrons ayant quitté la couche supérieure dopée laissent derrière eux des donneurs ionisés, d'où l'apparition d'un coût en énergie électrostatique qui s'oppose au gain énergétique associé au transfert d'électrons. Finalement, la situation la plus favorable consiste à déplacer un certain nombre d'électrons dans le GaAs, à l'interface avec le GaAlAs. Il apparaît donc à l'équilibre un champ électrique constant \vec{E} entre le GaAlAs dopé et le GaAs, qui déforme la bande de conduction à l'interface GaAs/GaAlAs en un puits de potentiel triangulaire, selon la direction z perpendiculaire à l'interface (comme dans les Si-MOSFETs). Dans ce puits, les niveaux électroniques sont quantifiés et l'écart énergétique entre les deux premiers niveaux est de l'ordre de $100K$. Ainsi, à basse température $T \ll 100K$, les électrons perdent leur degré de liberté selon z (ils n'occupent que le premier niveau) et forment donc un gaz bidimensionnel. En dopant positivement le GaAlAs, on peut de la même manière former un gaz bidimensionnel de trous à l'interface GaAs/GaAlAs, ce qui permet de changer la masse effective des porteurs. Enfin, en pratique, une grille est rajoutée à la surface de l'hétérostructure pour modifier la densité de porteurs n_s dans le gaz 2D.

Principales caractéristiques des gaz 2D formés dans les hétérostructures

Les hétérostructures GaAs/GaAlAs permettent de réaliser des gaz bidimensionnels beaucoup moins désordonnés que ceux des Si-MOSFETs, avec des mobilités pouvant être vingt fois supérieures à celle des Si-MOSFETs les plus propres. Ceci s'explique par l'absence de défauts à l'interface GaAs/GaAlAs. En effet, les techniques de fabrication utilisées (épitaxie par jets moléculaire ou dépôt chimique en phase vapeur) et le faible désaccord entre les paramètres de

²Précisons que la dégénérescence n'est pas parfaite : il existe une petite différence d'énergie Δ_v entre les deux vallées mais elle est négligeable devant la température de Fermi T_F dans les systèmes que nous étudierons ($\Delta_v \sim 1K \ll T_F \sim 10K$ [218]).

maille des deux semi-conducteurs rendent possible l'élaboration d'une interface atomiquement plate. Le désordre dans le gaz d'électrons (ou de trous) est alors dû principalement au potentiel coulombien généré par les donneurs ionisés (Si^+ ou Si^-) répartis aléatoirement dans la couche supérieure de GaAlAs dopé. Comme cette couche est séparée du GaAs par une couche de GaAlAs non dopée d'épaisseur d , les fréquences spatiales du désordre plus grandes que $1/d$ sont filtrées et donc finalement, le désordre ressenti par les porteurs du gaz bidimensionnel est essentiellement à longue portée.

Par ailleurs, il est important de mentionner que le minimum de la bande de conduction du GaAs (ou le maximum de la bande de valence) n'est atteint qu'en un seul point, $k = 0$ au centre de la zone de Brillouin. Ainsi, les gaz bidimensionnels des hétérostructures GaAs/GaAlAs ne possèdent qu'une seule vallée, contrairement à ceux des Si-MOSFETs qui en possèdent deux dégénérées.

Pour finir, il est aussi possible de fabriquer des hétérostructures en utilisant d'autres semi-conducteurs que le GaAs et le GaAlAs. On peut citer par exemple les hétérostructures Si/SiGe qu'il est intéressant de comparer aux Si-MOSFETs puisque dans ces deux structures, les gaz bidimensionnels sont formés dans du Silicium. Ainsi, les porteurs voient la même structure de bande. En revanche, ces deux structures diffèrent par la nature de leur désordre : alors que le potentiel aléatoire est essentiellement à courte portée dans les Si-MOSFETs, il a une importante composante à longue portée dans les hétérostructures Si/SiGe. Un autre exemple d'hétérostructure est celui des hétérostructures AlAs/AlGaAs. Dans celles-ci, les électrons du gaz 2D peuvent occuper plusieurs vallées dégénérées, fortement anisotropes [242].

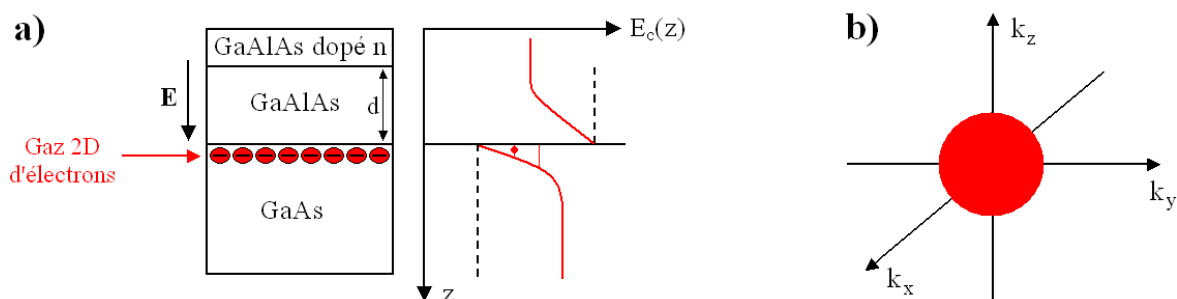


FIG. 2.2 – (a) Réalisation d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans une hétérostructure GaAs/GaAlAs dopée négativement. E_c désigne le minimum de la bande de conduction. Le champ électrique \vec{E} déforme les bandes de conduction du GaAs et GaAlAs (pointillés) en un puits de potentiel à l'interface (ligne continue rouge). (b) Surface iso-énergétique de la bande de conduction (la plus basse) du GaAs, dans l'espace réciproque. Il s'agit d'une sphère au centre de la zone de Brillouin.

2.2 Comportement métallique inattendu

Nous avons expliqué au premier chapitre pourquoi, pendant plus de vingt ans, la communauté a pensé qu'il ne pouvait exister d'état métallique à deux dimensions. A l'époque, les expériences semblaient confirmer ce paradigme puisque l'on observait les signatures des localisations faible [36, 66] et forte [273] sur la dépendance en température (logarithmique ou exponentielle) de la résistivité, ce qui laissait présager de sa divergence à température nulle. Cependant, ces expériences effectuées dans des échantillons de basses mobilités, à hautes densités, ne pouvaient explorer que le régime faiblement corrélé du diagramme de phase désordre/interaction (§1.2.3). Depuis, des progrès techniques ont permis la fabrication

d'échantillons beaucoup plus propres, dans lesquels les mesures peuvent être effectuées à très basse densité, c'est-à-dire dans un régime fortement corrélé. Dans de tels échantillons, S. V. Kravchenko et ses collaborateurs ont observé un comportement métallique de la résistivité avec la température [134], qui a ensuite été confirmé par d'autres expérimentateurs. Le but de cette section est de présenter cette première série d'expériences et de montrer ainsi comment le débat sur la question de l'existence de métaux à deux dimensions a été relancé.

« Révolution » de 1994 : expérience de Kravchenko *et al* [134]

Dans cette expérience, les auteurs ont étudié des gaz bidimensionnels d'électrons formés dans des Si-MOSFETs de très haute mobilité ($\mu_{max} \approx 7.10^4 \text{ cm}^{-2}/\text{Vs}$). La qualité des échantillons a permis d'abaisser la densité surfacique de porteurs n_s en dessous de 10^{11} cm^{-2} . Par comparaison, dans les années 80, la mobilité des Si-MOSFETs les plus propres était à peu près dix fois plus petite et la densité minimale, dix fois plus grande. Dans ces nouveaux échantillons, les auteurs ont mesuré la dépendance en température de la résistivité du gaz 2D, en variant la densité n_s autour de 10^{11} cm^{-2} (de 0.7×10^{11} à 1.4×10^{11} sur la figure 2.3 (a) issue de [135]). Ils ont constaté (et c'est là le point important) qu'aux plus hautes densités (encore petites par rapport à celles des anciens échantillons), la résistivité décroît au fur et à mesure que la température est diminuée, sans jamais montrer de signe de résurgence même aux températures les plus basses accessibles expérimentalement ($T_{min} = 20 \text{ mK}$ dans [134, 135]). Cela laissait supposer une résistivité finie à température nulle. Autrement dit, ces échantillons présentaient dans ce régime de densité un comportement métallique, jusqu'alors inobservé à deux dimensions (voir la figure 2.3 (a)).

A l'inverse, aux plus basses densités mesurées, un comportement isolant était observé (croissance de la résistivité en abaissant la température). Mais celui-ci n'était pas surprenant puisqu'à basse densité, le gaz d'électrons est fortement corrélé et désordonné (« verre corrélé » du diagramme de phase 1.2) et bien sûr pauvres en porteurs, si bien que l'on ne peut envisager qu'il puisse conduire le courant. Dans la suite, on ne cherchera pas à déterminer la nature exacte de cette phase isolante car la véritable question soulevée par les expériences de Kravchenko concerne l'observation de ces étranges comportements métalliques dans ces nouveaux échantillons de basse densité, fortement corrélés. Plus précisément, la question qui s'est posée à la communauté est la suivante : existe-t-il une vraie phase métallique à température nulle dans le diagramme de phase du gaz bidimensionnel ou est-ce que ces expériences peuvent simplement s'expliquer par un effet de température finie, cachant un isolant à température nulle ? Les résultats présentés dans cette thèse (aux chapitres 6 et 7) nous conduiront à défendre la seconde hypothèse, tout en interprétant les comportements métalliques, non pas comme un artefact mais comme un effet intrinsèque des interactions électron-électron.

Reproductibilité dans différents échantillons

Ces premières expériences de Kravchenko ont d'abord soulevé beaucoup d'incrédulité tant elles remettaient en cause l'idée forgée au cours des deux précédentes décennies selon laquelle la conductance d'un gaz 2D devait nécessairement tendre vers zéro à basse température. Mais comme elles ont été reproduites depuis dans une multitude d'échantillons, la communauté a fini par leur faire confiance. Ainsi, des comportements métalliques similaires ont été observés dans différents Si-MOSFETS [135, 161, 197, 210] mais aussi dans des gaz d'électrons à l'interface d'hétérostructures n-Si/SiGe [140, 178], n-GaAs/GaAlAs [107, 223] ou n-

AlAs/AlGaAs [184], et dans des gaz de trous dans des hétérostructures p-Si/SiGe [59, 141] et p-Ga/GaAlAs [105, 164, 168, 174, 250, 294]. La variété des matériaux présentant un comportement métallique a donc favorisé l'idée d'un mécanisme général aux gaz bidimensionnels, et non pas spécifique à certains échantillons. Cependant, l'importance de l'effet métallique s'est montrée fortement dépendante du type de gaz 2D, comme cela est illustré sur la figure 2.3 : dans les Si-MOSFETs, la résistivité peut chuter d'un facteur 10 avec la température [134, 135], au plus fort de la « phase métallique », alors que dans les hétérostructures GaAs/GaAlAs, elle ne varie que de quelques pourcents [250, 107], voire au mieux d'un facteur 3 [164, 294]. Il est donc essentiel de garder en tête les différentes caractéristiques de ces structures bidimensionnelles (présentées au §2.1), en particulier la nature du désordre et la dégénérescence de vallées. On y reviendra aux paragraphes 2.3.3 et 2.5.

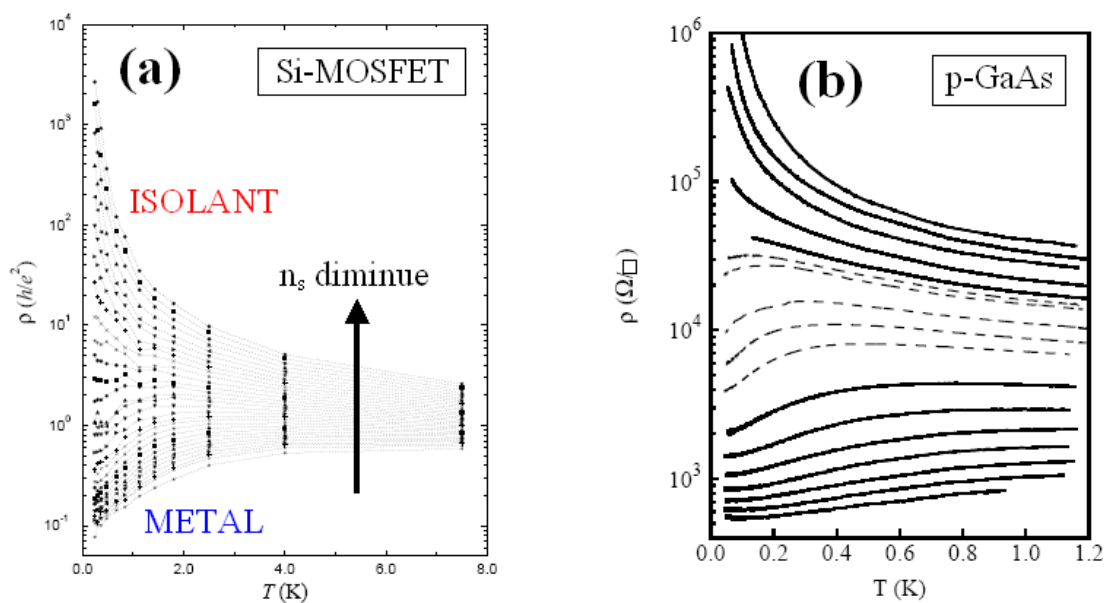


FIG. 2.3 – Résistivité ρ en fonction de la température T , pour différentes densités n_s , dans des gaz bidimensionnels de haute mobilité : (a) pour un gaz d'électrons dans un Si-MOSFET [135] avec $0.71 < n_s < 1.37 (\times 10^{11} \text{cm}^{-2})$, (b) pour un gaz de trous dans une hétérostructures GaAs [105] avec $0.09 < n_s < 0.64 (\times 10^{11} \text{cm}^{-2})$. En augmentant la densité, on passe d'un comportement isolant à un comportement métallique, plus marqué dans le Si-MOSFET (a) que dans l'hétérostructure (b).

Dépendance en température de la résistivité

Plusieurs lois empiriques ont été proposées pour décrire le comportement de la résistivité ρ avec la température T . Globalement, du côté isolant, les courbes $\rho(T)$ peuvent être fittées par une loi de type Efros-Shklovskii (voir §1.4.3), associée à un mécanisme de transport par activation thermique entre états localisés, en présence d'un gap de Coulomb. La forme exacte du fit n'est néanmoins pas établie [12, 123, 135, 158, 250]. Du côté métallique, l'augmentation de la résistivité avec la température est approximée par l'expression [206] :

$$\rho(T) = \rho_1(n_s) + \rho_2(n_s) \exp[-(T_1(n_s)/T)^\gamma] ,$$

supposant une saturation de la résistivité aux plus basses températures, effectivement observée dans plusieurs échantillons [12]. Malheureusement, cette loi empirique ne nous apprend pas

grand chose car les paramètres ajustables ρ_1 , ρ_2 et γ sont sans doute trop nombreux par rapport à la plage de température accessible et ils varient fortement d'un système à un autre. Par exemple, γ est trouvé égal à 1 dans [105, 184, 164], alors que dans [59], les auteurs prennent $\gamma \approx 0.5$. En revanche, il est certain que ces comportements métalliques observés à basse densité ne sont pas dûs à un processus de diffusion électron-phonon. Les phonons sont bien responsables d'un comportement métallique (en T^3) mais ils n'apparaissent qu'à plus haute température et plus haute densité [164]. Dans les hétérostructures, leur contribution apporte une correction non négligeable à la résistivité [204] mais dans les Si-MOSFETs, elle est quasi-nulle aux densités et températures étudiées ici [201].

Symétrie et loi d'échelle

Dans [135], S. V. Kravchenko *et al* montrent que leurs données $\rho(T)$, présentées sur la figure 2.3 (a), peuvent être rescalées en deux branches à l'aide d'un unique paramètre de scaling T_0 , de sorte que :

$$\rho(T, n_s) = f(T/T_0(n_s)) \text{ avec } T_0 \propto |n_s - n_s^c|^\beta \quad (\beta = 1.6 \pm 0.1) ,$$

où n_s^c est la densité critique à la transition entre un comportement métallique et un comportement isolant. La loi d'échelle ainsi obtenue est tracée sur la figure 2.4 : pour $n_s > n_s^c$, la procédure de scaling conduit à la superposition des courbes $\rho(T)$ sur la branche du bas, « métallique », tandis que pour $n_s < n_s^c$ les courbes $\rho(T)$ se superposent sur la branche du haut, « isolante ». Le même type de loi d'échelle a été obtenue dans d'autres échantillons, pour l'effet de la température [59, 198, 211, 250] mais aussi pour l'effet d'un champ électrique [139, 151]. En outre, S. V. Kravchenko *et al* ont également remarqué dans [252] que les branches métallique et isolante de la figure 2.4 sont symétriques l'une de l'autre. Cela signifie que l'on a :

$$\rho/\rho_c(n_s - n_s^c, T) = \rho_c/\rho(n_s^c - n_s, T) ,$$

où ρ_c est la résistivité à la transition. Une telle symétrie a également été observée dans [197, 250]. On comprend que ces propriétés de symétrie et de lois d'échelle aient fortement soutenu l'idée d'une véritable transition de phase quantique à température nulle. A ce sujet, V. Dobrosavljevic a montré dans [65] que ces propriétés peuvent se comprendre dans le cadre d'une théorie d'échelle à un paramètre où la loi d'échelle $\beta(g)$ (introduite au §1.3.3) est modifiée par les interactions de sorte qu'elle s'annule en changeant de signe, en un point critique quantique.

Ces propos doivent néanmoins être modérés. En effet, les lois d'échelle et les symétries décrites ci-dessus échouent dans certains échantillons [105, 294] et lorsqu'elles sont observées, ce n'est que dans un régime limité de température et de densité, proche de la transition (dans [135] (figure 2.4), $250 \text{ mK} < T < 2 \text{ K}$ et $n_s^c - 2.5 \times 10^{10} \lesssim n_s \lesssim n_s^c + 2.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$). En dehors de ce régime, l'analyse des données dans le cadre d'une théorie d'échelle à un paramètre n'est pas pertinente [210]. Ainsi, par la suite, certains ont analysé leurs données via un scaling à deux paramètres [18, 126]. Ces études récentes sont essentiellement motivées par des théories de groupes de renormalisation (dont nous reparlerons au §2.6.3) annonçant une transition métal-isolant à température nulle et l'existence d'une loi d'échelle à deux paramètres [220]. Remarquons tout de même que ces différents scalings nécessitent un lourd traitement des données expérimentales, qui peut s'avérer dangereux s'il n'est pas réalisé avec le plus grand soin. Par prudence, lorsque nous analyserons les expériences au chapitre 7 à

l'aide de nos résultats, nous travaillerons autant que possible sur les données expérimentales brutes.

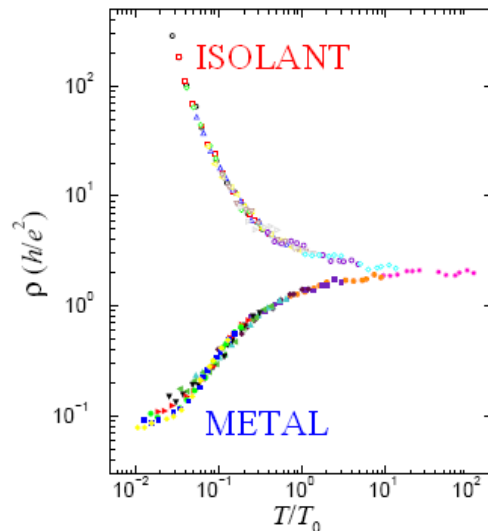


FIG. 2.4 – Observation expérimentale de loi d'échelle en température dans un Si-MOSFET (d'après [135]). Les données $\rho(T)$ de la figure 2.3 (a) ont simplement été tracées en fonction de $T/T_0(n_s)$ de façon à les superposer. Les symboles correspondent aux différentes densités n_s allant de $6.46 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ à $12.4 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$.

Remarque : au-delà des mesures de transport

Jusqu'à présent, nous avons présenté des expériences dans lesquelles la quantité mesurée est la résistivité. Il est vrai que la plupart des travaux traitant de l'apparente transition métal-isolant à 2D s'intéresse aux propriétés de transport du gaz bidimensionnel. Il existe cependant quelques références dans la littérature discutant d'autres types de mesures. Ainsi, dans [37, 118, 149, 199], les auteurs étudient les fluctuations de conductance au voisinage de la transition. En particulier, le bruit à basse fréquence de la résistivité a été mesuré au SPEC, lors de la thèse de R. Leturcq [147], dans des gaz de trous p-GaAs. Il s'est avéré caractéristique d'une transition de percolation [148]. Par ailleurs, des mesures originales de quantités thermodynamiques (pouvoir thermoélectrique [87] et compressibilité [5, 70, 116]) ont été réalisées. Le plus souvent, ces quantités présentent un comportement particulier à la densité critique n_s^c qui s'interprète comme autant de signatures thermodynamiques d'une transition de phase métal-isolant. Nous ne développerons pas plus ces travaux, en marge de ce travail de thèse.

2.3 Analyse critique des échantillons « métalliques »

Fâce aux comportements métalliques inattendus présentés au §2.2, la première question à se poser est toute simple : pourquoi n'ont-ils donc pas été observés avant, notamment dans les expériences sur Si-MOSFETs au cours des années 80 [36, 273] ? Pour répondre, il suffit de comprendre quelles sont les nouveautés des échantillons actuels par rapport à ceux étudiés il y a une trentaine d'années. Comme nous l'avons déjà mentionné, il est devenu possible, grâce aux progrès techniques en nanofabrication, de réaliser des gaz bidimensionnels très propres, avec peu de défauts. Ainsi en dix ans, la mobilité des Si-MOSFETs a décuplé si bien que le régime des très basses densités est devenue accessible aux mesures de transport (la résistance restant suffisamment faible pour être observée). Dans ce nouveau régime de basse densité, trois points sont essentiels :

- le paramètre d'interaction r_s est important (de l'ordre de 5 – 10, voire plus), du fait de la relation (1.4).
- le désordre $1/k_F l$ est intermédiaire (de l'ordre de 1), car celui-ci est augmenté en diminuant la densité n_s (d'après (1.8)) mais aussi diminué en augmentant la mobilité μ : on est donc en plein dans le régime de localisation d'Anderson.
- la température de Fermi T_F est très basse et donc les températures les plus froides accessibles dans les expériences ne sont plus si petites devant T_F .

Nous commençons cette section en présentant le diagramme de phase désordre/interaction du gaz bidimensionnel, tel qu'il est déterminé par les expériences. Nous montrons ainsi que les comportements métalliques sont observés au milieu du diagramme, pour des désordres et interactions intermédiaires, dans un régime jusqu'alors inexploré aussi bien par les théoriciens que par les expérimentateurs (voir le chapitre 1). Puis nous revenons en détail sur les trois points mentionnés ci-dessus.

2.3.1 Diagramme de phase expérimental

On a vu au §1.2.2 que chaque échantillon expérimental correspond (en première approximation) à une droite dans le diagramme de phase (désordre $1/\sqrt{k_F l}$ /interaction r_s), passant par l'origine et dont la pente $1/\eta$ est reliée à la mobilité μ de l'échantillon à très haute densité et basse température, selon :

$$\eta \equiv r_s \sqrt{k_F l} = \frac{2\sqrt{\mu} e^{3/2} m}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r \hbar^{3/2} \sqrt{M}}, \quad (2.1)$$

où M est la dégénérescence de spin et/ou de vallées, ϵ_0 la constante diélectrique du vide et ϵ_r la constante diélectrique relative du milieu. Le segment de droite parcouru est donné par le domaine de densité exploré expérimentalement dans l'échantillon en question, via la relation (1.4) que nous rappelons ici :

$$r_s = \frac{me^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_r \sqrt{\pi n_s}}. \quad (2.2)$$

Ainsi, on a reporté sur le diagramme de phase 2.5 différents échantillons, correspondant aux expériences des années 80 dans les Si-MOSFETs, aux premières expériences de Kravchenko *et al* en 1994 dans les nouveaux Si-MOSFETs de basse densité, ainsi qu'à d'autres qui ont suivi dans des Si-MOSFETs similaires ou dans des hétérostructures GaAs de trous ou d'électrons. La couleur bleue code pour les densités n_s auxquelles un comportement métallique $d\rho/dT > 0$ a été observé (aux plus basses températures). Au contraire, la couleur rouge code pour les comportements isolants $d\rho/dT < 0$. Pour avoir une représentation complète, il faudra se rappeler que l'amplitude des comportements métalliques observés dans les Si-MOSFETs est bien plus importante que celle observée dans les hétérostructures GaAs (cette caractéristique n'étant bien sûr pas prise en compte dans notre code couleur). De plus, nous précisons que les pentes $1/\eta$ des droites correspondant aux échantillons dans le diagramme, ont été déterminées par la relation (2.1), non pas par l'intermédiaire de la mobilité μ à très haute densité, souvent non communiquée dans les références, mais par la mobilité maximale μ_{peak} . Le diagramme de phase 2.5 pourra donc être utilisé comme outil graphique pour acquérir une compréhension synthétique du problème mais il faudra tout-de-même rester conscient des hypothèses et

approximations faites pour le construire. Ajoutons que nous avons utilisé comme constantes numériques pour la masse effective m et la constante diélectrique relative ϵ_r : $m = 0.19 m_e$ et $\epsilon_r = 7.7$ pour les Si-MOSFETs, $m = 0.38 m_e$ et $\epsilon_r = 13.2$ pour les gaz de trous p-GaAs, et $m = 0.067 m_e$ et $\epsilon_r = 13.2$ pour les gaz d'électrons n-GaAs (m_e étant la masse de l'électron).

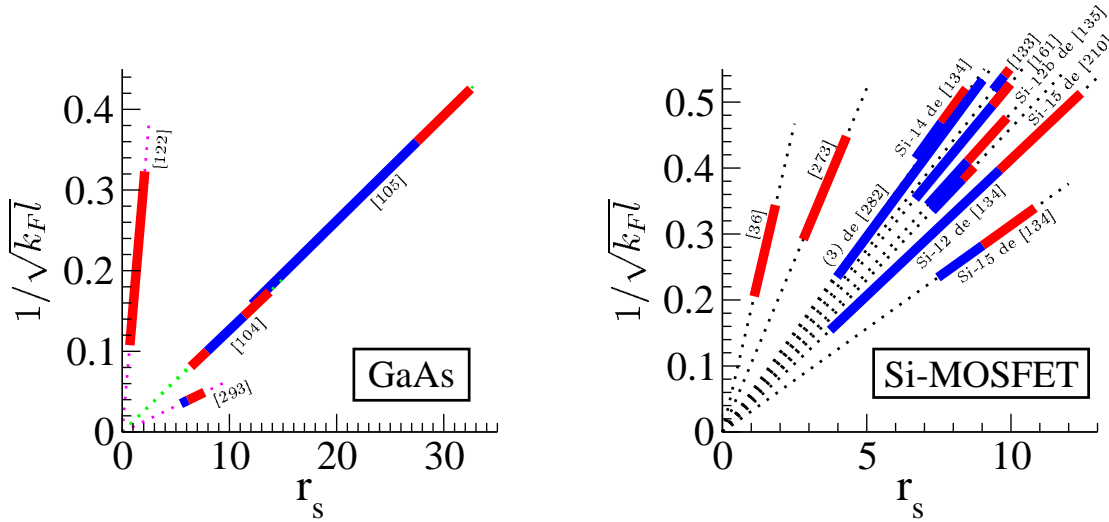


FIG. 2.5 – Diagramme de phase expérimental désordre/interaction du gaz bidimensionnel, pour des hétérostructures GaAs (à gauche) et des Si-MOSFETs (à droite). Chaque échantillon parcourt un segment de droite du diagramme. En bleu [rouge] sont représentées les régions de densité où des comportements métalliques [isolants] ont été observés. La couleur des droites en pointillé fait référence au type de matériau : noir pour les Si-MOSFETs, vert pour les gaz de trous p-GaAs et rose pour les gaz d'électrons n-GaAs.

Il est évident que le diagramme de phase 2.5 n'est pas exhaustif, dans le sens où il ne recense pas toutes les expériences étudiant la transition métal-isolant à deux dimensions. En particulier, nous n'avons pas reporté les mesures effectuées dans des hétérostructures Si/SiGe [140, 178, 59, 141] ou AlAs/AlGaAs [184] car la valeur de la masse effective et de la dégénérescence de vallées n'est pas toujours claire dans ces échantillons. Les hétérostructures AlAs présentent en outre une forte anisotropie de la surface de Fermi, qui risquerait de rendre confus notre diagramme de phase expérimental. Celui-ci est cependant suffisant pour illustrer les remarques essentielles suivantes :

- les échantillons « sales » [273, 122, 36], typiques des années 80, ne permettent d'explorer que le régime faiblement corrélé, « à gauche » du diagramme de phase. Seuls des comportements isolants (rouge) sont observés, le plus souvent sous la forme de corrections logarithmiques de localisation faible.
- la nouvelle génération de Si-MOSFETs rend possible l'exploration de la zone centrale du diagramme (faisceau de droites [134, 135, 133, 161, 210, 282]). Dans cette zone, des comportements métalliques (bleu) sont observés et la valeur critique de l'interaction r_s^c à laquelle la transition métal-isolant a lieu, est de l'ordre de 10 pour tous les échantillons [294].
- les hétérostructures GaAs sont en général beaucoup plus propres que les Si-MOSFETs (voir les trois droites [105, 104, 293]). Des comportements métalliques sont observés jusqu'à des valeurs critiques r_s^c qui peuvent être beaucoup plus grandes que celles des

Si-MOSFETs ($r_s^c = 28$ pour la droite [105] et même $r_s^c = 35$ dans [294] et $r_s^c \approx 55$ dans [174]).

- dans certains échantillons, les comportements métalliques observés à basse densité redeviennent isolants à haute densité (et suffisamment basse température). Ce retour vers l'isolant a été observé dans des gaz de trous p-GaAs (droite [104] du diagramme et [115]) et dans des Si-MOSFETs [212]. Il s'interprète comme un retour à l'isolant d'Anderson, même si on ne peut pas rigoureusement parler d'isolant d'Anderson dans ces systèmes corrélés. Ainsi, les comportements métalliques s'insèrent entre l'isolant d'Anderson et le « verre coulombien ». Reste à savoir s'ils traduisent l'existence d'une nouvelle phase quantique « métallique » intermédiaire ou s'ils disparaîtraient à plus basse température, si l'on était capable de faire des mesures dans ce régime.

2.3.2 Importance des interactions

Nous l'avons déjà dit mais nous le répétons car il s'agit vraiment d'un point essentiel : les comportements métalliques sont observés à basse densité, c'est-à-dire dans un régime où le paramètre d'interaction r_s est important (d'après (2.2)). Typiquement, dans la « phase métallique », r_s varie de 5 à 10, et peut même dépasser 30 dans les hétérostructures GaAs. Ainsi, dans ces systèmes, l'énergie cinétique est largement dominée par l'énergie d'interaction, d'environ un ordre de grandeur (voir l'expression (1.6)). On comprend donc que ces étranges comportements métalliques relèvent de la physique des systèmes fermioniques fortement corrélés. En particulier, les théories analytiques perturbatives développées à $r_s \ll 1$ ne sont *a priori* pas pertinentes dans ce cas. Ainsi, la tâche s'annonce ardue pour le théoricien. On verra au §2.6 que deux points de vue s'affrontent quant au rôle des interactions dans l'observation de comportements métalliques. Le premier défend l'existence d'une nouvelle phase quantique métallique, stabilisée par les interactions, entre l'isolant d'Anderson (à très faible interaction) et le « verre coulombien » (à très forte interaction). Le second suppose que la théorie du liquide de Fermi (introduite au §1.4.1) reste valable dans ces systèmes fortement corrélés et donc que les interactions tiennent en fin de compte un rôle mineur. Selon cette hypothèse, les comportements métalliques observés ne seraient qu'un effet de température finie et devraient redevenir isolant quand la température du système tend vers zéro, conformément à ce qui est prédit par la théorie d'échelle de la localisation (§1.3.3) dans la limite sans interaction. Nous verrons par ailleurs au §2.4.2 que la forte augmentation de la susceptibilité de spin au voisinage de la transition « métal »/isolant confirme l'importance des interactions, qu'elles soient décrites par la théorie du liquide de Fermi ou non.

2.3.3 Le paradoxe du désordre

La mobilité des nouveaux échantillons des années 90, dans lesquels les comportements métalliques ont été observés, est extrêmement haute (jusqu'à $\mu = 2.10^7$ cm²/Vs dans des gaz d'électrons n-GaAs [293]). On pourrait donc s'attendre à un effet négligeable du désordre. Cependant, comme la densité n_s est aussi extrêmement basse (de l'ordre de 10^{11} cm⁻² dans les Si-MOSFETs et 10^{10} cm⁻² dans les hétérostructures), le paramètre de désordre $k_F l$ directement relié à n_s par l'expression (1.8), est finalement d'ordre $k_F l \sim 1$ autour de la « transition métal-isolant ». Ceci est clairement visible sur le diagramme de phase 2.5. Suite à cette constatation, deux remarques s'imposent. D'une part, le fait que $k_F l$ soit de l'ordre de 1 explique pourquoi la conductance g_c à la transition est trouvée de l'ordre de e^2/h et cela, quelque

soit le matériau³ [107]. En effet, en première approximation, la conductance g est reliée à $k_F l$ par la loi d'Ohm $g = (e^2/h)k_F l$, écrite ici pour des électrons non-polarisés. D'autre part, le régime $k_F l \sim 1$ est le même régime de désordre que celui exploré dans les années 80 dans [36, 274] où seuls des comportements isolants étaient observés. La nouveauté des échantillons « métalliques » tient donc de leur degré important de corrélations, le désordre effectif vu par les porteurs étant inchangé. Dans ce régime de désordre, $k_F l$ est à la fois suffisamment petit (on n'a pas $k_F l \gg 1$) pour qu'apparaissent les effets quantiques de localisation d'Anderson (§1.3) et suffisamment grand (on n'a pas non plus $k_F l \ll 1$) pour que la longueur de localisation ξ du système soit comparable à la distance moyenne a entre particules et qu'ainsi la localisation d'Anderson ne se résume pas à un simple piégeage des porteurs. Dans un tel régime, les théories perturbatives ou les approches classiques sont impuissantes pour traiter le désordre.

Si l'on veut maintenant être un peu plus précis quant au rôle du désordre, on peut citer les travaux [134, 210, 213] dans lesquels les auteurs montrent, pour des Si-MOSFETs, que plus l'échantillon est sale (c'est-à-dire plus sa mobilité est faible), plus le paramètre d'interaction critique r_s^c à la transition, la résistivité critique ρ_c et l'amplitude du comportement métallique, sont petits. De même, dans [225], M. P. Sarachik propose une relation empirique entre mobilité μ et interaction critique r_s^c , en se basant sur l'analyse de plusieurs échantillons. On retiendra par ailleurs que le désordre est intimement lié au matériau. Ainsi, comme on peut le constater sur le diagramme 2.5, les hétérostructures sont beaucoup plus propres que les Si-MOSFETs. De plus, dans les hétérostructures, le désordre a une forte composante à longue portée alors que dans les Si-MOSFETs, le désordre est à courte portée (voir §2.1). On verra au 2.6.4 que la longue portée du désordre peut par exemple entraîner des phénomènes classiques de percolation dans les hétérostructures [230]. C'est néanmoins un point que l'on ne cherchera pas à discuter dans cette thèse et on se limitera toujours à un désordre à courte portée (voir le chapitre 3).

2.3.4 Des échantillons à « haute » température

Est-ce que les comportements métalliques $d\rho/dT > 0$ observés à basse densité sont le signe d'une vraie phase métallique à température nulle, ou est-ce qu'au contraire ils disparaîtraient au profit de comportements isolants, si l'on était capable de descendre à plus basse température? Voilà une question essentielle, encore controversée à ce jour. Une analyse simple des données permet d'appuyer la seconde hypothèse. En effet, le fait que la densité soit très faible dans la « phase métallique » implique que la température de Fermi T_F du système soit aussi extrêmement basse ($T_F = \pi\hbar^2 n_s / 2mk_B \approx 506 \text{ K}/r_s^2$ dans les Si-MOSFETs, de l'ordre de 5 – 10 K à la transition). Ainsi, dans les expériences décrites dans ce chapitre, le rapport T/T_F n'est pas si petit⁴. Pour illustrer cette remarque, nous avons tracé sur la figure 2.6 les données $\rho(T)$ de la première série d'expériences de Kravchenko *et al* [135] (à l'origine du débat), en fonction du rapport T/T_F . Manifestement, les températures caractéristiques de

³Il existe néanmoins des exceptions dont [23] où les auteurs observent des comportements métalliques dans des gaz d'électrons n-GaAs, jusqu'à des résistivités $\rho \approx 700 h/e^2$. Les échantillons utilisés sont cependant très particuliers par rapport aux autres gaz n-GaAs étudiés auparavant car ils sont de taille mésoscopique et peuvent s'affranchir des effets de longue portée du désordre (percolation). On en reparlera succinctement au §7.3.1, note 10.

⁴Pour comparaison, dans les métaux usuels 3D, la température de Fermi est de l'ordre de 10^4 K si bien qu'à basse température $T < 1 \text{ K}$, on a $T/T_F \ll 1$.

l'augmentation de la résistivité dans la « phase métallique » correspondent à des valeurs assez élevées de T/T_F de l'ordre de 20%. Plus précisément, on montrera au chapitre 7 que l'énergie caractéristique des comportements métalliques est l'énergie de polarisation du système. Par conséquent, l'hypothèse d'un régime dégénéré ($T \ll T_F$) où seuls les électrons proches du niveau de Fermi participent au transport, ne s'applique pas selon nous dans les échantillons présentant un comportement métallique. Au contraire, ces comportements métalliques impliquent fortement les états excités du système et n'explorent donc pas la limite de température nulle.

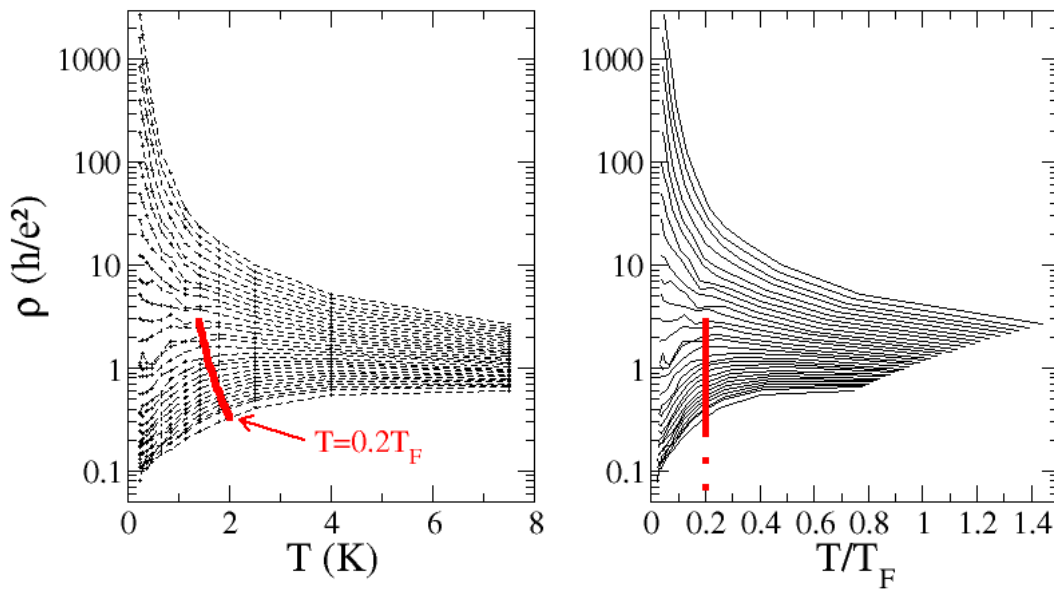


FIG. 2.6 – Données $\rho(T)$ de la figure 2.3 (a) [135] tracées en fonction de T (à gauche) et de T/T_F (à droite) où T_F est la température de Fermi. La température caractéristique à laquelle la résistivité augmente dans la « phase métallique » est de l'ordre de $T \approx 0.2T_F$.

Cette conclusion a en réalité été formulée avant nous dans [8]. Ainsi, grâce à des mesures de temps de cohérence de phase dans des Si-MOSFETs (via la magnétorésistance en champ perpendiculaire), les auteurs B. L. Altshuler *et al* ont montré que les comportements métalliques $d\rho/dT > 0$ apparaissent à « haute » température, dans un régime qu'ils appellent semi-classique où les effets de cohérence quantique sont négligeables. Ils expliquent qu'à plus basse température, les effets quantiques doivent commencer à se manifester sous la forme de corrections de localisation faible tandis que les effets semi-classiques à l'origine des comportements métalliques doivent disparaître, si bien que l'on devrait avoir un isolant à température nulle. Ces corrections de localisation faible ont effectivement été observées à hautes densités, c'est-à-dire loin de la transition métal/isolant, dans un régime faiblement corrélé [212, 104]. En revanche, proche de la transition, les comportements métalliques (dans les MOSFETs) persistent jusqu'aux plus basses températures. Pour les auteurs, le retour vers l'isolant n'a pas été observé dans ce régime tout simplement parce qu'à basse densité, la température en-dessous de laquelle les corrections de localisation faible apparaissent est encore inférieure aux plus petites températures des expériences. Des conclusions similaires ont été trouvées dans différentes hétérostructures [249, 235]. Dans ces systèmes, le retour à l'isolant à très basse

température a même été observé au voisinage de la transition, dans un régime fortement corrélé [115], ce qui semble confirmer l'absence d'un métal à température nulle. Cette idée est aussi soutenue par l'observation d'une magnétorésistance négative (en champ perpendiculaire), caractéristique de la localisation faible, sur une large plage de densités et notamment dans la « phase métallique » [41, 40, 209, 203, 234, 249].

Pour finir, il est important de préciser que le point de vue décrit ci-dessus (que nous partageons) ne fait de loin pas l'unanimité. Pour beaucoup, et en particulier pour S. V. Kravchenko, le régime dégénéré $T \ll T_F$ a bien été atteint dans les expériences et donc les comportements métalliques observés correspondent bien à une vraie phase métallique à température nulle. Ainsi, dans [133], S. V. Kravchenko dit avoir observé des comportements métalliques dans des Si-MOSFETs, jusqu'à des températures $T = 35$ mK, telles que $T \ll 0.01 T_F$. Le même type d'observation a aussi été faite dans des hétérostructures p-GaAs pour $T \ll 0.005 T_F$ [119]. On peut tout-de-même se demander si ces faibles valeurs de température correspondent bien à la température des porteurs (pouvant être chauffés par un bruit extérieur ou la tension appliquée pour la mesure), et non pas à la température du bain. Une estimation faite par B. L. Altshuler *et al* dans [12] montre que la température minimale $T = 35$ mK annoncée dans [133] serait en fait dix fois supérieure (de l'ordre de $T = 0.3$ K), remettant ainsi en cause l'hypothèse d'un gaz d'électrons dégénéré.

2.4 Indice expérimental : rôle du spin

En analysant les données expérimentales et en nous appuyant sur des arguments simples, nous avons montré à la précédente section 2.3 que les interactions, le désordre et les états excités sont des éléments clés pour la compréhension des étonnants comportements métalliques présentés au §2.2. Nous continuons ici notre « enquête » et montrons comment les résultats expérimentaux ont réussi à convaincre la communauté du rôle crucial du spin des porteurs dans l'observation des comportements métalliques.

2.4.1 Effet d'un champ magnétique parallèle

Magnétorésistance positive géante

Outre les comportements métalliques en température $d\rho/dT > 0$ discutés précédemment, les « nouveaux » gaz bidimensionnels (§2.3) présentent une autre caractéristique étonnante : l'application d'un champ magnétique parallèle B_{\parallel} , dans le plan du gaz 2D, conduit à augmentation drastique de la résistivité ρ . Cette magnétorésistance positive géante a été observée pour la première fois en 1992, dans des Si-MOSFETs, par V. T. Dolgoplov *et al* [68]. Depuis, elle a fait l'objet d'études intensives dans le cadre des expériences de transition « métal/isolant » à 2D. Elle a ainsi été observée à maintes reprises dans des Si-MOSFETs [125, 161, 177, 208, 253, 254], dans des gaz d'électrons n-GaAs [272] et dans des gaz de trous p-GaAs [248, 295]. En revanche, elle est absente dans les hétérostructures p-SiGe [58, 233] mais ces systèmes constituent de ce point de vue un cas particulier, auquel nous ne nous intéresserons pas⁵.

Sur la figure 2.7(a) sont reportées des mesures expérimentales de magnétorésistance pa-

⁵Il existe en effet une forte interaction spin-orbite dans les puits quantiques p-SiGe. De ce fait, un champ magnétique parallèle B_{\parallel} ne peut ni se coupler au mouvement orbital des porteurs, ni à leur spin, car ces deux éléments sont trop couplés entre eux. B_{\parallel} n'a donc aucun effet.

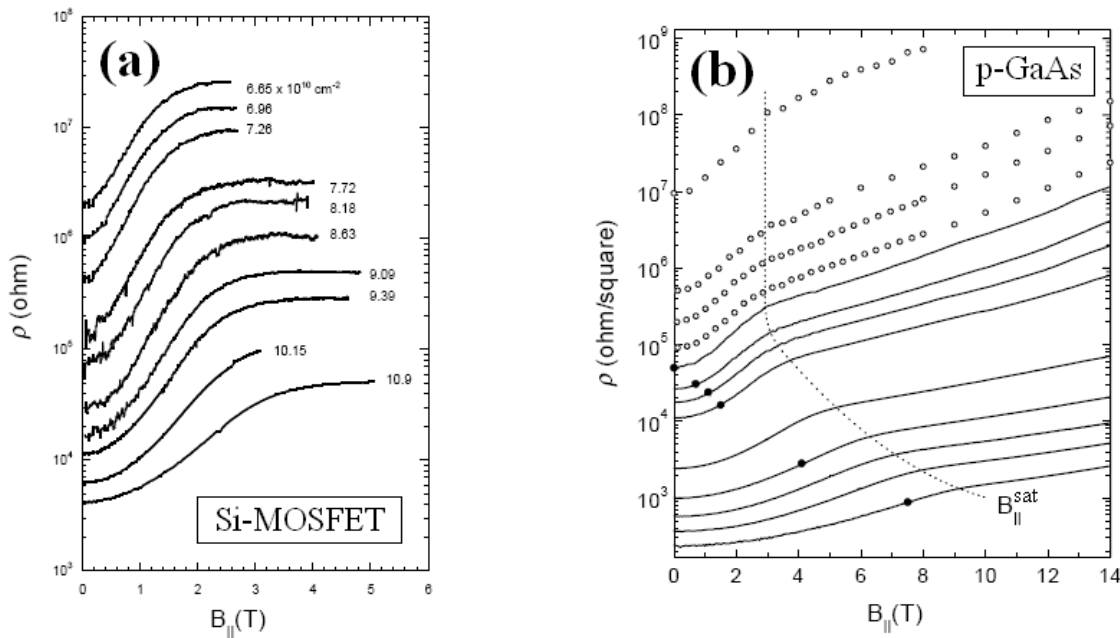


FIG. 2.7 – Mesures de résistivité ρ en fonction d'un champ magnétique parallèle $B_{||}$, à basse température, pour différentes densités n_s autour de la densité critique n_s^c de transition métal/isolant à $B_{||} = 0$: (a) dans un Si-MOSFET (d'après [161]), (b) dans un gaz de trous p-GaAs (d'après [295]). Les trois courbes du haut de (a) et les quatre courbes du haut de (b) (cercles vides) ont été mesurées à des densités $n_s < n_s^c$ c'est-à-dire dans la phase isolante à $B_{||} = 0$. Les autres courbes ont été mesurées dans la phase « métallique ».

rallèle, dans un Si-MOSFET de haute mobilité, pour différentes densités n_s de part et d'autre de la transition métal-isolant à champ magnétique nul [161]. La température est fixée à une faible valeur $T = 300 \text{ mK}$. Lorsque le champ magnétique $B_{||}$ est augmenté, la résistivité ρ croît très rapidement, d'à peu près un ordre de grandeur, puis sature au-delà d'un champ $B_{||}^{\text{sat}}$ dépendant de n_s (de l'ordre de quelques Teslas). L'effet est trouvé quelque soit l'orientation du champ $B_{||}$ dans le plan [214, 253] et surtout, il est identique aux densités $n_s > n_s^c$ et $n_s < n_s^c$, où n_s^c est la densité critique de la transition métal-isolant à $B_{||} = 0$ (voir §2.2). Autrement dit, aucun comportement particulier de la magnétorésistance n'apparaît à la traversée de la transition. Parallèlement à ces constatations, on peut remarquer que le seul effet d'un champ magnétique parallèle est de polariser les spins électroniques par couplage Zeeman (l'effet orbital étant négligeable tant que l'épaisseur de l'échantillon est petite devant la longueur magnétique $l_b = \sqrt{\hbar c / e B_{||}}$, ce qui est effectivement le cas dans les Si-MOSFETs). Par conséquent, on s'attend à ce qu'il ne passe plus rien, c'est-à-dire que la résistivité ρ sature, dès que tous les spins ont été polarisés par un champ $B_{||}$ suffisamment fort. Cette coïncidence entre champ magnétique de polarisation $B_{||}^p$ et champ magnétique de saturation $B_{||}^{\text{sat}}$ a été montré expérimentalement dans des Si-MOSFETs par T. Okamoto *et al* [177] puis S. A. Vitkalov *et al* [281, 279], à « haute » densité $n_s > n_s^c$ (c'est-à-dire du côté métallique). Nous la vérifierons au chapitre 7 de part et d'autre de la transition métal/isolant, grâce à des calculs Monte Carlo Quantiques *ab initio*. Précisons néanmoins qu'elle a été controversée dans [214] où les auteurs étudient l'effet du désordre.

Dans les hétérostructures GaAs (figure 2.7 (b)), la magnétorésistance est qualitativement similaire à celle des Si-MOSFETs sauf qu'elle ne sature pas à partir d'un champ critique,

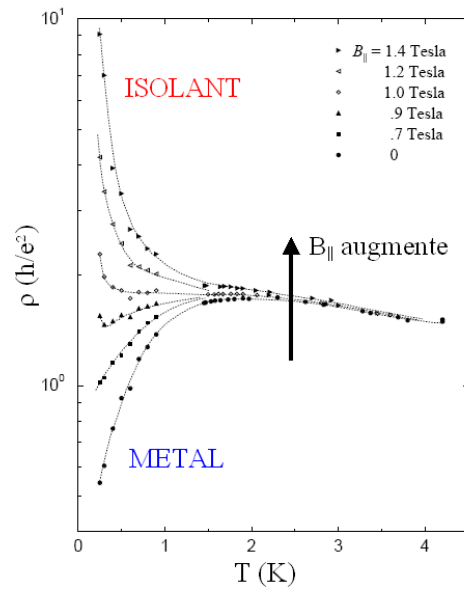


FIG. 2.8 – Résistivité ρ en fonction de la température T pour différentes valeurs du champ magnétique parallèle B_{\parallel} (allant de $B_{\parallel} = 0$ pour la courbe du bas à $B_{\parallel} = 1.4$ T pour la courbe du haut). Le système est un Si-MOSFET et la densité est fixée à $n_s = 8.83 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ (d'après [253]). Le comportement métallique observé à $B_{\parallel} = 0$ à cette densité est supprimé en présence d'un champ magnétique parallèle suffisamment fort.

mais se met seulement à croître beaucoup moins rapidement. En outre, elle présente une forte anisotropie c'est-à-dire qu'elle dépend de l'orientation du champ dans le plan du gaz 2D [182]. Ces deux effets spécifiques aux hétérostructures sont probablement dûs à l'épaisseur de ces échantillons (plus importante que celle des Si-MOSFETs) rendant possible un mouvement orbital des porteurs, couplé au champ B_{\parallel} [228]. Il a tout-de-même été montré, comme dans les Si-MOSFETs, que le champ magnétique de « saturation » auquel la magnétorésistance change de comportement, correspond au champ magnétique pour polariser tous les spins [272].

Suppression des comportements métalliques par un champ magnétique parallèle

Nous avons étudié jusqu'à présent la magnétorésistance d'un gaz 2D à très basse température ($T = 300$ mK pour la figure 2.7 (a) et $T = 50$ mK pour la (b)) et nous avons montré que celle-ci est très largement positive. A plus haute température (de l'ordre de quelques Kelvins), il s'avère que la magnétorésistance devient beaucoup plus faible et s'annule presque. Par conséquent, le comportement métallique $d\rho/dT > 0$ observé à champ magnétique nul ($B_{\parallel} = 0$) est transformé en un comportement isolant à fort champ parallèle, puisqu'à basses températures, la résistivité est fortement augmentée par le champ tandis qu'elle est quasiment inchangée à hautes températures. Autrement dit, comme cela est montré sur la figure 2.8, les comportements métalliques énigmatiques discutés au §2.2 et §2.3 ont la particularité d'être complètement supprimés par l'application d'un champ magnétique parallèle B_{\parallel} , si celui-ci est suffisamment fort (*i.e.* dépasse une valeur critique B_{\parallel}^c) [94, 162, 177, 208, 241, 253]. Or, nous l'avons déjà dit ci-dessus, le seul effet de B_{\parallel} (ou disons plutôt l'effet majoritaire) est de polariser le spin des porteurs. On comprend donc que le degré de liberté de spin joue un rôle essentiel dans l'observation des comportements métalliques à deux dimensions. Plus précisément, dans [253, 295], les auteurs ont remarqué que l'énergie Zeeman $g\mu_B B_{\parallel}^c$ nécessaire

pour supprimer les comportements métalliques (comparable à celle nécessaire pour polariser tous les porteurs) est du même ordre de grandeur que l'énergie thermique $k_B T^*$ où T^* est la température au-delà de laquelle la résistivité cesse de croître dans la « phase métallique » à $B_{\parallel} = 0$ ($T^* \approx 0.2 T_F$ d'après l'estimation faite au §2.3.4). Il existerait donc une énergie caractéristique commune aux comportements métalliques en température $\rho(T)$ et à la magnétorésistance en champ parallèle $\rho(B_{\parallel})$, qui serait l'énergie de polarisation du système. Les deux effets auraient ainsi une même origine. Grâce à des calculs Monte Carlo Quantiques (sans paramètre ajustable), nous validerons cette hypothèse au chapitre 7.

Pour finir, nous précisons que l'existence d'une valeur critique du champ B_{\parallel}^c a été controversée. Pour certains [94, 177, 213, 295], il existe bien un champ parallèle critique $B_{\parallel}^c \neq 0$ tel qu'à $B < B_{\parallel}^c$, la transition métal/isolant continue à être observée (la densité critique n_s^c étant simplement décalée à une valeur plus élevée $n_s^c(B) > n_s^c(B = 0)$) et tel qu'à $B > B_{\parallel}^c$, seuls des comportements isolants soient observés. En revanche, pour d'autres [253], la dépendance en température du champ magnétique critique B_{\parallel}^c défini par le signe de $d\rho/dT$ (observée dans des Si-MOSFETs et visible à l'oeil sur la figure 2.8) remet en cause son existence. Ainsi, selon les auteurs de [253], un champ magnétique parallèle arbitrairement petit serait suffisant pour supprimer tout comportement métallique. En réalité, ces discussions ne sont pas contradictoires mais dépendent seulement de la limite de température dans laquelle on se place : limite théorique de température nulle ou régime de température finie accessible aux expériences.

Remarque 1 : levée de dégénérescence de spin à champ nul par le terme de spin-orbite

Il est possible d'observer une levée de dégénérescence de spin en l'absence de champ magnétique. En effet, un fort couplage spin-orbite, associé à un potentiel de confinement asymétrique, conduit à l'apparition de deux sous-bandes de spin ayant des masses effectives différentes (« spin splitting ») [224]. Ce mécanisme pourrait avoir un rôle à jouer dans les hétérostructures. Ainsi, S. J. Papadakis *et al* [181, 183] ont montré dans des gaz de trous p-GaAs que l'amplitude des comportements métalliques est directement reliée au degré de « spin splitting » : elle est maximale quand celui-ci est maximal, et minimale en l'absence de levée de dégénérescence de spin. C'est pourquoi plusieurs auteurs ont suggéré que les comportements métalliques pouvaient être dûs à un mécanisme de diffusion entre les deux sous-bandes de spin [168, 292]. La destruction de la « phase métallique » par un champ magnétique parallèle serait directement reliée à la suppression du « spin splitting ». Ce scénario a cependant été critiqué dans [103]. De plus, il n'explique pas les comportements métalliques observés dans les Si-MOSFETs puisque ces systèmes ne présentent pas de « spin splitting ».

Remarque 2 : effet d'un champ magnétique perpendiculaire

Nous signalons dans cette remarque que l'effet d'un champ magnétique B_{\perp} perpendiculaire au plan du gaz 2D a également été étudié (pour une initiation rapide, voir les articles de revue [2, 236]). A faible B_{\perp} , on observe une magnétorésistance négative. Celle-ci est plus ou moins modifiée par les interactions, en accord avec la théorie du liquide de Fermi [41, 58, 234, 249] ou pas [119]. Elle suggère la présence de la localisation faible dans les échantillons « métalliques », pouvant ainsi conduire à un état isolant à $T = 0$ (§2.3.4). A fort B_{\perp} , on rentre dans le régime d'effet Hall quantique. Il est alors intéressant de remarquer qu'il existe de fortes analogies entre la « transition métal/isolant » à champ nul discutée dans ce chapitre et la transition entre états de Hall et états isolants à fort champ perpendiculaire. Les deux transitions pourraient ainsi avoir une origine commune ce qui appuierait la thèse de l'existence d'une vraie transition métal/isolant à champ nul, correspondant à une transition de percolation [71, 106, 238, 237]. Signalons aussi que des mesures de résistivité ont été faites en champ incliné (à un angle $0^\circ < \theta < 90^\circ$ par rapport au plan du gaz 2D) [138]. Nous n'en dirons pas plus sur les effets de ces champs perpendiculaires ou inclinés car il s'agit d'un point que nous n'avons pas étudié dans cette thèse. En effet, nous pensons que même si ces études peuvent aider à comprendre les comportements métalliques à champ nul, elles ne mettent pas en évidence un ingrédient physique essentiel à l'observation de ces comportements.

2.4.2 Susceptibilité de spin au voisinage de la transition métal-isolant

La susceptibilité de spin χ est la quantité physique indiquant dans quelle mesure le système bidimensionnel se polarise facilement. Elle est définie par :

$$\chi = \left. \frac{d\Delta n}{dB_{\parallel}} \right|_{B_{\parallel}=0}, \quad (2.3)$$

où $\Delta n = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/2$ est la quantité surfacique de spin, avec $n_{\uparrow\downarrow}$ la densité de spins up et down, et B_{\parallel} , un champ magnétique parallèle au plan du gaz 2D. Dans le cadre de la théorie du liquide de Fermi (voir §1.4.1), les interactions conduisent à une renormalisation des paramètres des quasiparticules, comme la masse effective m en m^* et le facteur de Landé g en g^* . Ainsi, la susceptibilité de spin $\chi_0 \propto gm$ du gaz théorique sans interaction ($\chi_0 = \mu_B gm / 2\pi\hbar^2$ pour un Si-MOSFET et la moitié pour une hétérostructure GaAs) est renormalisée en $\chi^* \propto g^*m^*$, et donc l'effet des interactions sur la susceptibilité peut s'évaluer par le rapport $\chi^*/\chi_0 = g^*m^*/gm$. La mesure de ces paramètres renormalisés m^* , g^* et χ^* constituent la principale source d'informations que peuvent apporter les expériences sur les interactions dans le système.

Il existe de multiples méthodes pour mesurer expérimentalement la susceptibilité de spin renormalisée χ^* . Leur équivalence n'est d'ailleurs pas évidente. L'une d'entre elles consiste à déterminer le produit g^*m^* via l'analyse des oscillations Shubnikov de Haas en champ magnétique incliné (ni parallèle, ni perpendiculaire) [82, 177, 298] ou en champs magnétiques croisés (c'est-à-dire en superposant deux champs, l'un parallèle, l'autre perpendiculaire, contrôlés indépendamment) [217]. D'autres méthodes s'appuient sur le lien entre le rapport χ^*/χ_0 et le champ magnétique de polarisation $B_{\parallel}^p = 2E_F/g^*\mu_B$ (E_F énergie de Fermi) qui s'écrit :

$$\boxed{\frac{\chi}{\chi_0} = \frac{g^*m^*}{gm} = \frac{2\pi\hbar^2 n_s}{g_v gm \mu_B B_{\parallel}^p}}, \quad (2.4)$$

où g_v est la dégénérescence de vallées ($g_v = 2$ pour un Si-MOSFET et 1 pour une hétérostructure GaAs). Précisons que cette relation n'est valable que dans un liquide de Fermi, où les particules en interaction peuvent être remplacées par des quasiparticules indépendantes caractérisées par les paramètres m^* et g^* . Comme nous l'avons vu au §2.4.1, des mesures de B_{\parallel}^p (par les méthodes Shubnikov de Haas évoquées ci-dessus) ont permis de montrer que ce champ de polarisation coïncide avec le champ de saturation B_{\parallel}^{sat} à partir duquel la magnéto-résistivité $\rho(B_{\parallel})$ sature (voir la figure 2.7). Ainsi, il est possible de déterminer la susceptibilité de spin, via l'équation (2.4), en mesurant ce champ B_{\parallel}^{sat} . La question est alors de savoir comment définir proprement ce champ. Certains se sont contentés d'une détermination « à l'oeil » à partir des courbes $\rho(B_{\parallel})$ [214, 272, 280] tandis que d'autres ont effectué différents scalings (de la magnéto-résistance ou de la magnétoconductance pour plusieurs densités n_s) à l'aide d'un unique paramètre donnant $B_{\parallel}^{sat}(n_s)$ [282, 280, 239].

Toutes les mesures de susceptibilité de spin χ^*/χ_0 effectuées à l'aide de ces différentes méthodes (et d'autres), dans divers échantillons bidimensionnels de haute mobilité à basse température, s'accordent sur un point : χ^*/χ_0 croît lorsque la densité n_s est diminuée et cela d'autant plus que l'on s'approche d'une densité critique n_s^* , proche de la densité critique n_s^c de la transition métal/isolant à champ nul. Or, comme l'interaction r_s augmente quand n_s diminue, cette brutale augmentation de la susceptibilité est sans doute liée à un effet des interactions. Elle serait d'ailleurs plus dûe à la renormalisation de la masse effective m^* qu'à

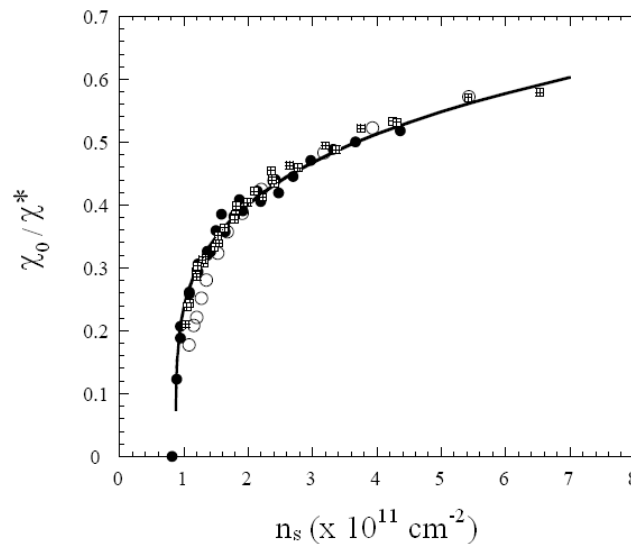


FIG. 2.9 – Mesures expérimentales de la susceptibilité de spin inverse χ_0/χ^* en fonction de la densité de porteurs n_s , dans des Si-MOSFETs de haute mobilité. Les symboles correspondent à différents échantillons et différentes méthodes de mesures (\bullet : données de [282] obtenues par scaling de la magnétoconductance, \circ : données de [239] obtenues par scaling de la magnétorésistance et \boxplus : données de [217] obtenues par analyse des oscillations Shubnikov de Haas). Les différentes mesures sont en accord et montrent un accroissement de la susceptibilité autour d'une valeur critique n_s^* de l'ordre de 10^{11} cm^{-2} . Figure adaptée de [280].

celle du facteur de Landé g^* [240]. Ce comportement est montré sur la figure 2.9 où sont regroupées différentes mesures expérimentales faites dans des Si-MOSFETs [217, 239, 282]. Nous précisons qu'il a aussi été observé dans des hétérostructures GaAs [298] mais l'épaisseur de ces échantillons induit également une dépendance $m^*(B_{\parallel})$ qui complique l'analyse des données [28, 271].

En revanche, les opinions s'opposent concernant une éventuelle divergence de la susceptibilité à la densité $n_s^* \approx n_s^c$. Elle serait le signe d'une aimantation spontanée (*i.e* sans champ magnétique) du gaz bidimensionnel à la transition métal/isolant. D'un point de vue théorique, son existence a été prédite par A. M Finkel'stein [85, 220] et C. Castellani [48] grâce à des calculs de groupe de renormalisation. D'un point de vue expérimental, A. A. Shashkin *et al* [239] et S. A. Vitkalov *et al* [282] défendent également la thèse de la divergence en s'appuyant sur leurs mesures de χ^* (correspondant aux cercles sur la figure 2.9). Mais ces mesures ont été obtenues par des procédés de scaling de la magnétorésistance (ou magnétoconductance) qui ont été contestés dans [205]. A notre connaissance, les autres références expérimentales de la littérature ont toutes constaté une augmentation de la susceptibilité sans se prononcer sur la question de sa divergence. En réalité, nous pensons que les mesures expérimentales ne sont pas assez précises à basse densité (au voisinage de la transition) pour conclure ou non à une divergence de la susceptibilité. Et cela quelque soit la méthode employée. Nous reviendrons sur ce point au chapitre 7 et nous montrerons, grâce à des calculs Monte Carlo Quantique, que la susceptibilité de spin, bien qu'augmentée par les interactions, ne diverge pas.

Le lecteur souhaitant obtenir des compléments sur la question de la susceptibilité de spin dans les gaz bidimensionnels de haute mobilité est invité à consulter les articles de type revue [136, 215, 236].

2.5 Indice expérimental : rôle des vallées

L'objectif de cette section est de montrer, par l'analyse de résultats expérimentaux, que le degré de liberté de vallée joue un rôle essentiel dans la compréhension des comportements métalliques, au même titre que le degré de liberté de spin.

2.5.1 Effet métallique accru en présence de dégénérescence de vallées

Le degré de liberté de vallée des électrons ou des trous a été introduit au §2.1. Nous rappelons que chaque vallée correspond à un minimum de la structure de bande du solide cristallin dans lequel les porteurs évoluent. Dans les hétérostructures GaAs, il n'y a pas de vallées ou plutôt il n'y en a qu'une centrée en $k = 0$. En revanche, il existe une double dégénérescence de vallées dans les Si-MOSFETs, ainsi que dans les hétérostructures AlAs et SiGe (dans certains cas). Or, nous avons vu au §2.2 que l'augmentation de la résistivité dans la « phase métallique » $d\rho/dT > 0$ (à champ nul) pouvait atteindre un facteur dix dans les Si-MOSFETs alors que dans les hétérostructures GaAs, elle ne dépasse pas un facteur trois et est même le plus souvent limitée à quelques pourcents. Il suffit d'ailleurs pour s'en convaincre de comparer les figures 2.3 (a) et 2.3 (b). Ainsi, la double dégénérescence de vallées présente dans les Si-MOSFETs pourrait considérablement renforcer l'amplitude des comportements métalliques. Cette idée est soutenue par les calculs de groupe de renormalisation effectués par A. Punnoose et A. M. Finkel'stein [219, 220] dont nous reparlerons au §2.6.1.

2.5.2 Equivalence entre les degrés de liberté de spin et de vallée

En appliquant un champ magnétique parallèle B_{\parallel} dans le plan du gaz 2D, il est possible par effet Zeeman de modifier la polarisation de spin du système (voir la figure 2.10 (a)). Les travaux expérimentaux présentés au §2.4.1 ont ainsi montré que les comportements métalliques $d\rho/dT > 0$ pouvaient être supprimés par l'application d'un champ B_{\parallel} suffisamment fort pour polariser tous les spins. De façon équivalente, M. Shayegan *et al* ont mis au point une méthode pour modifier la polarisation de vallée dans des hétérostructures n-AlAs/AlGaAs, possédant à la base deux vallées (anisotropes) dégénérées X et Y équitablement peuplées [242]. L'idée est d'appliquer, via un dispositif piézo-électrique, une contrainte ϵ à l'échantillon, qui le déforme, et rompt ainsi la symétrie à l'origine de la dégénérescence des deux vallées. A $\epsilon > 0$, les électrons de la vallée devenue énergétiquement défavorable se déplacent dans l'autre, de façon à compenser la différence d'énergie $\Delta_v(\epsilon)$ entre les deux vallées (voir la figure 2.10 (b)). Ce dispositif permet ainsi aux auteurs d'étudier indépendamment⁶ le rôle du spin (par B_{\parallel}) et celui des vallées (par ϵ) dans l'observation de comportements métalliques.

En étudiant la dépendance $\rho(\epsilon)$ de la résistivité pour différentes températures, les auteurs ont montré dans [101] que la « phase métallique » peut être supprimée si l'une des deux vallées devient beaucoup plus peuplée que l'autre (de la même manière qu'elle est supprimée si les porteurs sont fortement polarisés en spin). Ces résultats suggèrent l'équivalence des degrés de liberté de spin et de vallée dans le problème de la transition métal/isolant à 2D. Plus précisément, le diagramme de phase expérimental obtenu dans [101] et présenté sur la figure 2.10 (c) montre qu'il est nécessaire de polariser à la fois en spin et en vallée pour supprimer les comportements métalliques. Ce résultat est d'ailleurs tout-à-fait en accord avec les prédictions

⁶En réalité, l'application de B_{\parallel} peut aussi induire une levée de dégénérescence de vallée par couplage orbital dans les échantillons AlAs du fait de leur épaisseur [96] mais celle-ci est négligeable.

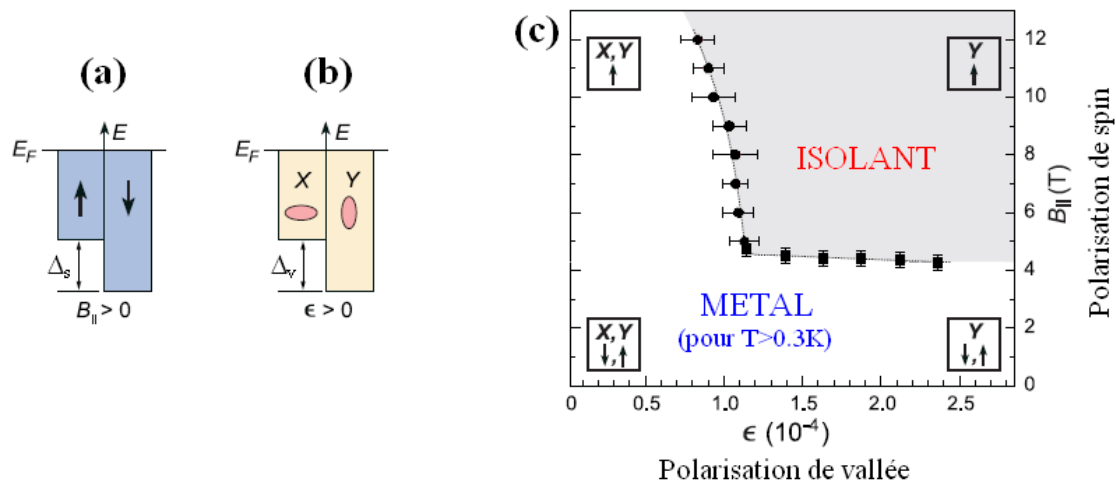


FIG. 2.10 – (a) et (b). Schémas montrant respectivement les polarisations de spin (\uparrow ou \downarrow) et de vallée (X ou Y) lorsqu'un champ magnétique parallèle B_{\parallel} ou une contrainte ϵ est appliqué(e) au gaz 2D. (c) Diagramme de phase expérimental d'une hétérostructure n-AlAs à densité fixée, en fonction de la polarisation de vallée (réglée par ϵ) et de la polarisation de spin (réglée par B_{\parallel}). Le caractère métallique ou isolant a été déterminé par le signe de $d\rho/dT$ (ρ résistivité) sans descendre en dessous de $T = 0.3\text{K}$. Figures adaptées de [101].

théoriques de [44]. Il paraît cependant en contradiction avec les conclusions du §2.4.1 selon lesquelles une polarisation en spin (sans polarisation de vallée) suffit à supprimer la « phase métallique » dans les Si-MOSFETs. Nous ne discuterons pas ici de ce désaccord dans la mesure où les systèmes d'étude ne sont pas les mêmes (hétérostructure AlAs ou Si-MOSFET). Nous retiendrons simplement du diagramme 2.10(c) la symétrie des rôles joués par le spin et les vallées, ainsi que la possibilité de supprimer les comportements métalliques et de restorer un comportement isolant « normal » en gelant les degrés de liberté internes des porteurs.

Pour finir, nous signalons que l'analogie entre les degrés de liberté de spin et de vallée est également visible sur les susceptibilités. En effet, les susceptibilités de spin χ_s et de vallée χ_v ont été mesurées en fonction de la densité de porteurs n_s dans [102], toujours dans des hétérostructures AlAs. Les auteurs trouvent que χ_v croît lorsque n_s diminue (*i.e.* les interactions augmentent), de la même manière que χ_s (voir §2.4.2).

2.6 Revue des propositions théoriques

De nombreux travaux théoriques, divers et variés, ont fait suite aux expériences de Kravchenko. On peut les diviser en deux catégories. La première école défend l'existence d'une vraie transition métal/isolant quantique et donc la présence d'un vrai métal à température nulle entre l'isolant d'Anderson à haute densité et le cristal de Wigner désordonné à basse densité. Son plus fervent représentant est sans doute S. V. Kravchenko lui-même. Si ce point de vue est le bon alors la phase métallique est nécessairement très « exotique » car elle ne peut pas être décrite dans le cadre de la théorie du liquide de Fermi [54, 65] puisque sans interaction, la théorie d'échelle de la localisation prédit toujours un isolant. La seconde école explique, au contraire, que les comportements métalliques ne sont qu'apparents et qu'ils doivent disparaître à température nulle. Elle préserve donc le paradigme forgé au cours des années 80, interdisant la présence d'un métal à deux dimensions.

Pour lire à bon escient la suite de cette section, il faut réaliser à quel point la compréhension théorique des comportements métalliques est difficile car à la fois le désordre et les interactions sont importants dans les échantillons en question. Ainsi, pour traiter le problème, le théoricien n'a pas d'autre choix que de faire des hypothèses *ad hoc* sur la nature du mécanisme à l'origine de ces comportements. Dans les deux premiers paragraphes 2.6.1 et 2.6.2, nous présentons les théories insistant sur le rôle clé des interactions mais délaissant plus ou moins l'importance du désordre. Puis, aux §2.6.3 et §2.6.4, nous exposons des théories adoptant la démarche inverse, c'est-à-dire se limitant essentiellement à des modèles à une particule mais approfondissant le rôle du désordre. La dernière partie 2.6.5 qui évoque d'autres théories peu concluantes, peut être sautée en première lecture.

2.6.1 Approche par le liquide de Fermi à faible interaction : calculs perturbatifs

Comme nous l'avons vu au §1.4.3 (voir en particulier l'équation (1.27)), la correction $\delta\sigma_{ee}$ à la conductivité de Drude σ_D , due aux interactions, a été calculée perturbativement (pour $r_s \ll 1$) dans le régime diffusif (pour $k_F l \gg 1$) par B. L. Altshuler et A. G. Aronov en 1980 [7]. En se limitant aux premiers diagrammes Hartree-Fock, les auteurs ont ainsi montré que les interactions électron/électron dans les systèmes bidimensionnels désordonnés conduisent à une correction logarithmique de la conductivité σ_D dont le signe résulte d'une compétition entre le terme d'Hartree délocalisant le système et le terme de Fock le localisant. Pour des électrons sans spin, le terme de Fock l'emporte et l'on a $\delta\sigma_{ee} < 0$. Autrement dit, les interactions viennent renforcer le comportement isolant $\delta\sigma/\delta T > 0$ déjà prédit par les corrections de localisation faible $\delta\sigma_{WL}$ (§1.3.1).

Les auteurs ont également montré que les M degrés de liberté de spin et de vallée peuvent avoir un rôle positif pour le transport et ainsi induire, via les interactions, un comportement métallique $\delta\sigma/\delta T < 0$ à basse température. L'idée est que le terme d'Hartree (« singlet channel »), proportionnel à M , délocalise d'autant plus le système que les porteurs ont un nombre M élevé de degrés de liberté internes tandis que le terme de Fock (« triplet channel ») est indépendant de M . Quelques années plus tard, ce travail a été repris par A. M. Finkelstein [85] et C. Castellani [47], à l'aide des techniques du groupe de renormalisation : essentiellement les mêmes conclusions ont été établies en resommant une plus large classe de diagrammes en interaction. Ces travaux ont ainsi suggéré la possibilité d'une phase métallique en dimension deux à température nulle. Cependant, celle-ci n'a pas été prise au sérieux car les calculs conduisaient à une divergence du paramètre d'interaction, avant que la température nulle ne soit atteinte. Le domaine de validité de ces théories perturbatives, limité aux faibles interactions, était donc largement outrepassé. Depuis, Castellani *et al* ont montré que ces théories restent sous contrôle même à très basse température si l'on se place dans un régime de très faible désordre [46]. Ils ont ainsi soutenu dans ce cas la thèse de l'existence d'un métal à température nulle. Plus récemment dans [220], A. Punnoose et A. M. Finkelstein ont réussi à étendre les précédentes théories perturbatives basées sur le groupe de renormalisation, au régime des fortes interactions (*i.e.* à resommer tous les diagrammes en interaction) dans le cas particulier où le nombre de vallées du système tend vers l'infini. Leurs travaux prédisent l'existence d'un point critique quantique séparant une phase isolante due au désordre d'une phase métallique stabilisée par les interactions (voir la figure 2.11). Cette phase métallique à température nulle s'interprète comme une instabilité du liquide de Fermi car elle apparaît dès

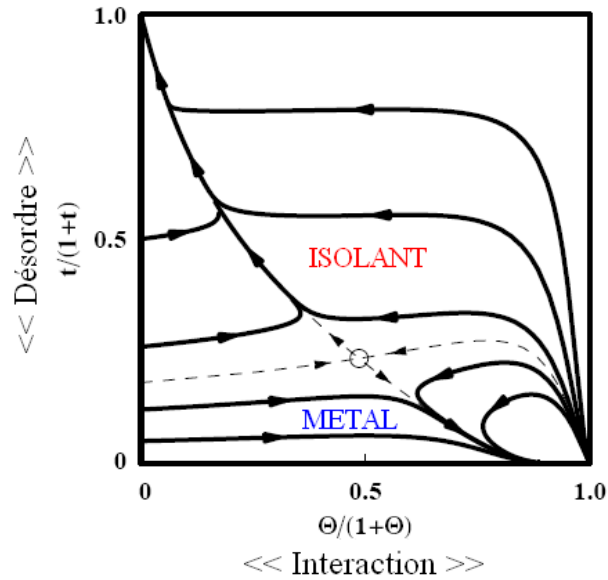


FIG. 2.11 – Diagramme de phase désordre/interaction du gaz bidimensionnel d'électrons (dans la limite où le nombre de vallées tend vers l'infini), d'après A. Punnoose et A. M. Finkelstein [220] (voir texte). t désigne la résistance par vallée mesurant l'importance du désordre et Θ est le paramètre d'interaction de la théorie. Les flèches indiquent la direction du flot de renormalisation lorsque la température est diminuée. Le cercle correspond au point critique quantique séparant les phases métallique et isolante.

que l'interaction est branchée (il n'y a pas de passage continu de l'isolant au métal).

Pour finir, il est intéressant de discuter dans quelle mesure ces théories perturbatives sont pertinentes pour expliquer les comportements métalliques observés en dimension deux.

- *Points positifs.* Les théories présentées ci-dessus traitent de l'effet des interactions sur le transport (autant que faire se peut analytiquement) et l'on sait que celles-ci sont effectivement cruciales dans l'observation des comportements métalliques (voir §2.3.2). Elles mettent de plus en exergue le rôle des degrés de liberté de spin et de vallée (discuté au §2.4 et §2.5). En particulier, elles prédisent la suppression de la phase métallique par un fort champ magnétique parallèle (voir §2.4.1) et l'augmentation drastique de la susceptibilité de spin à la transition métal-isolant (voir §2.4.2). En réalité, elles prédisent même une divergence de cette susceptibilité mais celle-ci n'a pas été confirmée expérimentalement à ce jour. Enfin, un accord quantitatif entre théorie et expérience a été trouvé dans [219, 18] à « haute » densité, c'est-à-dire du côté métallique loin de la transition.

- *Points négatifs.* Toutes ces théories perturbatives sont limitées au régime diffusif de faible désordre ($k_F l \geq 1$). Plus précisément, les corrections d'interaction sont uniquement calculées sur le terme de Drude. Les effets d'interférence quantique liés au désordre sont pris en compte séparément, à l'ordre le plus bas, par le terme de localisation faible mais celui-ci ne contient pas les interactions. Ainsi, ces théories n'étudient en rien l'effet conjoint interaction/localisation d'Anderson qui semble pourtant être la clé des comportements métalliques (voir §2.3). Par ailleurs, elles sont limitées aux faibles interactions, sauf dans le cas d'un nombre infini de vallées mais ce cas est bien sûr non physique. Enfin, elles tentent d'expliquer les comportements métalliques expérimentaux comme une propriété du fondamental du gaz 2D à température nulle alors que nous avons vu que ces comportements impliquent en fait des états excités de « haute énergie » (§2.3.4).

Remarque : calculs perturbatifs dans le régime ballistique

De la même manière qu'Altshuler et Aronov ont calculé la correction des interactions $\delta\sigma_{ee}(T)$ dans le régime diffusif $T\tau \ll \hbar$ [7], Zala *et al* l'ont déterminée dans le régime ballistique encore moins désordonné $T\tau \gg \hbar$ (τ temps de collision élastique) [297]. Pour éviter les confusions, précisons qu'il est équivalent de définir le régime ballistique par le critère $l \gg L$ où l est le libre parcours moyen élastique (relié à τ) et L la longueur de cohérence de phase (reliée à T). Expérimentalement, ce régime est atteint à très hautes densités, loin de la « transition métal/isolant » ($n_s \gg n_s^c$) et à température pas trop basse. Ainsi, Zala *et al* ont montré que dans le régime ballistique, $\delta\sigma_{ee}(T)$ est linéaire en température (au lieu de logarithmique dans le régime diffusif) et est à l'origine d'un comportement métallique $\delta\sigma/\delta T < 0$. Il nous paraît important de mentionner ces travaux car de nombreuses données expérimentales ont été analysées dans le cadre de cette théorie, loin de la transition ($\sigma \gg e^2/h$) [58, 174, 204, 216, 240, 278]. Selon cette école, les comportements métalliques (du moins à haute densité) correspondent à un effet de température finie disparaissant à température nulle et sont dus à un effet des interactions, compatible avec la théorie du liquide de Fermi. Cependant, ces travaux ne permettent pas d'expliquer les comportements métalliques autour de la transition où désordre et interaction sont mêlés.

2.6.2 Approche par le cristal de Wigner à forte interaction

Les théories présentées à la précédente section utilisent toutes le liquide de Fermi comme point de départ et regardent comment les interactions viennent le perturber. Nous allons ici nous intéresser aux théories adoptant la démarche inverse c'est-à-dire partant de l'isolant à forte interaction. La nature de cet isolant n'est pas connu : certains l'identifient à un cristal de Wigner accroché par le désordre [57], d'autres à un « verre de Wigner » [37, 53, 187, 266] mais la question n'est pas tranchée. Selon les théories présentées dans cette section, les comportements métalliques observés à deux dimensions pourraient être liés au mécanisme de fusion quantique de ce cristal de Wigner désordonné vers le liquide de Fermi à faible interaction (en l'occurrence l'isolant d'Anderson). Typiquement, deux scénarios ont été proposés pour cette transition.

- **Phase intermédiaire.** Certains auteurs défendent l'existence d'une phase intermédiaire entre le cristal de Wigner et le liquide de Fermi. Nous avons déjà vu au §1.4.2 que le problème sans désordre a été étudié numériquement par J.-L. Pichard *et al* [121, 170, 171] puis H. Falakshahi *et al* [81, 287]. Récemment, B. Bernu *et al* ont découvert que les solutions Hartree-Fock sans désordre traduisent l'existence d'une phase métallique entre le liquide de Fermi à faible interaction et le cristal de Wigner à forte interaction [34]. Cependant, toute conclusion concernant la « transition métal/isolant » discutée dans ce chapitre serait hâtive et malvenue car ces travaux sont limités aux systèmes non désordonnés alors que dans les expériences, il ne fait aucun doute que le désordre est important (voir §2.3.3). Ainsi, pour incorporer le désordre, plusieurs auteurs ont proposé une transition du liquide de Fermi vers un verre de Wigner. On peut citer par exemple les travaux de S. Chakravarty *et al* selon lesquels il s'interpose entre ces deux phases une vraie phase métallique, stabilisée par de fortes interactions, malgré la présence du désordre [54, 53]. L'origine de cette phase métallique n'est néanmoins pas expliquée. Précisons que d'autres théories basées sur l'existence d'un verre de Wigner à très basse densité ont également été formulées [61, 187, 266].

- **Mélange de phases.** Un autre scénario pour la transition liquide de Fermi/cristal de Wigner envisage la coexistence de ces deux phases à interaction intermédiaire. L'idée est la suivante. Il est connu qu'autour du point de fusion d'une transition liquide/solide classique, le système se sépare spontanément en deux phases, l'une liquide, l'autre solide, pour minimiser son énergie [185]. Dans le cas du gaz bidimensionnel d'électrons, une telle séparation de phase

est impossible car elle conduirait à la formation d'un dipôle macroscopique bien trop coûteux en énergie. Selon B. Spivak, les phases peuvent néanmoins coexister via la formation de petites bulles de phase minoritaire dans la phase majoritaire lorsque la densité est variée ([257, 259] et voir aussi les travaux antérieurs de J. Shi *et al* [245]). Ainsi, la transition liquide de Fermi/cristal de Wigner s'opèrerait par l'intermédiaire d'une série de phases de microémulsion, d'abord par la formation de « bulles » puis de « couches ». Les comportements métalliques discutés dans ce chapitre seraient alors dûs au fait que la proportion de cristal de Wigner dans le liquide de Fermi dépend de la température (et seraient ainsi, autant que nous le comprenons, un effet de température finie) [260]. La transition métal/isolant en tant que telle se comprendrait comme une transition de percolation d'un liquide de Fermi « métallique » vers un cristal de Wigner accroché isolant. Précisons que depuis, X. Waintal a montré par des calculs Monte Carlo que ce scénario est improbable [287]. En effet, même si les phases de micro-émulsion existent, ce ne serait que sur une plage de densité extrêmement réduite (correspondant à $\Delta r_s \approx 0.5!$) et la coexistence des phases ne ferait gagner que quelques millikelvins. Autrement dit, il n'y a aucune chance pour que de telles phases jouent un rôle dans les expériences.

En résumé, voici ce que l'on pourra retenir de l'intérêt de ces différentes théories dans la démarche de compréhension des expériences de Kravchenko (et suivantes).

- *Points positifs*. Ces théories ont l'avantage de prendre en compte les interactions électron-électron, sans partir du postulat qu'elles peuvent être traitées dans le cadre de la théorie du liquide de Fermi. Certaines sont pertinentes pour discuter de la phase isolante à basse densité (cristal de Wigner accroché, phase hybride, verre de Wigner, ...)

- *Points négatifs*. Elles ne permettent pas d'expliquer les comportements métalliques auxquels nous nous intéressons. La théorie de Spivak rend compte, à un niveau qualitatif, de quelques caractéristiques de ces comportements mais elle paraît par ailleurs fortement invraisemblable. De même pour les récents travaux de V. Dobrosavljevic qui ne prennent pas en compte le désordre [45, 180]. De façon générale, le fait que la plupart de ces théories néglige l'ingrédient désordre, les rend inadaptées à la discussion du problème de la transition métal/isolant à 2D. On pourra donc considérer qu'elles ont à ce jour échoué en ce qui concerne ce problème. Elles gardent néanmoins un intérêt théorique et certaines d'entre elles [81, 34] méritent d'être approfondies et élargies au cas désordonné.

2.6.3 Théories semi-classiques « sans » interaction

Aux cours des deux sections précédentes, nous avons présenté différents travaux défendant la thèse de l'existence d'une vraie phase métallique à température nulle, induite par les interactions. Nous allons à présent nous intéresser à des théories développant un tout autre point de vue. Selon elles, les comportements métalliques correspondent à un effet semi-classique qui se comprend dans le cadre de la théorie du liquide de Fermi, si bien qu'ils doivent disparaître à très basses températures. Plusieurs indices expérimentaux, déjà évoqués au §2.3.4, permettent d'appuyer ce scénario :

- la température caractéristique à laquelle la résistivité augmente dans la « phase métallique » est beaucoup trop proche de la température de Fermi T_F ($T \approx 0.2 T_F$) pour que le régime quantique dégénéré $T \ll T_F$ soit atteint (voir la figure 2.6 et [8]).
- à haute densité (loin de la transition), les comportements métalliques redeviennent isolants à très basse température, en accord avec la théorie de la localisation faible [212, 104].

- une magnétorésistance négative en champ magnétique perpendiculaire, signature de la suppression des corrections de localisation faible, est observée sur une large plage de densité couvrant le régime « métallique » [41, 40, 209, 203, 234, 249].

Ainsi, les auteurs des théories présentées dans cette section expliquent les comportements métalliques par des modèles de particules indépendantes (puisque la théorie du liquide de Fermi reste valable selon eux), sans prendre en compte les effets d'interférence quantique dûs au désordre ou à l'interaction (puisque qu'il s'agit pour eux d'un effet semi-classique). Dans ces modèles, le transport dans la phase « métallique » est essentiellement décrit par le terme classique de Drude. Les comportements métalliques en température $\rho(T)$ ou la magnétorésistance positive géante en champ parallèle $\rho(B_{\parallel})$ se comprennent en disant que le désordre effectif vu par les porteurs dépend de la température T et du champ magnétique B_{\parallel} . Par ailleurs, ce terme de Drude est mis en compétition avec le terme quantique de localisation faible. A très basse température, ce dernier terme l'emporte ce qui conduit au retour d'un comportement isolant. Dans [8], B. Altshuler *et al* expliquent que ce retour vers l'isolant n'est observé dans les expériences qu'à haute densité car la température n'a pas été suffisamment abaissée, près de la transition, pour que les corrections quantiques apparaissent. En effet, cela se comprend facilement en se rappelant que la température de Fermi T_F décroît lorsque la densité n_s diminue et donc, pour que le rapport T/T_F reste petit près de la transition et que les corrections quantiques dominent, il faut que la température T soit extrêmement basse (bien plus basse que dans les expériences).

Plusieurs mécanismes microscopiques ont été proposés pour expliquer la dépendance en température et/ou en champ parallèle du désordre, à l'origine des comportements métalliques. Pour certains, elle s'explique par le fait que l'écrantage du désordre par les porteurs de charge dépend de la température et du spin des porteurs. Ce point de vue est notamment défendu par A. Gold et V. T. Dolgoplov dans [67, 97] et par S. Das Sarma et E. H. Hwang dans [226, 227, 229]. Les auteurs trouvent une dépendance linéaire en T/T_F de la résistivité dans la phase « métallique », en accord avec les calculs perturbatifs de Zala *et al* (voir la remarque du §2.6.1) et plusieurs résultats expérimentaux [55, 103, 235]. Un autre mécanisme a été proposé par B. L. Altshuler *et al* [10, 11] (voir aussi les travaux similaires de T. M. Klapwijk et S. Das Sarma [124]). Selon eux, les porteurs pourraient être piégés par des défauts situés à l'interface Si/SiO₂ (pour des Si-MOSFETs) dont la concentration dépendrait de la température. L'effet d'un champ parallèle serait dû à un effet de spin sur les pièges. Signalons que ces travaux ont largement été critiqués par S. V. Kravchenko *et al* [137, 133] et P. Phillips [188], puis défendus par leurs auteurs [9, 12], ce qui donne une idée de la divergence des opinions sur le sujet.

Pour finir, essayons de synthétiser en quelques lignes les avantages et inconvénients de telles théories semi-classiques en ce qui concerne la question des comportements métalliques énigmatiques à deux dimensions.

- *Points positifs.* Ces théories ne se concentrent pas sur la nature de l'état fondamental à température nulle mais bien sur le régime de température effectivement exploré dans les expériences. De plus, elles proposent une description (plus ou moins) réaliste du désordre dans les échantillons (contrairement aux théories analytiques utilisant un désordre blanc, pas toujours physique). Enfin, un bon accord quantitatif est trouvé entre ces théories et les résultats expérimentaux.

- *Points négatifs.* Elles négligent le rôle des interactions. Or on a vu au §2.3 que celles-ci sont essentielles puisque les comportements métalliques apparaissent dans une région fortement

corrélée du diagramme de phase et sont absents à faible interaction. En outre, ces théories font appel à des ingrédients extrinsèques qui n'expliquent pas la grande reproductibilité des résultats expérimentaux dans divers échantillons.

2.6.4 Modèles de percolation

L'existence d'une transition classique de percolation dans le gaz bidimensionnel (en l'occurrence dans des hétérostructures) a été suggérée à la fin des années 80 par A. L. Efros [74] puis J. A. Nixon *et al* [173], avant que S. V. Kravchenko n'observe la transition discutée dans ce chapitre. Elle a pour origine la présence, dans le gaz 2D, d'un potentiel de désordre à longue portée (*i.e.* de longueur caractéristique supérieure à la distance moyenne entre particules). Lorsque la densité surfacique n_s est élevée, il y a suffisamment de porteurs pour combler les puits de potentiel si bien que le désordre effectif est lissé et le système, homogène. À plus faible densité, l'écrantage du désordre par les porteurs est moins efficace et des inhomogénéités de densité apparaissent : les porteurs se placent préférentiellement dans les puits du potentiel tandis que les « pics » sont vides (voir la figure 2.12 (a)). Si les zones dépeuplées sont suffisamment nombreuses, elles empêchent l'agglomération des zones riches en porteurs et donc la conduction d'un courant (du moins à température finie, par un mécanisme d'écrantage du désordre dépendant de la température comme présenté au §2.6.3). Il existe ainsi un seuil de percolation caractérisé par une densité critique n_s^{percol} au-dessus de laquelle le système est « métallique » et en-dessous de laquelle il est isolant. La question est alors de savoir si un tel mécanisme classique de percolation joue un quelconque rôle dans la transition métal/isolant observée par Kravchenko.

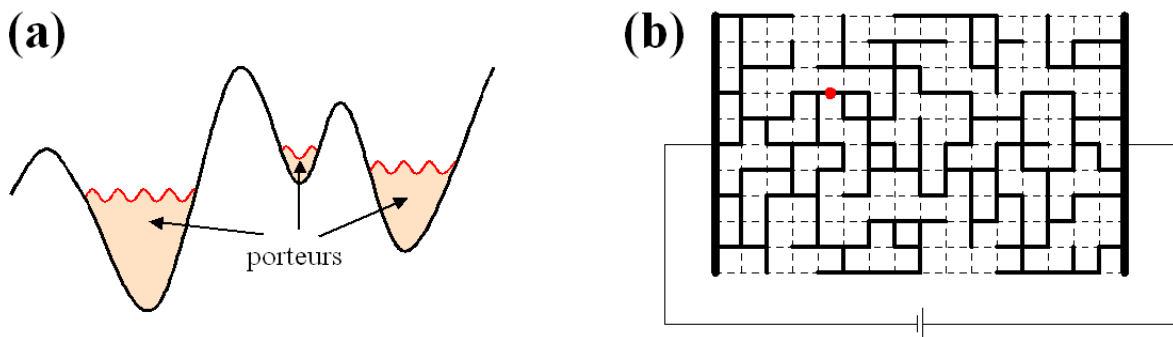


FIG. 2.12 – (a) Inhomogénéité de densité dans un potentiel de désordre à longue portée. Les porteurs peuplent préférentiellement les puits de potentiel. (b) Principe d'un modèle de percolation sur un réseau carré à 2D. Chaque lien est occupé par une résistance r avec une probabilité p et on cherche à calculer la conductance totale g entre les deux bords à gauche et à droite. On peut montrer qu'il existe une valeur critique de la probabilité p_c , dit seuil de percolation, telle que pour $p \leq p_c$, $g = 0$ (isolant) et pour $p > p_c$, $g \neq 0$ (métal). Sur la configuration représentée, les liens en gras sont occupés par une résistance r et les autres sont inoccupés, de sorte que $g \neq 0$. Le lien marqué d'un point rouge est le lien critique qui, s'il est supprimé, coupe le réseau percolant et annule la conductance du système. Figure issue de [147].

Plusieurs auteurs ont proposé des modèles phénoménologiques de percolation pour décrire la « transition de Kravchenko ». On peut citer par exemple le modèle sans interaction de Y. Meir [159, 160]. Celui-ci décrit le transport dans le gaz 2D par un réseau classique de résistances quantiques, correspondant aux événements tunnels reliant les zones peuplées en porteurs (supposées sans cohérence de phase) par-delà les zones dépeuplées. On peut également citer le modèle de J. Shi *et al* [246], dit de méta-percolation, qui a la particularité d'être

un modèle de percolation quantique. On ne détaillera pas ces modèles mais l'idée générale sous-jacente est présentée sur la figure 2.12 (b) de manière extrêmement simplifiée, de façon à illustrer le lien entre percolation et transition métal/isolant. Finalement, ces différents modèles, et d'autres [109, 245], permettent plus ou moins de rendre compte de l'augmentation de la résistivité avec la température dans la « phase métallique » et de sa suppression par un champ magnétique parallèle. Ils sont tous basés sur l'existence d'inhomogénéités de densité dans la « phase métallique ».

De telles inhomogénéités ont été observées expérimentalement à maintes reprises dans des hétérostructures GaAs [70, 76, 117, 269]. De plus, il est connu que les impuretés dopantes de ces échantillons créent un potentiel à longue portée dans le gaz 2D (voir §2.1.2), expliquant l'apparition de ces inhomogénéités. Ainsi, plusieurs auteurs dont notamment S. Das Sarma *et al* dans [230], ont défendu la thèse selon laquelle la « transition de Kravchenko » dans les hétérostructures GaAs correspond à une transition classique de percolation [22, 148, 156]. Ce scénario rejoint ceux présentés à la section précédente 2.6.3 car dans les deux cas, la « phase métallique » est dû à un désordre effectif dépendant de la température et disparaît à température nulle. A ce jour, il semble admis que les hétérostructures GaAs soient le siège d'un phénomène de percolation, associé à la transition métal/isolant discutée dans ce chapitre. Cependant, il est important de préciser qu'une telle transition peut être observée dans des hétérostructures GaAs sans impliquer de la percolation, si le potentiel à longue portée est supprimé (voir les expériences de M. Baenninger *et al* [23]).

Le cas des Si-MOSFETs est différent de celui des hétérostructures. En effet, nous avons vu au §2.1.1 que le désordre est essentiellement à courte portée dans les Si-MOSFETs. Il ne peut donc pas induire d'inhomogénéité de densité à l'origine d'un phénomène de percolation. Ainsi, on pourra retenir que la « transition de Kravchenko » n'a rien à voir avec de la percolation dans les Si-MOSFETs. Ce point de vue a néanmoins été contestée dans [109, 268].

Pour finir, résumons dans quelle mesure le scénario d'une transition de percolation est approprié pour rendre compte des expériences discutées dans ce chapitre.

- *Points positifs.* Ce scénario capture quantitativement plusieurs données expérimentales mesurées dans des hétérostructures GaAs. De plus, il se base sur une description réaliste du désordre.

- *Points négatifs.* Ce scénario ne s'applique que lorsqu'il existe un potentiel à longue portée dans le gaz 2D. En particulier, il échoue pour expliquer la transition métal/isolant observée dans les Si-MOSFETs. Par ailleurs, il met les interactions au second plan alors que l'on sait que celles-ci jouent un rôle essentiel. Enfin, si ce scénario peut être pertinent pour décrire la transition en elle-même, il n'apporte rien quant à la compréhension de l'origine des comportements métalliques.

Dans la suite, notre modèle ne prendra pas en compte l'existence d'un potentiel à longue portée et donc nous n'étudierons pas les effets de percolation.

2.6.5 Autres propositions théoriques

Nous finissons cette revue en citant en vrac d'autres propositions théoriques concernant la transition métal/isolant à deux dimensions. Le lecteur devrait ainsi être convaincu de la multiplicité des points de vue sur le sujet.

- *Supraconductivité.* Pour P. Phillips [189], J. S. Thakur et D. Neilson [265] ou encore T. R. Kirkpatrick et D. Belitz [30], il est probable que les comportements métalliques correspondent à une phase supraconductrice. Cette hypothèse est suggérée par différentes analogies entre la

transition métal/isolant à 2D et la transition supraconducteur/isolant observée dans des films minces [98] (symétrie, loi d'échelle, effet d'un champ parallèle). Cependant, aucun signe d'annulation de la résistivité n'a été observé en dimension deux.

- *Couplage spin-orbite*. Nous avons vu au §2.4.1 (en remarque) que le terme de spin-orbite conduit à une levée de dégénérescence de spin dans les gaz 2D confinés par un potentiel asymétrique. Ainsi certains auteurs décrivent les comportements métalliques par un modèle de diffusion dépendant de la température entre les deux bandes de spin [168]. Par ailleurs, sans interaction, le couplage spin-orbite est connu pour supprimer les corrections de localisation faible (« anti-localisation ») [113]. Il a même été montré, toujours sans interaction, que ce couplage modifie la fonction d'échelle $\beta(g)$ introduite au 1.3.3 de sorte qu'elle s'annule en changeant de signe. Ainsi il existerait dans ce cas une transition métal/isolant à température nulle. D'après V. M. Pudalov, elle serait liée à la « transition de Kravchenko » [206].

- *Effet Peltier*. Dans [56], M. V. Chermisin montre que les corrections à la résistivité dues à l'effet Peltier pourraient être à l'origine des comportements métalliques. Ceux-ci seraient donc dûs à un effet classique et disparaîtraient à température nulle.

- *Loi de Mott activée par les interactions*. Nous avons vu au premier chapitre (remarque du §1.3.2) que le transport est possible dans l'isolant d'Anderson par activation thermique. *A priori*, ce mécanisme connu sous le nom de loi de Mott est rendu possible par l'apport énergétique des phonons. Dans [26, 27], D. M. Basko *et al* se demandent dans quelle mesure les interactions électroniques peuvent jouer le même rôle que les phonons et causer du « hopping » entre états localisés. Ils montrent que les interactions seules peuvent conduire à une conductivité non nulle à température finie $T > T_c$ alors qu'à basse température $T < T_c$, la conductivité reste parfaitement nulle. Cette transition métal/isolant à température finie n'a néanmoins pas été interprétée dans le cadre de la « transition de Kravchenko ».

2.7 Quelques tentatives numériques

Puisqu'il n'existe pas de théorie analytique permettant de traiter le régime de désordre et d'interaction intermédiaires, où les comportements métalliques sont observés, plusieurs auteurs ont tenté d'aborder le problème par des approches numériques. Dans cette partie, nous nous intéressons aux travaux étudiant numériquement les propriétés de localisation de systèmes bidimensionnels désordonnés, en présence d'une interaction répulsive. Nous rappelons que les limites sans interaction [154, 191] et sans désordre [34, 69, 287] ont également fait l'objet de plusieurs études numériques mais nous ne les développerons pas ici car elles ne sont pas pertinentes pour discuter des comportements métalliques observés à deux dimensions.

Il est important de comprendre que s'il est difficile de traiter le problème conjoint désordre / interaction par des outils analytiques, il est aussi difficile de le traiter numériquement. En effet, les corrélations dans le système rendent gigantesque l'espace de Hilbert (sa taille augmente exponentiellement avec la taille L^2 du gaz 2D) ce qui se ressent douloureusement sur le temps de calcul. De plus, la présence du désordre nécessite le plus souvent de moyenniser les différentes quantités physiques sur les configurations du potentiel aléatoire et donc contribue aussi à l'augmentation du temps de calcul. Enfin, il est nécessaire de définir un critère pertinent de localisation pour les électrons et cela n'est pas évident car la notion de localisation dans un système corrélé n'est pas bien définie. Dans les travaux présentés ci-dessous, une multitude de quantités ont été utilisées pour rendre compte des propriétés de localisation du gaz bidimensionnel : statistique des niveaux d'énergie (Wigner-Dyson *vs* Poisson), « inverse

participation ratio», conductance par la formule de Kubo, courant permanent, réponse en densité à une perturbation extérieure, ...

Nous proposons de regrouper les différentes approches numériques du problème conjoint désordre/interaction en trois catégories.

- **Méthode de diagonalisation exacte.** Cette méthode consiste à diagonaliser de manière exacte la matrice hamiltonienne, par l'algorithme Lanczos. Elle est limitée à de tout petits systèmes contenant typiquement 4 voire 6 électrons, et donc ne permet pas de conclure quant aux propriétés du gaz 2D à la limite thermodynamique. Dans [288], X. Waintal *et al* montrent à l'aide de cette méthode, pour des électrons sans spin, que les interactions conduisent à une forte augmentation de l'amplitude des courants permanents, signature d'un effet de délocalisation des électrons. Des résultats similaires ont été obtenus par R. Kotlyar et S. Das Sarma pour des électrons non polarisés [130]. Ils suggèrent l'existence d'une phase métallique stabilisée par les interactions entre l'isolant d'Anderson et le cristal de Wigner, mais encore une fois, les systèmes utilisés sont bien trop petits pour pouvoir conclure. Citons par ailleurs les travaux de R. Berkovits *et al* [32] où les auteurs montrent, toujours par une méthode exacte, un effet de délocalisation par les interactions à courte portée (terme de Hubbard, dominant à haute densité) tandis que les interactions à longue portée (dominant à basse densité) renforcent la localisation des électrons. Leurs calculs conduisent également à une magnétorésistance positive en champ parallèle, qui sature lorsque tous les électrons sont polarisés, en accord avec les résultats expérimentaux (voir 2.4.1). Sans spin, ils trouvent que les interactions renforcent toujours la localisation [33].

- **Méthodes approchées.** Certains auteurs utilisent des techniques de diagonalisation comportant différentes approximations. Par exemple, dans [110, 127], N. Trivedi *et al* étudient l'effet du désordre sur l'isolant de Mott avec une méthode Hartree-Fock auto-cohérente. Ils se ramènent ainsi à un problème à un corps mais, en contrepartie, manquent une contribution importante des interactions. Leurs résultats suggèrent l'apparition d'une phase métallique entre l'isolant de Mott à faible désordre et une phase localisée à fort désordre. D'autres méthodes, plus perfectionnées, procèdent par une diagonalisation du Hamiltonien dans une base d'orbitales à un corps préalablement calculées dans l'approximation Hartree Fock, puis tronquée en ne gardant que les orbitales de plus basse énergie (« Configuration Interaction Method»). Ces méthodes ont été utilisées par exemple dans [244, 283, 284] où une fois encore, un effet de délocalisation par les interactions est trouvé. Citons aussi le travail de Y. Song *et al* où le modèle de Hubbard désordonné à 2D est étudié par une approche DMFT [255].

- **Méthodes Monte Carlo.** Ces méthodes permettent le traitement de systèmes corrélés beaucoup plus grands que ceux étudiés à l'aide des méthodes précédentes, et avec plus de particules. Elles sont en principe exactes mais il faut parfois utiliser des approximations (approximation fixed node) pour réduire les erreurs statistiques (dûes au problème de signe)⁷. Grâce à la méthode exacte PQMC (Projector Quantum Monte Carlo), B. Srinivasan *et al* ont montré dans [261] que les interactions de Hubbard délocalisent fortement les électrons du gaz 2D désordonné, sans pour autant se prononcer sur l'existence d'une vraie phase métallique à la limite thermodynamique. P. Denteneer *et al* ont également étudié le modèle de Hubbard désordonné à 2D par une autre méthode exacte dite DQMC (Determinant Quantum Monte Carlo). Leur calcul conduit à un comportement métallique de la conductance, induit par les interactions et qui disparaît à fort champ magnétique parallèle [52, 63, 62]. Cependant, ces

⁷C'est ce type de méthodes que nous avons utilisé pendant cette thèse.

calculs ont été réalisés à température finie, sans pouvoir atteindre l'état fondamental du système.

On retiendra ainsi que la majorité des travaux numériques montrent un effet de délocalisation des électrons par les interactions. Il faut toutefois rester prudent face à ces résultats car la plupart ont été obtenus avec très peu de particules et de petits systèmes, si bien qu'ils ne correspondent peut-être qu'à des effets de taille finie. On montrera par exemple au §6.1 qu'à la limite thermodynamique, les interactions localisent les électrons polarisés, contrairement à ce qui a été prédit dans [284, 288] avec seulement 4 et 8 particules. Précisons également que la plupart des travaux mentionnés ci-dessus [52, 63, 62, 110, 127, 130, 255, 261] étudient le modèle de Hubbard désordonné à demi-remplissage (ou du moins à haute densité) alors que dans les expériences discutées dans ce chapitre, la densité de porteurs est extrêmement basse et l'interaction a une composante à longue portée.

Dans le prochain chapitre, nous introduisons le modèle que nous avons utilisé tout au long de cette thèse pour explorer les effets des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson, en dimension deux. Nous pensons qu'il contient les ingrédients essentiels à la discussion des comportements métalliques, observés expérimentalement mais toujours inexplicables d'un point de vue théorique.

Chapitre 3

Notre modèle : généralisation à N corps du modèle d'Anderson

Sommaire

| | |
|--|-----------|
| Résumé du chapitre 3 | 76 |
| 3.1 Définition du réseau | 77 |
| 3.2 Hamiltonien du modèle en seconde quantification | 78 |
| 3.3 Correspondance entre les modèles discret et continu | 80 |
| 3.3.1 Calcul de l'énergie de Fermi E_F | 80 |
| 3.3.2 Calcul du paramètre de désordre $k_F l$ | 81 |
| 3.3.3 Calcul du paramètre d'interaction r_s | 82 |
| 3.4 Effets de taille finie | 82 |
| 3.4.1 Effets de ν fini et limite continue | 83 |
| 3.4.2 Effets de N fini et limite thermodynamique | 83 |

Résumé du chapitre 3

Le modèle utilisé dans cette thèse est une généralisation à N corps du modèle d'Anderson. Il doit être compris comme une discrétisation, à des fins pratiques (en l'occurrence numériques), du modèle continu (1.1) introduit au premier chapitre. Nous pensons qu'il contient les ingrédients essentiels à la discussion des comportements métalliques observés expérimentalement (désordre, interaction coulombienne, spin, vallée).

Notre système est constitué de N électrons sur un réseau bidimensionnel rectangulaire de $L_x \times L_y$ sites, avec conditions aux limites périodiques. Chaque électron possède un degré de liberté interne σ , correspondant au spin électronique $1/2$ et à la possibilité pour l'électron d'occuper deux vallées différentes. Le Hamiltonien de notre modèle s'écrit :

$$H = -t \sum_{\langle \vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma \rangle} c_{\vec{r}\sigma}^\dagger c_{\vec{r}'\sigma} + \sum_{\vec{r}\sigma} v_{\vec{r}} n_{\vec{r}\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\vec{r}\sigma \neq \vec{r}'\sigma'} V_{\vec{r}-\vec{r}'} n_{\vec{r}\sigma} n_{\vec{r}'\sigma'} + \lambda ,$$

où $c_{\vec{r}\sigma}^\dagger$ et $c_{\vec{r}\sigma}$ sont les opérateurs usuels de création et d'annihilation d'un électron au site \vec{r} de pseudo-spin σ et $n_{\vec{r}\sigma} = c_{\vec{r}\sigma}^\dagger c_{\vec{r}\sigma}$. Le premier terme (cinétique) est un terme de saut entre proches voisins, d'amplitude t qui sera prise comme unité d'énergie ($t = 1$). Le second terme correspond au désordre (d'Anderson). Le potentiel aléatoire $v_{\vec{r}}$ est uniformément distribué dans l'intervalle $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$ où W est l'amplitude du désordre. Enfin, le dernier terme est celui de répulsion coulombienne. Le paramètre U caractérise son amplitude. Pour réduire les effets de taille finie, le potentiel $V_{\vec{r}}$ est calculé par la technique de la sommation d'Ewald à partir du potentiel coulombien. λ est une constante.

La limite continue est atteinte à faible remplissage $\nu \equiv N/L_x L_y \ll 1$. Le système thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) est alors entièrement paramétrisé par les paramètres d'interaction r_s et de désordre $k_F l$ qui s'écrivent en fonction des paramètres du modèle discret (voir §3.3) :

$$r_s = \frac{U}{2t\sqrt{\pi\nu}} \quad \text{et} \quad k_F l = 192\pi \frac{\nu t^2}{MW^2} ,$$

où M est la dégénérescence de pseudo-spin. En pratique, la limite thermodynamique sera prise en augmentant N à ν fixé et les paramètres r_s et $k_F l$ seront modifiés par l'intermédiaire de U et W . Il sera essentiel de contrôler les effets de taille finie en N et ν afin de s'assurer que l'on décrit bien, avec notre modèle discret, la physique du problème continu à la limite thermodynamique (voir §3.4).

Dans ce chapitre, nous présentons le modèle que nous avons utilisé tout au long de la thèse pour étudier l'effet des interactions électron-électron sur la localisation d'Anderson et discuter les comportements métalliques observés dans divers échantillons bidimensionnels. Ce modèle peut être vu comme une généralisation à N -corps du modèle d'Anderson, introduit en 1958 par ce dernier pour étudier la localisation [14]. On considère N électrons sur un réseau bidimensionnel périodique. Les électrons interagissent (à longue distance) via la répulsion coulombienne, et le désordre, défini en chaque site du réseau, est supposé borné et blanc (sans corrélation spatiale). Les degrés de liberté de spin et de vallée sont pris en compte et traités formellement de la même manière, comme une « couleur » pour l'électron. L'analyse faite au chapitre 2 nous conforte dans l'idée que ce modèle contient l'essentiel des ingrédients à l'origine des comportements métalliques observés expérimentalement.

Nous commençons par définir le réseau et le Hamiltonien du modèle. Puis nous établissons la correspondance entre ce modèle discret et le modèle continu introduit au §1.1. En particulier, nous calculons les paramètres d'interaction r_s et de désordre $k_F l$ et montrons que ceux-ci sont indépendants de la discrétisation du système. Enfin, nous discutons des effets de taille finie, qu'il faut absolument surmonter pour recouvrir les limites continue et thermodynamique.

3.1 Définition du réseau

Le réseau correspond à une discrétisation de l'espace des positions. Il a pour maille élémentaire un carré de côté b (que l'on prendra égal à 1) et est constitué de $V = L_x \times L_y$ sites. Chaque site est repéré par un vecteur $\vec{r} = (x, y)$ où x et y sont des entiers tels que $0 \leq x \leq L_x - 1$ et $0 \leq y \leq L_y - 1$. On dispose sur ce réseau N électrons. Chaque électron a un spin up ou down et est situé dans la vallée¹ a ou b . Formellement, les degrés de liberté de spin et de vallée sont traités par un même degré de liberté électronique interne σ pouvant prendre quatre valeurs (par exemple 1, 2, 3 et 4). D'après le principe de Pauli, deux électrons ayant le même pseudo-spin σ ne peuvent occuper le même site.

Les paramètres N , L_x et L_y définissent un facteur de remplissage $\nu = \frac{N}{L_x L_y}$, sans dimension. Sur la figure 3.1, nous avons représenté un exemple de réseau avec une configuration donnée d'électrons.

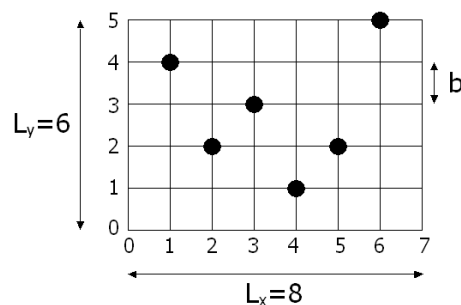


FIG. 3.1 – Réseau carré 8×6 contenant $N = 6$ électrons. Le facteur de remplissage ν vaut $\frac{1}{8}$. La maille élémentaire est de longueur b . Les points \bullet représentent une configuration électronique donnée.

¹Nous rappelons que la dégénérescence de vallée correspond à une dégénérescence de la structure de bande. Dans les hétérostructures semiconductrices, tous les électrons sont dans une même vallée. En revanche, dans les Si-MOSFETs, ils sont répartis entre deux vallées (quasi-)dégénérées (voir le §2.1).

Pour limiter les effets de taille finie, nous choisissons comme conditions aux bords, des conditions périodiques. Il faut donc concevoir notre réseau comme étant replié sur lui-même pour former un tore. La distance r_{ij} entre deux sites i et j est définie par :

$$r_{ij} = \sqrt{\min[(x_j - x_i)^2, (L_x - x_j + x_i)^2] + \min[(y_j - y_i)^2, (L_y - y_j + y_i)^2]} . \quad (3.1)$$

3.2 Hamiltonien du modèle en seconde quantification

Le Hamiltonien H de notre modèle s'écrit en seconde quantification :

$$H = -t \sum_{\langle \vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma \rangle} c_{\vec{r}\sigma}^\dagger c_{\vec{r}'\sigma} + \sum_{\vec{r}\sigma} v_{\vec{r}} n_{\vec{r}\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\vec{r}\sigma \neq \vec{r}'\sigma'} V_{\vec{r}-\vec{r}'} n_{\vec{r}\sigma} n_{\vec{r}'\sigma'} + \lambda , \quad (3.2)$$

où $c_{\vec{r}\sigma}^\dagger$ et $c_{\vec{r}\sigma}$ sont respectivement les opérateurs usuels de création et d'annihilation d'un électron au site \vec{r} de pseudo-spin σ , $n_{\vec{r}\sigma} = c_{\vec{r}\sigma}^\dagger c_{\vec{r}\sigma}$ est l'opérateur « nombre de particules » et la somme $\sum_{\langle \vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma \rangle}$ est restreinte aux sites proches voisins. Explicitons le sens physique des différents termes de H et précisons ainsi nos notations.

Limite sans interaction ($U = 0$) : modèle d'Anderson

Les deux premiers termes du Hamiltonien H sont ceux donnés par le modèle d'Anderson [14], utilisé maintes et maintes fois dans la littérature pour étudier la localisation.

- Le premier terme $-t \sum_{\langle \vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma \rangle} c_{\vec{r}\sigma}^\dagger c_{\vec{r}'\sigma}$ correspond à l'énergie cinétique, t étant le coût énergétique d'un saut entre proches voisins.

- Le second terme $\sum_{\vec{r}\sigma} v_{\vec{r}} n_{\vec{r}\sigma}$ correspond au potentiel désordonné dans lequel les N électrons sont plongés. Les variables aléatoires $v_{\vec{r}}$ sont indépendantes et uniformément distribuées dans l'intervalle $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$, où W s'interprète comme l'amplitude du désordre. On vérifie facilement que l'on a :

$$\overline{v_{\vec{r}}} = 0 \quad \text{et} \quad \overline{v_{\vec{r}} v_{\vec{r}'}} = \frac{W^2}{12} \delta_{\vec{r}\vec{r}'} , \quad (3.3)$$

où $\bar{\cdot}$ désigne la moyenne sur les configurations du potentiel aléatoire et $\delta_{\vec{r}\vec{r}'}$ est le symbole de Kronecker. Remarquons que l'un des avantages à travailler sur un réseau discret est de pouvoir modéliser ainsi facilement le potentiel désordonné. Toutefois, ce modèle ne permet pas d'étudier l'effet d'un potentiel de désordre à longue portée.

Terme d'interaction coulombienne par la technique de la sommation d'Ewald

Le dernier terme de H , $\frac{U}{2} \sum_{\vec{r}\sigma \neq \vec{r}'\sigma'} V_{\vec{r}-\vec{r}'} n_{\vec{r}\sigma} n_{\vec{r}'\sigma'} + \lambda$, est le Hamiltonien d'interaction coulombienne entre les électrons. Le paramètre U caractérise la force du couplage électrostatique $V_{\vec{r}}$. Pour réduire les effets de taille finie, $V_{\vec{r}}$ est calculé par la technique de la sommation d'Ewald [78] à partir du potentiel coulombien. Cette technique est un classique des simulations de dynamique moléculaire que nous ne développerons pas dans ce manuscrit. En quelques mots, l'idée est d'exploiter les conditions aux limites périodiques. Partant du système de N

électrons (cellule de base), on crée par la pensée des répliques de ce système (cellules images) en le répétant une infinité de fois dans toutes les directions de l'espace. Puis, au lieu de calculer uniquement le terme d'interaction (coulombienne ici) entre deux particules i et j dans la cellule de base, on calcule l'interaction de la particule i avec la particule j dans la même cellule de base, mais aussi avec toutes les images de la particule j dans les cellules images. Ainsi $V_{\vec{r}}$ correspond à l'énergie d'interaction coulombienne d'un électron avec un ensemble infini de charges, ce qui, on le conçoit, réduit considérablement les effets de taille finie pour l'interaction. De plus, pour assurer la neutralité électrique (et ainsi empêcher l'énergie du système infini de diverger), le système est placé dans un fond de charges positives de densité uniforme ν , à l'origine de la constante λ . Le lecteur pourra trouver dans la thèse de H. Falakshahi [80] le calcul détaillé (simple mais long ...) menant à l'expression du potentiel d'Ewald pour l'interaction coulombienne. Nous rappelons uniquement ici le résultat :

$$V_{\vec{r}} = \sum_{\vec{L}} \frac{1}{|\vec{r} + \vec{L}|} \text{Erfc}(k_c |\vec{r} + \vec{L}|) + \frac{2\pi}{L_x L_y} \sum_{\vec{K} \neq \vec{0}} \frac{1}{|\vec{K}|} \text{Erfc} \left(\frac{|\vec{K}|}{2k_c} \right) \cdot \cos(\vec{K} \vec{r}). \quad (3.4)$$

Dans cette équation, k_c est un « cut-off » sans influence, \vec{L} prend les valeurs discrètes $\vec{L} = (n_x L_x, n_y L_y)$ où n_x et n_y sont des entiers, et \vec{K} prend aussi des valeurs discrètes, $\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y \right)$ avec $(n_x, n_y) \neq (0, 0)$. La fonction $\text{Erfc}(x)$ désigne quant à elle la fonction d'erreur complémentaire : $\text{Erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$. Enfin, le paramètre λ assurant la neutralité électrique s'écrit :

$$\lambda/N = 4t + U\tilde{V}_0 - 2U\nu\sqrt{\pi}/k_c - 2Uk_c/\sqrt{\pi}, \quad (3.5)$$

où $\tilde{V}_{\vec{r}} = V_{\vec{r}}$ mis à part que la somme sur \vec{L} exclue le vecteur nul. La contribution constante $4t$ est en réalité d'origine différente. Elle permet de faire coïncider les énergies cinétiques des modèles discret (3.2) et continu (1.1), à la limite continue $b \rightarrow 0$ (voir §3.3). On l'intègre ici à la constante λ par commodité.

Pour finir, il est important de noter que le Hamiltonien (3.2) ne couple les différents pseudo-spins σ que par le terme d'interaction coulombienne. Cela signifie qu'un électron garde son pseudo-spin fixé. Notre modèle ne prend donc pas en compte le cas d'impuretés magnétiques pouvant modifier les spins électroniques ou les divers mécanismes de diffusion entre les vallées (par exemple, par l'interaction spin-orbite ou la présence d'un désordre fluctuant suffisamment vite spatialement pour que son vecteur d'onde caractéristique k soit suffisamment grand pour coupler les deux vallées centrées autour de $-k/2$ et $k/2$). Notre modèle ne décrit pas non plus d'éventuelles corrélations à longue portée du désordre, il ne tient pas compte de l'épaisseur finie du gaz 2D et néglige entièrement l'effet des phonons. Il faut donc le voir comme un modèle « minimal » contenant les ingrédients de base, non controversés, des échantillons bidimensionnels « métalliques ». Au chapitre 7, nous montrerons que ces ingrédients nécessaires sont également suffisants pour expliquer les comportements métalliques.

3.3 Correspondance entre les modèles discret et continu

Nous utilisons le modèle discret présenté ci-dessus pour des raisons numériques² mais l'objectif est bien de décrire les propriétés du gaz d'électrons à la limite continue $b \rightarrow 0$. En particulier, on ne cherchera pas à établir une correspondance entre le réseau de notre modèle et le réseau physique sous-jacent des hétérostructures semi-conductrices où chaque site correspond à une orbitale atomique. Cela serait théoriquement possible mais il faudrait étudier des systèmes ayant un facteur de remplissage très faible $\nu \approx 10^{-4} - 10^{-2}$ puisque les densités électroniques de ces échantillons sont de l'ordre de $n_s \approx 10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ et la distance entre atomes de l'ordre de quelques Angströms. Or en pratique, on verra que l'on utilisera des ν de l'ordre de $1/25$. Par conséquent, notre modèle discret ne doit pas être compris ici comme une approche « liaison forte » mais comme une simple discrétisation du modèle continu dont nous rappelons le Hamiltonien (1.1) introduit au premier chapitre :

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{i=1}^N v(\vec{r}_i) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|},$$

où $v(\vec{r})$ est un potentiel aléatoire. On vérifie en effet que si l'on discrétise ce Hamiltonien sur un réseau de pas b , via le changement de variable $\vec{r}' = \vec{r}/b$ et la discrétisation du laplacien, on obtient le Hamiltonien discret (3.2) (où $V_{\vec{r}}$ est pris égal au potentiel coulombien en $1/r$, le choix du potentiel d'Ewald étant uniquement une astuce de calcul) en utilisant la correspondance suivante entre les modèles discret et continu :

$$\boxed{n_s \leftrightarrow \frac{\nu}{b^2}, \quad \frac{\hbar^2}{2mb^2} \leftrightarrow t \quad \text{et} \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon b} \leftrightarrow U}. \quad (3.6)$$

Pour ce qui est du désordre, la discrétisation du problème continu passe par l'introduction d'une longueur de corrélation du désordre, de l'ordre du pas du réseau b . Nous verrons au §7.1.3 que celle-ci peut se manifester dans notre modèle discret via le facteur de remplissage ν : on montrera en l'occurrence que l'énergie E de notre modèle dépend de ν c'est-à-dire, en quelque sorte, de la finesse de la discrétisation du problème continu. Toutefois, le paramètre $k_F l$ caractérisant le désordre peut être calculé directement à partir du modèle discret et l'on trouve qu'il est indépendant du choix du pas du réseau b . Ce calcul est explicité dans la suite. Nous calculons également, en fonction des paramètres de notre modèle discret, les autres paramètres physiques du modèle continu, à savoir le paramètre d'interaction r_s et l'énergie de Fermi E_F . Nous montrons notamment que ceux-ci sont aussi indépendants de la discrétisation du système, ce qui valide l'utilisation de notre modèle.

3.3.1 Calcul de l'énergie de Fermi E_F

Le Hamiltonien cinétique $-t \sum_{\langle \vec{r}_\sigma, \vec{r}'_\sigma \rangle} c_{\vec{r}_\sigma}^\dagger c_{\vec{r}'_\sigma}$ se diagonalise dans l'espace des k et l'on trouve que son spectre est donné par :

$$E(k_x, k_y) = -2t(\cos k_x b + \cos k_y b),$$

²La première a déjà été signalée et est liée à la difficulté de modéliser à des fins numériques le désordre dans le continu. La seconde est due à l'implémentation de notre code Monte Carlo que l'on présentera au chapitre 4 : nous avons choisi de travailler dans un espace discrétisé mais en temps (imaginaire) continu. A l'inverse, d'autres ont choisi de travailler dans un espace continu, en discrétisant le temps. Sans désordre, les deux approches sont équivalentes.

avec $k_x = \frac{2\pi}{bL_x}n_x, n_x \in \{0, \dots, L_x - 1\}$ (et idem pour k_y). Chaque niveau est dégénéré M fois si M est la dégénérescence de pseudo-spin σ (par exemple, $M = 4$ pour des électrons non polarisés dans deux vallées). A faible remplissage $\nu \ll 1$:

$$E = -4t + tb^2k^2 \quad (k^2 = k_x^2 + k_y^2), \quad (3.7)$$

la constante $4t$ étant ensuite absorbée dans la constante λ du Hamiltonien (3.2) pour que l'énergie cinétique du modèle discret coïncide avec celle du modèle continu $\hbar^2k^2/2m = tb^2k^2$. On en déduit la densité d'état totale $\rho(E)$ par :

$$\rho(E)dE = \frac{2\pi k dk}{\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2 \frac{1}{L_x L_y}} \times M,$$

d'où :

$$\rho(E) = M \frac{L_x L_y b^2}{2\pi} k \frac{dk}{dE} = M \frac{L_x L_y}{4\pi t}. \quad (3.8)$$

L'énergie de Fermi E_F est ensuite donnée via la relation :

$$\nu = \frac{N}{L_x L_y} = \frac{\int_0^{E_F} \rho(E) dE}{L_x L_y} = \frac{M E_F}{4t},$$

d'où :

$$\boxed{E_F = \frac{4\pi\nu t}{M}}. \quad (3.9)$$

3.3.2 Calcul du paramètre de désordre $k_F l$

Rappelons que $k_F l$ est un paramètre dans lequel l'interaction n'intervient pas. Dans le raisonnement qui suit, on fait donc $U = 0$ dans le Hamiltonien (3.2). Le pseudo-spin se ramène alors seulement à un facteur de dégénérescence M .

Pour calculer le libre parcours moyen élastique l , on utilise la règle d'or de Fermi donnant le temps de vie τ des ondes planes $|k\rangle$ (fonctions propres du Hamiltonien cinétique) quand on branche le désordre $v = \sum_{\vec{r}} v_{\vec{r}} n_{\vec{r}}$:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|\langle k|v|k'\rangle|^2} \rho(E).$$

Ici $\rho(E)$ est la densité d'état donnée par (3.8) et $\overline{|\langle k|v|k'\rangle|^2}$ est l'élément de matrice du potentiel aléatoire couplant deux ondes planes $|k\rangle$ et $|k'\rangle$, moyenné sur le désordre. D'après (3.3), on a :

$$\overline{|\langle k|v|k'\rangle|^2} = \frac{W^2}{12L_x L_y},$$

ce qui conduit à :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{W^2}{24t\hbar}.$$

l se déduit par $l = v_F \tau$ où v_F est la vitesse de Fermi :

$$v_F = \left. \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \right|_{k_F} = \frac{2b^2 t k_F}{\hbar} \quad \text{d'après (3.7)},$$

d'où finalement :

$$l = v_F \tau = \frac{48b^2 t^2 k_F}{W^2} .$$

Par ailleurs, le vecteur d'onde de Fermi k_F est donné par les équations (3.7) et (3.9) :

$$k_F = \frac{1}{b} \sqrt{\frac{4\pi\nu}{M}} .$$

Ainsi le paramètre $k_F l$ s'écrit en fonction des paramètres du modèle discret selon :

$$\boxed{k_F l = 192\pi \frac{\nu t^2}{M W^2}} . \quad (3.10)$$

Précisons que cette formule n'est rigoureusement valable que dans le régime diffusif de faible désordre ($k_F l \gg 1$) puisque celui-ci a été traité ici comme une petite perturbation. On peut toutefois l'utiliser généralement comme définition du paramètre de mesure du désordre, adimensionné et indépendant de la discrétisation b .

3.3.3 Calcul du paramètre d'interaction r_s

L'expression (1.4) de r_s dans le continu et les règles de correspondance (3.6) permettent d'écrire directement r_s en fonction des paramètres du modèle discret selon :

$$\boxed{r_s = \frac{U}{2t\sqrt{\pi\nu}}} . \quad (3.11)$$

Le paramètre r_s est donc trouvé indépendant du pas du réseau b : il ne dépend pas de la discrétisation du système, tout comme $k_F l$ et E_F .

Les calculs ci-dessus nous donnent r_s , $k_F l$ et E_F en fonction des paramètres du modèle discret ν , W/t et U/t (t est pris comme unité d'énergie et on posera $t = 1$). Il est important de comprendre que numériquement, dans la suite, la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$ sera étudiée à remplissage ν fixé, c'est-à-dire en gardant constante la distance moyenne entre particules ou encore en fixant le niveau de Fermi. Le paramètre d'interaction r_s sera varié par l'intermédiaire de U , en « allumant » la charge de l'électron e . Quant au paramètre $k_F l$, il sera modifié en changeant l'amplitude W du désordre. Au contraire, dans les expériences, c'est par l'intermédiaire de la densité électronique n_s que les paramètres r_s et $k_F l$ sont modifiés et la limite thermodynamique est recherchée en abaissant la température.

3.4 Effets de taille finie

Dans cette partie, nous discutons des effets de taille finie en N et ν dont il faut s'affranchir pour décrire, à l'aide de notre modèle, le gaz d'électrons dans le continu, à la limite thermodynamique. L'étude présentée ici ne se prétend pas complète. Son objectif est seulement de mettre en garde le lecteur sur l'existence de ces effets de taille finie et d'expliquer leur origine par une analyse simple de la forme de la surface de Fermi. Nous reviendrons en détail sur ces effets au fur et à mesure que nous présenterons nos résultats aux chapitres 6 et 7.

3.4.1 Effets de ν fini et limite continue

La présence d'un réseau sous-jacent dans notre modèle induit une correction en ν (facteur de remplissage) des différents observables dont il faut s'affranchir pour retrouver la limite continue. Par exemple, comme nous l'avons déjà vu au §3.3, l'énergie cinétique du modèle discret est en cosinus et ne coïncide avec celle du modèle continu, quadratique, qu'à faible remplissage :

$$E(k_x, k_y) = -2t(\cos k_x b + \cos k_y b) \underset{\nu \ll 1}{\approx} -4t + tb^2 k^2 .$$

Cette différence entre les énergies cinétiques des modèles discret et continu est illustrée sur la figure 3.2. On comprend qu'en travaillant avec le modèle discret à ν suffisamment faible (c'est-à-dire en bord de bande), on peut recouvrer la limite continue mais alors la taille du système doit être prise très grande (pour que ν soit petit tout en gardant N grand) et le temps de calcul risque de devenir excessif. Un compromis doit donc être trouvé selon la précision désirée. Il est évident que l'énergie cinétique n'est pas la seule quantité touchée par les effets de réseau. Dans la suite, une attention particulière sera accordée à leur étude afin de s'assurer que nos résultats sont bien valables à la limite continue. Typiquement, on utilisera des facteurs de remplissage de l'ordre de $\nu \approx 1/25$.

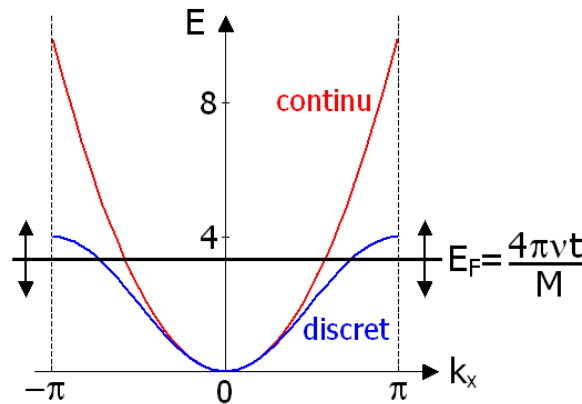


FIG. 3.2 – *Energie cinétique* $E(k_x, k_y = 0)$ (décalée de $+4t$) en fonction de k_x dans le plan $k_y = 0$, pour le modèle continu en rouge ($E = tb^2 k_x^2$) et le modèle discret en bleu ($E = 2t(1 - \cos(k_x b))$), avec $t = b = 1$. Le niveau de Fermi E_F est indiqué par la droite horizontale. A faible remplissage ν , les modèles discret et continu coïncident.

3.4.2 Effets de N fini et limite thermodynamique

L'une des principales difficultés des simulations numériques de systèmes corrélés est de pouvoir atteindre la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$. En effet, le nombre N de particules est limité en pratique par le temps de calcul (à quelques particules pour les méthodes de diagonalisation exacte jusqu'à quelques dizaines pour les méthodes Monte Carlo Quantiques). Il apparaît donc essentiel de contrôler au mieux les effets de N -fini.

L'une des causes des effets de N -fini est la longue portée de l'interaction coulombienne. Comme nous l'avons vu au §3.2, elle peut être considérablement réduite en utilisant des conditions aux limites périodiques et la technique de la sommation d'Ewald pour l'interaction.

La forme de la surface de Fermi est aussi à l'origine d'effets de taille finie en N . Ce point est illustré sur la figure 3.3 où nous avons tracé l'énergie cinétique exacte $E = \sum_{S_{Fermi}} [4t -$

$2t(\cos k_x b + \cos k_y b)$ en fonction du nombre de particules N pour un système de taille fixée 1000×1000 (de sorte que ν soit suffisamment petit pour retrouver la limite continue $\nu \ll 1$). Cette énergie est donnée ici pour un système sans spin (le spin se ramenant à un facteur de dégénérescence) et est exprimée en unité de $2N\pi\nu t$ qui est l'énergie cinétique du système continu à la limite thermodynamique³. On constate sur cette figure que l'énergie cinétique E oscille fortement à petits N avant de saturer à $1[2N\pi\nu t]$, comme attendu à la limite thermodynamique. Les minima de ces oscillations correspondent à des valeurs de N , dits nombres magiques, pour lesquelles les couches d'égaux énergies sont entièrement remplies : $N = 9, 13, 21, 29, 37, 45, \dots$ (à multiplier par la dégénérescence de spin). En présence d'interaction, l'énergie totale du système a le même type de structure oscillante avec N , qui s'interprète de la même manière tant que l'on peut encore parler de surface de Fermi, et qui est très bien compris analytiquement avec seulement un paramètre ajustable (voir la figure 12 de [287]).

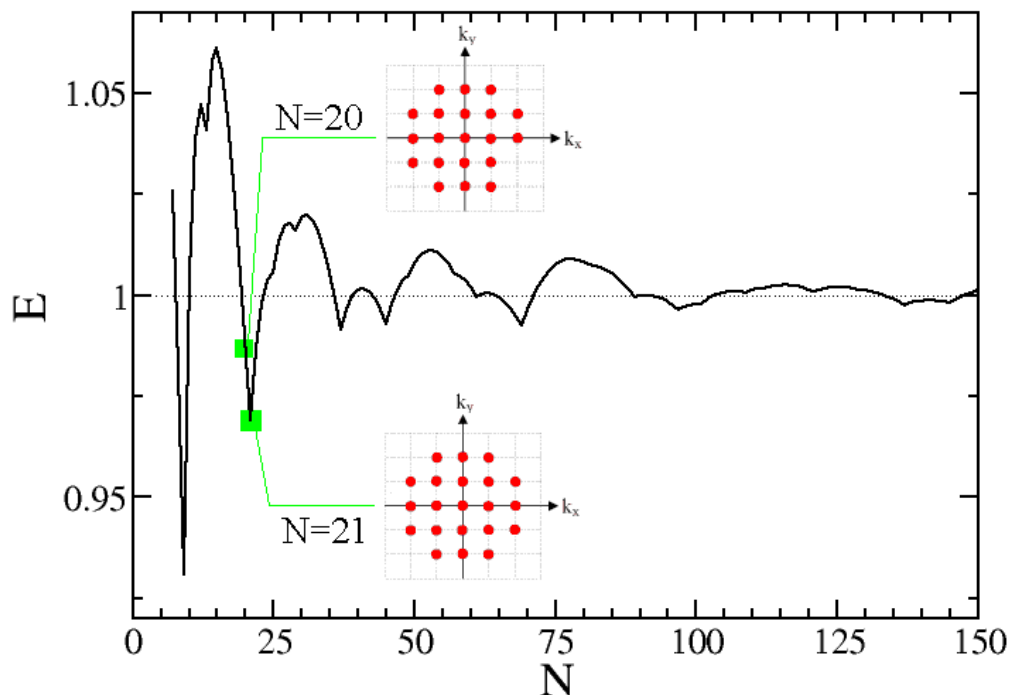


FIG. 3.3 – *Energie cinétique E (en unité de $2N\pi\nu t$) en fonction du nombre N de particules, pour un système de 1000×1000 sites (avec $t = b = 1$). Les effets de taille finie en N sont dus à la forme de la surface de Fermi. Lorsqu'une couche iso-énergétique est remplie, l'énergie atteint un minimum, comme cela est représenté pour $N = 21$. Plus N est grand, plus la surface de Fermi se rapproche d'un disque et l'énergie cinétique, de 1, la limite thermodynamique continue.*

Très souvent, les quelques dizaines de particules pouvant être simulées en Monte Carlo Quantique se sont avérées suffisantes pour atteindre la limite thermodynamique. Ceci explique le succès de ces méthodes qui ont ainsi permis de décrire une large classe de systèmes à N corps. Par exemple, dans [49], D. Ceperley rend compte quantitativement du diagramme de phase expérimental de l'Hélium 4 avec seulement $N = 64$ particules. De même, l'énergie de corrélation du gaz d'électrons, à la base de la plupart des calculs *ab initio*, a été calculée dans [51] avec $N = 56$ électrons. En outre, ces travaux ont tous été effectués sans désordre.

³Elle est donnée par $\int_0^{E_F} \rho(E) E dE$ que l'on calcule facilement à l'aide des équations (3.8) et (3.9).

Or, on verra au §5.3.2 que la présence d'un désordre diminue considérablement les effets de N -fini, en « brouillant » la surface de Fermi. Ainsi, on montrera que seulement $N = 16$ particules (par composante de spin) suffisent pour décrire les propriétés de localisation du gaz bidimensionnel d'électrons désordonné à la limite thermodynamique.

Dans le chapitre 4, nous présentons les différentes méthodes Monte Carlo Quantique que nous avons utilisées pour analyser le fondamental de notre modèle à température nulle. Ce chapitre technique a été pensé de sorte à être lisible indépendamment des autres. On pourra se contenter de la lecture de son résumé, sans compromettre la compréhension des chapitres suivants.

Chapitre 4

Méthodes Monte Carlo Quantique à température nulle

Sommaire

| | |
|--|------------|
| Résumé du chapitre 4 | 88 |
| 4.1 Vers une méthode stochastique | 89 |
| 4.1.1 Rappels de probabilité : processus de Markov et matrice stochastique | 90 |
| 4.1.2 Principe des méthodes Monte Carlo Quantique | 92 |
| 4.2 Première approche variationnelle : VMC | 94 |
| 4.2.1 Calcul d'intégrales en Monte Carlo et algorithme Metropolis | 94 |
| 4.2.2 Application au calcul d'observables quantiques | 96 |
| 4.2.3 Intermède technique : algorithme « update » pour le calcul des déter- minants | 98 |
| 4.3 Approche en terme d'équation différentielle : GFMC | 99 |
| 4.3.1 Description de l'algorithme GFMC | 99 |
| 4.3.2 Calcul d'observables en GFMC | 103 |
| 4.3.3 Problème de signe et approximation Fixed Node | 106 |
| 4.3.4 Limites du GFMC | 107 |
| 4.4 Approche en terme d'intégrale de chemin : RQMC | 108 |
| 4.4.1 Principe du RQMC et comparaison avec le GFMC | 108 |
| 4.4.2 Algorithme utilisé pour l'échantillonnage des chemins | 111 |
| 4.4.3 Calcul d'observables en RQMC | 112 |
| 4.4.4 Limites du RQMC | 115 |

Résumé du chapitre 4

Nous présentons dans ce chapitre les méthodes Monte Carlo Quantique (QMC) que nous avons utilisées pour déterminer le fondamental Ψ^0 de notre Hamiltonien H à température nulle, ou plutôt divers observables dans cet état fondamental. Ces méthodes sont particulièrement adaptées pour traiter du problème à N -corps, lorsque les techniques de diagonalisation exacte, limitées à de petits systèmes, ne permettent plus de le faire. L'idée est d'exploiter l'analogie entre l'équation de Schrödinger en temps imaginaire $-\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial\beta} = H|\Psi\rangle$ et l'équation de diffusion car celle-ci peut être résolue numériquement en faisant évoluer des marcheurs selon un processus de Markov dont l'équation maîtresse coïncide avec cette équation de diffusion (§4.1).

Au début de la simulation, on se donne explicitement une fonction d'onde Ψ^G (appelée fonction guide), choisie la plus proche possible du fondamental Ψ^0 . Pour ce faire, on utilise l'algorithme Monte Carlo Variationnel (§4.2). Celui-ci permet de calculer entre autres l'énergie de n'importe quel état Ψ^G , qui s'écrit formellement comme une intégrale à $2N$ dimensions pour N particules à 2D, en exploitant une méthode d'intégration stochastique basée sur l'algorithme Metropolis. De cette manière, on peut facilement déterminer la fonction d'onde de plus basse énergie parmi une famille de fonctions d'onde testée et ainsi optimiser la fonction guide Ψ^G .

On projète ensuite cette fonction guide sur le fondamental exact (aux barres d'erreur statistiques près), en utilisant un processus stochastique. Deux méthodes duales sont présentées dans ce chapitre. La première est la méthode Green Function Monte Carlo (GFMC), qui est l'analogue sur réseau de la méthode Diffusion Monte Carlo (§4.3). C'est avec celle-ci que nous avons obtenu tous les résultats présentés dans cette thèse. Elle consiste à appliquer directement l'opérateur d'évolution $e^{-\beta H}$ sur Ψ^G (qui fournit Ψ^0 à grand β), en construisant une chaîne de Markov. Comme en présence de corrélations électroniques, la matrice $e^{-\beta H}$ ne définit pas en soi un processus stochastique, on fait diffuser M marcheurs dans l'espace de Hilbert et on corrige leur mouvement en les affublant d'un poids (un réel), modifié au cours de la marche. La seconde méthode est la méthode Reptation Quantum Monte Carlo (RQMC). Celle-ci exploite le formalisme d'intégrales de chemin pour résoudre l'équation de Schrödinger (§4.4). En pratique, nous nous en sommes servis pour calculer des quantités dynamiques, comme des fonctions de réponse, ce que permet difficilement le GFMC. Ajoutons que les deux méthodes (GFMC ou RQMC) utilisent le procédé d'« Importance Sampling » pour favoriser l'exploration des zones de l'espace de Hilbert où Ψ^G (proche de Ψ^0) est grand, de façon à ne pas perdre de temps à explorer des zones où on s'attend à ce que Ψ^0 soit petit.

Pour éviter le fameux problème de signe qui, pour des systèmes fermioniques, réduit drastiquement le rapport signal sur bruit des simulations, on introduit dans nos deux algorithmes une approximation, appelée approximation Fixed Node (§4.3.3). Celle-ci contraint le signe de la fonction d'onde (structure nodale) à être toujours identique, au cours de la projection, à celui de la fonction guide de départ. Ainsi, les algorithmes fournissent la meilleure fonction d'onde Ψ_0^{FN} de même structure nodale que Ψ^G et deviennent en ce sens variationnels.

De nombreuses méthodes numériques ont été proposées pour résoudre le problème à N -corps. La plus simple consiste à diagonaliser, de manière exacte, la matrice Hamiltonienne mais elle se limite malheureusement à l'étude de petits systèmes. Ainsi, des méthodes approximatives traitant le problème en champ moyen ont été développées, dans le cadre par exemple de la théorie Hartree-Fock [262] ou de la théorie de la fonctionnelle de la densité [186]. Appliquées à notre système d'étude, elles n'ont pas été assez performantes [286]. C'est pourquoi, nous proposons dans cette thèse d'utiliser d'autres méthodes numériques usuelles en physique de la matière condensée : les méthodes Monte Carlo Quantique (QMC) (voir la revue [91]). Contrairement aux précédentes, celles-ci sont fondées sur des méthodes stochastiques, exactes pour des systèmes bosoniques et « quasi »-exactes¹ pour des systèmes fermioniques. Elles permettent de traiter de grands systèmes, de quelques dizaines à quelques centaines de particules, le temps de calcul t de ces simulations étant en N^3 . En contrepartie, les quantités calculées sont affublées de barres d'erreur statistiques qui décroissent seulement en $1/\sqrt{t}$, si bien que les méthodes QMC sont en fait assez lourdes numériquement. Elles bénéficient toutefois de l'avantage d'être adaptées aux calculs parallèles et d'être peu dépendantes en mémoire².

Divers algorithmes QMC ont été utilisés dans la littérature. Certains permettent le calcul de valeurs moyennes quantiques à température finie. C'est le cas par exemple du Path Integral Monte Carlo [49] ou encore de l' Auxiliary Field Monte Carlo [232]. Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser uniquement à des méthodes QMC fonctionnant à température nulle. Nous commencerons par étudier la méthode Monte Carlo Variationnel (VMC) puis nous présenterons l'algorithme Green Function Monte Carlo (GFMC) [270]. Ce dernier fait partie de la famille des méthodes QMC par projection et correspond, plus précisément, à la version sur réseau de l'algorithme Diffusion Monte Carlo [100]. Enfin, nous nous intéresserons à l'algorithme Reptation Quantum Monte Carlo (RQMC) [25, 193] qui constitue une approche duale à l'algorithme GFMC : alors que le GFMC aborde l'équation de Schrödinger en terme d'équation différentielle, le RQMC utilise le formalisme d'intégrales de chemins. De ce fait, les deux méthodes ne calculent pas avec la même efficacité toutes les quantités physiques. En pratique, tous les résultats présentés dans cette thèse ont été obtenus avec les méthodes VMC et GFMC (le RQMC a servi aux calculs de fonctions de réponse, non traités dans ce manuscrit).

4.1 Vers une méthode stochastique

Avant de se focaliser sur les algorithmes VMC, GFMC et RQMC à proprement parler, expliquons le principe général des méthodes Monte Carlo Quantique, en tant que méthodes stochastiques. Pour cela, quelques rappels de probabilité s'imposent.

¹Le problème des signes des fermions rend la plupart des méthodes QMC extrêmement instables numériquement. Pour le contourner, on utilise le plus souvent l'approximation Fixed Node qui s'avère être très performante (§4.3.3). Elle n'en reste pas moins une approximation qui a le défaut d'être peu contrôlable.

²Signalons à ce sujet que nos différents codes ont tous été parallélisés (sous MPI) puis utilisés sur les clusters locaux du laboratoire, ainsi que sur les gros calculateurs récents du CCRT à Bruyères-le-Châtel.

4.1.1 Rappels de probabilité : processus de Markov et matrice stochastique

Soit $\{\mathcal{R}(n), n \in \mathbb{N}\}$ un ensemble de variables aléatoires paramétrisées par un entier n et à valeurs dans un ensemble \mathcal{C} supposé fini, appelé espace des configurations. Pour fixer les idées, interprétons $\mathcal{R}(n)$ comme la position d'un marcheur aléatoire au temps $n\tau$, τ étant un réel correspondant à un pas de temps. Précisons que par position, nous entendons élément de l'espace \mathcal{C} . Ainsi, si \mathcal{C} est pris égal à \mathcal{H} , notre espace de Hilbert, alors à chaque instant $n\tau$, $\mathcal{R}(n)$ correspond à une configuration $|R\rangle = |\{r_1^{\vec{r}}, \sigma_1\}, \dots, \{r_N^{\vec{r}}, \sigma_N\}\rangle$ des N électrons dans le système (de vecteur position $r_i^{\vec{r}}$ et pseudo-spin σ_i).

Soient R_1, \dots, R_n des éléments de \mathcal{C} . On note $P(R_n; \dots; R_1)$ la probabilité d'une suite d'évènements $\{\mathcal{R}(1) = R_1; \mathcal{R}(2) = R_2; \dots; \mathcal{R}(n) = R_n\}$. La probabilité conditionnelle que le marcheur soit aux positions R_k, \dots, R_n aux temps $k\tau, \dots, n\tau$, sachant qu'il se trouvait en R_1, \dots, R_{k-1} aux temps $\tau, \dots, (k-1)\tau$ est notée $P(R_n; \dots; R_k | R_{k-1}; \dots; R_1)$.

Définition d'un processus de Markov

Intéressons-nous à présent à un processus aléatoire particulier : le processus de Markov. On dit que le processus $\{\mathcal{R}(n)\}$ est markovien si : $P(R_n | R_{n-1}; \dots; R_1) = P(R_n | R_{n-1})$. Cette égalité signifie que la position du marcheur à l'instant $n\tau$ ne dépend que de sa position à l'instant précédent $(n-1)\tau$, et non pas de tout le chemin qu'il a parcouru depuis l'instant τ . Ainsi, pour un processus de Markov, on a :

$$P(R_n) = \sum_{R_{n-1} \in \mathcal{C}} P(R_n | R_{n-1}) P(R_{n-1}), \quad (4.1)$$

ce qui constitue l'équation maîtresse du processus.

Matrice stochastique : définition et propriétés

Faisons maintenant l'hypothèse que le processus de Markov $\{\mathcal{R}(n)\}$ est indépendant du temps c'est-à-dire que la probabilité conditionnelle $P(\mathcal{R}(n+1) = R | \mathcal{R}(n) = R')$ de passer de R' en R entre deux instants successifs ne dépend pas de n . On appelle $A_{RR'}$ cette probabilité conditionnelle et pour alléger les notations, on pose : $P_n^R = P(\mathcal{R}(n) = R)$. Dans ces conditions, l'équation maîtresse (4.1) devient :

$$P_{n+1}^R = \sum_{R' \in \mathcal{C}} A_{RR'} P_n^{R'}, \quad (4.2)$$

ce qui peut s'écrire sous forme matricielle selon :

$$\boxed{P_{n+1} = AP_n}, \quad (4.3)$$

où P_n est le vecteur colonne de composantes P_n^R et A la matrice de composantes $A_{RR'}$. Cette matrice regroupe toutes les probabilités de transition $A_{RR'}$ d'un point R' vers un point R en une unité de temps. Elle vérifie donc les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} \forall R, R', A_{RR'} \geq 0 \\ \sum_R A_{RR'} = 1. \end{cases} \quad (4.4)$$

Par définition, toute matrice vérifiant les assertions (4.4) est appelée matrice stochastique.

Ainsi, à tout processus de Markov est associée une matrice stochastique (dans notre cas où \mathcal{C} est fini). Réciproquement, si l'on se donne une matrice stochastique A , on peut interpréter les $A_{RR'}$ comme des probabilités de transition et donc associer à A un processus de Markov. Celui-ci est défini de façon univoque si l'on fixe de plus la distribution initiale P_0 .

Citons pour finir quelques propriétés des matrices stochastiques, qui nous seront fort utiles :

- Soit A une matrice stochastique et ergodique³, il existe un unique vecteur Π tel que $A\Pi = \Pi$. On dit que Π est la distribution stationnaire (ou distribution d'équilibre) du processus associé à A .
- Avec les mêmes notations, on a pour toute distribution P , $\lim_{n \rightarrow \infty} A^n P = \Pi$.
- Si Q est une distribution vérifiant la propriété de balance détaillée pour A , c'est-à-dire telle que :

$$\forall R, R', A_{R'R}Q_R = A_{RR'}Q_{R'}, \tag{4.5}$$

alors $Q = \Pi$: Q est la distribution d'équilibre de A . Bien sûr, la réciproque est la fausse.

Implémentation pratique d'un processus de Markov et applications

Remarquons qu'un processus de Markov dans un espace \mathcal{C} fini est particulièrement simple à simuler numériquement. En effet, l'équation (4.3) donne par itérations successives : $P_n = A^n P_0$. Il suffit donc de distribuer initialement M marcheurs selon P_0 dans l'espace des configurations \mathcal{C} puis à chaque itération du programme, faire avancer indépendamment chaque marcheur selon A . Au bout de n itérations, les marcheurs sont distribués selon la distribution P_n . Ce procédé est illustré sur la figure 4.1.

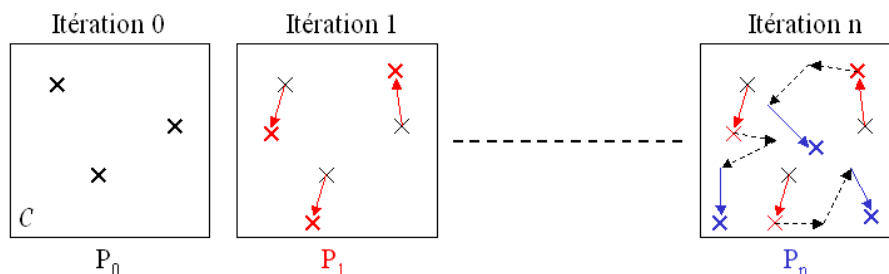


FIG. 4.1 – Représentation schématique d'un processus de Markov avec $M = 3$ marcheurs. Chaque croix correspond à la position d'un marcheur dans l'espace \mathcal{C} et chaque flèche, à un mouvement selon la matrice stochastique sous-jacente. Au bout de n itérations, les trois marcheurs (croix bleues) sont distribués selon P_n .

D'un point de vue pratique, on utilise des simulations de processus de Markov pour traiter l'un des deux problèmes suivants, selon la connaissance que nous avons du processus :

- La détermination (aux fluctuations statistiques près) de la distribution d'équilibre d'un tel processus. Dans ce cas, la matrice stochastique A de ce dernier est connue et l'on cherche sa distribution d'équilibre Π . On peut l'obtenir stochastiquement par le procédé décrit ci-dessus puisque, quelque soit P_0 , $P_n = A^n P_0 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \Pi$. Cette méthode est utilisée pour résoudre des équations aux dérivées partielles par discrétisation et est à la base des méthodes Monte Carlo Quantique GFMC et RQMC, dont nous allons brièvement discuter du principe dans la section

³On dit qu'une matrice A est ergodique si : $\exists k \in \mathbb{N}^* / \forall R, R', (A^k)_{RR'} \neq 0$. Cela signifie que la probabilité d'arriver en R en partant de R' , en effectuant un nombre « fini » de sauts suivant A , est non nulle, quelque soient R et R' .

suivante, avant de les détailler respectivement au §4.3 et §4.4.

• *La génération de positions aléatoires dans \mathcal{C} selon une distribution Π quelconque.*

Dans ce cas, Π est connue et on recherche une matrice stochastique A dont elle est la distribution d'équilibre : on peut alors la générer avec M marcheurs. Pour ce faire, le plus simple est de trouver une matrice stochastique vérifiant la propriété de balance détaillée (4.5) pour Π . On dispose d'un moyen systématique pour construire une telle matrice A grâce à l'algorithme Metropolis, que l'on présentera au §4.2.1 : ce procédé permet de générer des positions dans \mathcal{C} selon n'importe quelle distribution Π , en construisant un processus markovien dont Π est la distribution d'équilibre. Il a été largement utilisé pour le calcul numérique d'intégrales et la résolution de problèmes de physique classique. Nous l'exploiterons dans l'algorithme VMC présenté au §4.2, ainsi que dans l'algorithme RQMC au §4.4.

Dans la section suivante, nous expliquons comment mettre à profit ces quelques notions élémentaires sur les processus stochastiques pour déterminer l'état fondamental de notre Hamiltonien H .

4.1.2 Principe des méthodes Monte Carlo Quantique

Les méthodes stochastiques peuvent être employées pour résoudre une équation aux dérivées partielles. L'idée est de construire un processus aléatoire dont l'équation maîtresse coïncide avec l'équation différentielle considérée, après discrétisation. En particulier, nous allons nous intéresser aux méthodes stochastiques dites Monte Carlo Quantique, qui s'appliquent à l'équation de Schrödinger. Rappelons que celle-ci s'écrit en temps imaginaire β :

$$-\frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial \beta} = H |\Psi\rangle, \quad (4.6)$$

et que sa solution formelle est : $|\Psi(\beta)\rangle = e^{-\beta H} |\Psi(0)\rangle$. Lorsque $\beta \rightarrow \infty$, on peut accéder au fondamental $|\Psi^0\rangle$ de H par l'opérateur d'évolution $e^{-\beta H}$, car pour tout état $|\Psi\rangle$ de projection non nulle sur $|\Psi^0\rangle$:

$$\boxed{\lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-\beta H} |\Psi\rangle \propto |\Psi^0\rangle}. \quad (4.7)$$

Démonstration de l'équation (4.7)

Soient $|\psi^i\rangle$ et E_i les états propres et les énergies propres de H . On a, pour tout état $|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\Psi^i\rangle$ tel que $c_0 \neq 0$:

$$e^{-\beta H} |\Psi\rangle = \sum_i c_i e^{-\beta E_i} |\Psi^i\rangle = e^{-\beta E_0} \left(c_0 |\Psi^0\rangle + \sum_{i \neq 0} c_i e^{-\beta(E_i - E_0)} |\Psi^i\rangle \right).$$

Or $\lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-\beta(E_i - E_0)} = 0$ car $E_i > E_0$, E_0 étant l'énergie du fondamental. Donc :

$e^{-\beta H} |\Psi\rangle \underset{\beta \rightarrow \infty}{\approx} c_0 e^{-\beta E_0} |\Psi^0\rangle$. D'où la relation (4.7). ■

En travaillant avec un temps discrétisé $\beta = n\tau$ ($\tau \ll 1$) et en posant $|\Psi_n\rangle \equiv |\Psi(\beta = n\tau)\rangle$, l'équation de Schrödinger (4.6) devient :

$$\boxed{|\Psi_{n+1}\rangle = G |\Psi_n\rangle}, \quad (4.8)$$

où G est l'opérateur de Green défini par :

$$\boxed{G = I - \tau H}. \quad (4.9)$$

L'équation (4.7) se réécrit quant à elle :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} G^n |\Psi\rangle \propto |\Psi^0\rangle. \quad (4.10)$$

Ainsi, le problème numérique se réduit à implémenter efficacement l'équation (4.8), qui après un «très grand nombre» d'itérations nous fournit le fondamental $|\Psi^0\rangle$ recherché. Pour ce faire, on exploite l'analogie entre les équations (4.3) et (4.8).

Lorsque l'on traite le problème libre, sans interaction électronique, l'équation de Schrödinger n'est formellement qu'une équation de diffusion. G est alors stochastique : on peut interpréter $G_{RR'}$ comme la probabilité pour un marcheur de passer de R' en R en une unité de temps, et donc calculer stochastiquement $G^n |\Psi\rangle$ en faisant diffuser selon G , M marcheurs dans l'espace de Hilbert. Signalons qu'en réalité, le cas sans interaction est trivial car il peut se ramener à un problème à un corps qui se résoud sans difficulté par diagonalisation exacte. L'utilisation de méthodes stochastiques a donc peu d'intérêt dans ce cas. Elles deviennent intéressantes, en revanche, lorsqu'il s'agit de traiter le problème avec interactions, ce que nous proposons de faire. Mais alors l'opérateur de Green n'est pas stochastique : $G_{RR'}$ ne peut plus s'interpréter comme une probabilité ... Il faut donc élaborer des techniques pour implémenter stochastiquement l'équation (4.8). L'algorithme GFMC, présenté à la section 4.3, permet justement cette implémentation. L'algorithme RQMC procède quant à lui d'une manière différente mais équivalente, puisqu'il utilise le formalisme d'intégrales de chemin pour résoudre l'équation de Schrödinger. Nous en discuterons au §4.4.

D'après l'équation (4.10), il est possible de calculer le fondamental $|\Psi^0\rangle$ à partir de n'importe quelle fonction d'onde $|\Psi\rangle$ (de projection non nulle sur $|\Psi^0\rangle$), en appliquant G un grand nombre de fois. On comprend cependant que plus $|\Psi\rangle$ sera éloigné de $|\Psi^0\rangle$, plus il faudra d'itérations pour effectuer la projection sur le fondamental et donc plus le temps de calcul sera long. On a donc tout intérêt à choisir la fonction d'onde de départ la plus proche possible de $|\Psi^0\rangle$. Ainsi, avant d'entreprendre une simulation GFMC (ou RQMC), on optimise cette fonction d'onde initiale à l'aide de l'algorithme VMC, que nous présentons dans la section suivante §4.2.

Remarque sur le traitement du pseudo-spin

Avant d'expliquer la méthode VMC, précisons que dans la suite nos trois algorithmes seront présentés en l'absence de pseudo-spin σ (spin ou vallée), pour ne pas alourdir les notations et introduire de complications inutiles. La raison de ce choix est que le Hamiltonien H de notre modèle (3.2) ne contient pas de terme de «spin-flip» : un électron de pseudo-spin σ reste toujours de pseudo-spin σ . Ainsi, pour traiter le problème avec pseudo-spin, il suffit d'antisymétriser correctement la fonction guide de départ⁴, puis d'utiliser les algorithmes Monte Carlo pour engendrer le mouvement des marcheurs de $|\vec{r}_1^{\rightarrow}, \dots, \vec{r}_N^{\rightarrow}\rangle$ vers $|\vec{r}_1^{\rightarrow'}, \dots, \vec{r}_N^{\rightarrow'}\rangle$, sans jamais modifier les pseudo-spin σ_i des particules, fixés au début de la simulation. On

⁴Les particules de pseudo-spin σ étant discernables des particules de pseudo-spin $\sigma' \neq \sigma$, il suffit d'antisymétriser la fonction guide par rapport à l'échange entre particules de même pseudo-spin σ . Nous verrons comment l'on procède au §5.1.

comprend donc que le Monte Carlo fonctionne de la même manière qu'il y ait pseudo-spin ou pas. Ainsi, dans la suite, on oubliera le pseudo-spin et on prendra comme espace de Hilbert \mathcal{H} , l'espace $\{|\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle\}$, où $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ sont les vecteurs positions des N électrons du système.

4.2 Première approche variationnelle : VMC

La méthode Monte Carlo Variationnel (VMC) est la plus simple des trois méthodes Monte Carlo Quantique présentées dans ce manuscrit mais aussi la moins performante. En pratique, nous l'utilisons pour obtenir une première approximation de l'état fondamental de notre Hamiltonien H , servant de point de départ pour les algorithmes GFMC et RQMC. Son principe consiste à calculer l'énergie d'une fonction d'onde d'essai et à la minimiser en variant à souhait les paramètres de cette fonction d'onde car plus l'énergie trouvée est basse, plus on peut s'attendre à ce que la fonction d'onde d'essai soit proche de l'état fondamental. La méthode est variationnelle dans le sens où elle cherche à optimiser divers paramètres de la fonction d'essai pour se rapprocher du fondamental. Mais attention, elle n'est pas exacte contrairement aux méthodes GFMC et RQMC : la fonction d'onde d'essai optimisée n'est pas (en général) celle du fondamental. Pour calculer les énergies, qui s'écrivent comme des intégrales à dN dimensions sur les coordonnées des particules ($d = 2$ pour nous), la méthode VMC utilise une technique de calcul d'intégrales par l'algorithme Metropolis. Nous expliquons ci-dessous comment fonctionne cette technique dans le cas général puis nous montrons comment la méthode VMC l'exploite.

4.2.1 Calcul d'intégrales en Monte Carlo et algorithme Metropolis

Considérons une intégrale qui s'écrit sous la forme :

$$I = \int_{\mathcal{C}} dR p(R) f(R), \quad (4.11)$$

où f est une fonction quelconque et p vérifie $p(R) \geq 0$ et $\int_{\mathcal{C}} dR p(R) = 1$ de sorte que l'on puisse interpréter R comme une variable aléatoire sur \mathcal{C} de distribution de probabilité $p(R)$. Pour évaluer numériquement cette intégrale, il est possible d'utiliser des techniques de sommation classiques comme la méthode du trapèze, la méthode de Simpson ou d'autres méthodes de quadrature numérique. Cependant, elles s'avèrent peu efficaces lorsque la dimension de l'espace \mathcal{C} est grande et l'on verra par la suite que l'on aura besoin de calculer des intégrales sur plusieurs milliers de variables. Dans ce cas, il est fort préférable d'estimer I par une méthode stochastique du type Monte Carlo en remarquant que I est égale par définition à l'espérance de la variable aléatoire $f(R)$, notée dans la suite $\overline{f(R)}$. Pour ce faire, on introduit une nouvelle variable aléatoire :

$$\mathcal{I}_n = \frac{f(R_1) + f(R_2) + \dots + f(R_n)}{n}, \quad (4.12)$$

où les R_i sont des variables aléatoires indépendantes distribuées selon $p(R)$. Sous certaines hypothèses assez générales [83], le théorème central limite assure qu'à grand n , \mathcal{I}_n est distribuée selon une loi gaussienne de moyenne $I = \overline{f(R)}$ et d'écart-type σ/\sqrt{n} , où $\sigma^2 = \overline{f^2(R)} - \overline{f(R)}^2$ est la variance de $f(R)$. En pratique, cela signifie que l'on peut évaluer l'intégrale I à partir d'un ensemble de n variables aléatoires R_i distribuées selon $p(R)$ en calculant simplement la

moyenne \mathcal{I}_n . L'erreur faite sur I s'estime par σ/\sqrt{n} si les n variables sont bien indépendantes :

$$\boxed{\mathcal{I}_n \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} I \pm \frac{\sigma}{\sqrt{n}}}, \quad (4.13)$$

et σ s'estime lui-même par $\sigma^2 \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{n} \sum_i [f(R_i)]^2 - \left[\frac{1}{n} \sum_i f(R_i) \right]^2$. \mathcal{I}_n est appelée estimateur de I .

Algorithme Metropolis

Pour calculer l'intégrale I selon la méthode exposée ci-dessus, il est nécessaire de pouvoir générer des variables aléatoires R_i de \mathcal{C} selon la distribution $p(R)$. Dans certains cas particuliers, il est possible d'échantillonner directement $p(R)$ (loi constante, gaussienne, poissonnienne, ...) [200] mais en général, sa forme est trop complexe et on utilise alors l'algorithme Metropolis pour l'échantillonnage [163, 108]. Cet algorithme génère des positions R_i selon $p(R)$ en construisant une chaîne de Markov à partir d'un marcheur de \mathcal{C} déplacé selon les règles suivantes :

1. initialement, le marcheur est placé à une position $R_{n=0}$ de \mathcal{C} quelconque.
2. on propose au marcheur une nouvelle position R' choisie selon une distribution de probabilité $Q(R'|R)$ *a priori* quelconque (mais l'efficacité de l'algorithme dépend tout-déjà de son choix).
3. – si $p(R')/p(R_n) \geq Q(R'|R_n)/Q(R_n|R')$ (c'est-à-dire si $p(R') \geq p(R_n)$ dans le cas où Q est symétrique, $Q(R'|R) = Q(R|R')$) alors le mouvement est accepté : on déplace le marcheur en $R_{n+1} = R'$.
– en revanche, si $p(R')/p(R_n) < Q(R'|R_n)/Q(R_n|R')$ (c'est-à-dire si $p(R') < p(R_n)$ pour Q symétrique), on pose :

$$R_{n+1} = \begin{cases} R' & \text{avec la probabilité } a \equiv \frac{Q(R_n|R') p(R')}{Q(R'|R_n) p(R_n)} \quad (\text{mouvement accepté}) \\ R_n & \text{avec la probabilité } 1 - a \quad (\text{mouvement refusé}). \end{cases}$$

4. on répète les étapes 2 et 3 un grand nombre de fois avec $n \rightarrow n + 1$.

On peut montrer qu'après de nombreuses itérations (suffisamment pour que la position initiale soit « oubliée »), les positions successives du marcheur sont distribuées selon $p(R)$. La démonstration de ce résultat est un classique que l'on pourra trouver par exemple dans [80, 83, 91]. Ainsi, l'algorithme Metropolis permet d'échantillonner facilement n'importe quelle distribution de probabilité.

Temps de thermalisation et temps de corrélation

Il apparaît dans l'algorithme Metropolis un temps caractéristique dit de thermalisation n_{th} qui correspond à la durée du régime transitoire initial, au cours duquel le mouvement du marcheur dépend encore de la position de départ et au-delà duquel seulement la distribution d'équilibre est atteinte (ici $p(R)$). Pour calculer correctement des intégrales selon (4.13), il est donc nécessaire d'effectuer un nombre n d'itérations Metropolis tel que $n > n_{th}$, de sorte que les positions aléatoires R_i de (4.12) soient effectivement distribuées selon $p(R)$ (les n_{th} premières positions aléatoires ne sont pas prises en compte dans la statistique). Dans toutes

nos simulations Metropolis utilisées dans le cadre de la méthode VMC (voir §4.2.2), nous avons estimé le temps de thermalisation à $n_{th} \approx 1000$ itérations. Précisons que l'existence d'un temps de thermalisation n'est bien sûr pas spécifique à l'algorithme Metropolis. A chaque processus markovien est associé un tel temps correspondant au temps nécessaire pour atteindre la distribution d'équilibre. Nous en reparlerons au §4.3.2 et §4.4.2 lorsque nous discuterons des processus de Markov utilisés dans les méthodes GFMC et RQMC.

Un autre temps caractéristique des simulations Monte Carlo est le temps de corrélation, correspondant au nombre d'itérations typiques séparant deux configurations de la chaîne de Markov (générée par l'algorithme Metropolis ou tout autre algorithme) qui peuvent être considérées comme indépendantes. La détermination de ce temps de corrélation, noté ici n_c , est essentiel si l'on veut estimer correctement l'erreur faite sur I en utilisant l'estimateur \mathcal{I}_n . En effet, d'après (4.13), cette erreur est donnée par σ/\sqrt{n} si les n positions aléatoires R_i de \mathcal{I}_n sont indépendantes. Comme dans un processus de Markov, deux configurations indépendantes sont séparées de n_c itérations, seules n/n_c positions sont indépendantes parmi les n générées au total et donc l'erreur sur I est donnée en fait par $\sigma/\sqrt{n/n_c}$. Pour estimer le temps de corrélation n_c , une méthode empirique consiste à évaluer σ (ou la fonction d'autocorrélation des $f(R_i)$) et à regarder quand cette quantité s'annule [80]. Dans nos simulations Monte Carlo, nous l'avons estimé par la méthode Jacknife [172].

La détermination des temps caractéristiques de thermalisation et de corrélation constitue donc une étape technique inévitable dans l'utilisation à bon escient des méthodes Monte Carlo.

4.2.2 Application au calcul d'observables quantiques

L'algorithme Monte Carlo Variationnel (VMC) exploite la technique de calcul d'intégrales exposée ci-dessus pour calculer l'énergie E^{VMC} d'une fonction d'onde *a priori* quelconque, Ψ^G , appelée dans ce contexte fonction d'essai ou fonction guide :

$$E^{VMC} = \frac{\langle \Psi^G | H | \Psi^G \rangle}{\langle \Psi^G | \Psi^G \rangle}. \quad (4.14)$$

Ici H désigne le Hamiltonien du système quantique considéré. Pour calculer cette énergie E^{VMC} en Monte Carlo, on écrit l'équation (4.14) sous la forme de l'intégrale (4.11) en utilisant la relation de fermeture dans l'espace des positions $|R\rangle$:

$$E^{VMC} = \sum_R \Pi_R E_R, \quad (4.15)$$

avec :

$$\Pi_R \equiv \frac{|\Psi^G(R)|^2}{\sum_R |\Psi^G(R)|^2} \quad (4.16)$$

et :

$$E_R \equiv \sum_{R'} \frac{1}{\Psi^G(R)} H_{RR'} \Psi^G(R'). \quad (4.17)$$

E_R , homogène à une énergie, est appelée énergie locale⁵ de la fonction d'onde Ψ^G au point R . Nous avons écrit ici ces équations en supposant que l'espace dans lequel évoluent les particules

⁵Dans le cas particulier où Ψ^G coïncide avec un état propre d'énergie E , $E_R = E$ pour tout R .

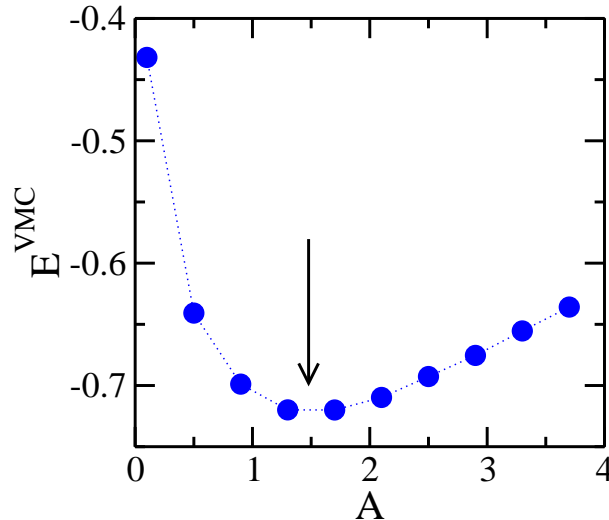


FIG. 4.2 – Energie E^{VMC} d'un système sans spin en fonction du paramètre A de la fonction guide « Liquide » introduite au §5.1.2. Le système considéré contient $N = 16$ particules dans 32×32 sites, à interaction $r_s = 6$ et désordre $k_{Fl} = 2.35$. L'estimateur de l'énergie a été calculé sur 100000 configurations, après le même nombre d'itérations prévues pour la thermalisation. La flèche indique le minimum de la courbe auquel on se place pour optimiser la fonction guide. Les énergies sont exprimées en unité de $2N\pi vt$.

est discretisé, comme c'est le cas dans notre modèle sur réseau présenté au chapitre 3, mais la méthode s'appliquerait de la même manière dans un espace continu. Comme $\Pi_R \geq 0$ et $\sum_R \Pi_R = 1$, Π_R s'interprète comme une distribution de probabilité sur l'espace de Hilbert. Il est donc possible de calculer en Monte Carlo E^{VMC} par l'estimateur :

$$\mathcal{E}_n^{VMC} = \frac{E_{R_1} + E_{R_2} + \dots + E_{R_n}}{n} \quad (4.18)$$

où les R_i sont des configurations aléatoires indépendantes de l'espace de Hilbert distribuées selon Π_R , en l'occurrence générées par un algorithme Metropolis⁶. En effet, d'après (4.13), on a :

$$\mathcal{E}_n^{VMC} \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} E^{VMC} \pm \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \quad (4.19)$$

où $\sigma^2 = \overline{E_R^2} - \overline{E_R}^2$ est la variance de la variable aléatoire E_R . D'après le principe variationnel, l'énergie E^{VMC} ainsi évaluée, constitue une borne supérieure de l'énergie du fondamental exact E_0 : $E^{VMC} \geq E_0$. L'idée supplémentaire du Monte Carlo Variationnel est d'optimiser la fonction d'onde Ψ^G de façon à minimiser E^{VMC} et à se rapprocher ainsi au maximum du fondamental. Ce point est illustré sur la figure 4.2 : pour notre Hamiltonien (3.2), nous avons calculé l'énergie E^{VMC} de Ψ^G en modifiant un paramètre intervenant dans la définition de notre fonction guide (en l'occurrence le paramètre A de la fonction Slater-Jastrow que l'on introduira plus tard au §5.1). On constate que E^{VMC} passe par un minimum si bien qu'en ajustant notre paramètre variationnel de façon à atteindre ce minimum, on optimise notre fonction guide. En choisissant ainsi tous les paramètres liés à notre famille de fonctions guides Ψ^G , on obtient une première estimation variationnelle du fondamental du système.

⁶L'algorithme Metropolis utilisé dans le cadre de notre modèle est explicité dans la thèse de H. Falakshahi [80].

Pour savoir si cette estimation est bonne, on peut utiliser, outre le principe variationnel, le critère de variance : la variance de l'énergie doit être nulle pour un état propre du système (mais pas forcément l'état fondamental) si bien que l'on a intérêt à minimiser cette variance. Un autre critère consiste à maximiser l'« overlap » de Ψ^G avec Ψ^0 . Dans [77], C. Mora et X. Waintal ont montré comment calculer facilement cette quantité en Monte Carlo Quantique.

Remarquons pour finir que l'énergie E^{VMC} n'est pas la seule quantité calculable en VMC. De la même manière, on peut calculer la valeur moyenne quantique dans l'état Ψ^G de n'importe quel observable diagonal dans la base des positions $\{R\}$ (comme la densité de particules ou la fonction de corrélation densité-densité statique). Ainsi, si la fonction guide Ψ^G est une approximation raisonnable de l'état fondamental, la méthode VMC peut déjà nous en apprendre beaucoup sur les propriétés du fondamental à température nulle. Dans la suite, nous discutons du calcul pratique des quotients $\Pi_R/\Pi_{R'}$ intervenant dans l'algorithme Metropolis car c'est ce calcul numérique qui est le plus coûteux en temps. Pour une lecture rapide, cette partie technique peut être sautée.

4.2.3 Intermède technique : algorithme « update » pour le calcul des déterminants

Dans l'algorithme Metropolis utilisé dans la méthode VMC, on propose au marcheur à chaque itération un mouvement de R vers R' et l'on a ensuite besoin de calculer le quotient des probabilités $\frac{\Pi_R}{\Pi_{R'}} = \frac{|\Psi^G(R)|^2}{|\Psi^G(R')|^2}$ (voir §4.2.1). Si le mouvement est accepté, il est de plus nécessaire de mettre à jour (« updater ») $\Psi^G(R')$ pour l'itération suivante. Ces calculs interviennent également à chaque itération du processus de Markov utilisé pour faire avancer les marcheurs en GFMC et RQMC (§4.3.1 et §4.4.1) et ils sont répétés un grand nombre de fois pour acquérir une statistique suffisante. Il est donc essentiel de les optimiser.

Dans notre modèle, on utilise comme fonction guide Ψ^G une fonction Slater-Jastrow (explicitée au §5.1) si bien que calculer Ψ^G revient essentiellement à calculer un déterminant de Slater de dimension⁷ N : $\Psi^G(R) \propto \text{Det}(R)$. Avec les algorithmes classiques (méthode de Gauss par exemple), le calcul numérique d'un tel déterminant nécessite de l'ordre de N^3 opérations. Dans notre code, nous utilisons un autre algorithme, appelé « update » [50], qui permet de gagner un facteur N dans le temps de calcul. Celui-ci exploite le fait qu'entre $\text{Det}(R)$ et $\text{Det}(R')$, seule une colonne est modifiée puisque la proposition de mouvement de $|R\rangle = |\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle$ vers $|R'\rangle = |\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N\rangle$ est faite en pratique en déplaçant une seule des N particules de \vec{r}_i vers \vec{r}'_i , tandis que $\vec{r}'_j = \vec{r}_j$ pour $j \neq i$. On pourra trouver dans la thèse d'H. Falakshahi l'énoncé précis de l'algorithme « update » ainsi que la justification détaillée de sa validité [80]. Précisons que nous avons essayé d'optimiser au maximum l'implémentation pratique de cet algorithme, en utilisant la bibliothèque Blas qui offre des fonctionnalités optimisées pour les opérations d'algèbre linéaire, grâce à une mise en mémoire cache intelligente. Au final, nous avons constaté qu'au cours d'une simulation VMC, GFMC ou RQMC, environ 75% du temps est dépensé dans le calcul des quotients $\Psi^G(R)/\Psi^G(R')$, pour un système typique d'une vingtaine de particules dans un millier de sites. C'est donc cette opération qui reste la plus coûteuse dans notre code.

⁷ N correspond ici au nombre de particules dans le système, puisque l'on ne prend pas en compte le pseudo-spin. Avec spin up et down, on aurait $\Psi^G(R) \propto \text{Det}_\uparrow(R_\uparrow)\text{Det}_\downarrow(R_\downarrow)$, soit deux déterminants à calculer de taille respective N_\uparrow et N_\downarrow .

4.3 Approche en terme d'équation différentielle : GFMC

La méthode Green Function Monte Carlo (GFMC) que nous allons décrire ici a été introduite dans [270] pour traiter des Hamiltoniens sur réseau. Elle a été implémentée⁸ au laboratoire lors de la thèse d'H. Falakshahi [80] puis appliquée à notre système d'étude, en l'absence de désordre. Elle a notamment permis à l'époque la mise en évidence d'une nouvelle phase stable entre le liquide de Fermi et le cristal de Wigner ([81, 287]). Lors de cette thèse, nous avons rajouté dans le code le spin et les vallées, optimisé l'implémentation de l'algorithme « update » (§4.2.3), perfectionné la parallélisation et rajouté quelques fonctions de calcul d'observables. Cela n'a pas nécessité de nombreuses lignes de code mais toutefois une parfaite compréhension des algorithmes et de leur implémentation.

Nous présentons dans la suite le principe de fonctionnement de l'algorithme GFMC, en se servant de cet exemple pour introduire le procédé d'« Importance Sampling » et l'approximation Fixed Node, usuels en Monte Carlo Quantique.

4.3.1 Description de l'algorithme GFMC

Rappelons que nous voulons implémenter la relation (4.8), $|\Psi_{n+1}\rangle = G |\Psi_n\rangle$, qui après un grand nombre d'itérations nous fournit le fondamental $|\Psi^0\rangle$ par $\lim_{n \rightarrow \infty} G^n |\Psi\rangle \propto |\Psi^0\rangle$, où la fonction d'onde de départ $|\Psi\rangle$ est prise en pratique égale à la fonction guide $|\Psi^G\rangle$ optimisée en VMC. Nous nous intéressons ici au cas où l'opérateur de Green G est une matrice quelconque, stochastique ou non. Néanmoins, nous verrons au 4.3.3 que nous nous ramènerons toujours à la situation où $G_{RR'} \geq 0$ (au prix d'une approximation). Nous supposons donc dans la suite que : $\forall R, R' \in \mathcal{H}, G_{RR'} \geq 0$, \mathcal{H} étant notre espace de Hilbert sans pseudo-spin.

Implémentation de $|\Psi_{n+1}\rangle = G |\Psi_n\rangle$: construction d'un processus aléatoire dans l'espace $\mathcal{H} \otimes \mathbb{R}$

Comme nous l'avons vu au 4.1, l'idée de base pour implémenter $|\Psi_{n+1}\rangle = G |\Psi_n\rangle$ est de faire diffuser M marcheurs selon une équation maîtresse du type (4.3). Cependant, nous ne pouvons pas faire diffuser directement nos marcheurs dans \mathcal{H} selon G car si G n'est pas stochastique, les $G_{RR'}$ ne définissent pas un processus de Markov. Pour contourner ce problème, nous allons construire par un processus aléatoire une quantité Q_n telle que $Q_{n+1} = GQ_n$, en travaillant dans l'espace des configurations $\mathcal{C} = \mathcal{H} \otimes \mathbb{R}$, plus grand que \mathcal{H} [112]. Ainsi, chaque marcheur est caractérisé par deux variables aléatoires :

- $\mathcal{R}(n)$, à valeurs dans \mathcal{H} , qui représente la position du marcheur au temps n
- $\mathcal{W}(n)$, à valeurs dans \mathbb{R} , qui est interprété comme un poids transporté par le marcheur.

- Définissons la matrice $A^{gfm c}$ par :

$$\boxed{\forall R, R' \in \mathcal{H}, A_{RR'}^{gfm c} = \frac{G_{RR'}}{b_{R'}}, \text{ où } b_{R'} = \sum_R G_{RR'}}. \quad (4.20)$$

On vérifie aisément que $A^{gfm c}$ est stochastique : on peut donc interpréter $A_{RR'}^{gfm c}$ comme une probabilité de transition de R' vers R . Cela nous permet de définir dans l'espace des

⁸Cet algorithme a été codé en C++, comme le VMC et le RQMC (6000 lignes en tout pour les trois). Quelques petits codes de traitement de données ont ensuite été écrits en Python.

configurations $\mathcal{H} \otimes \mathbb{R}$ le processus aléatoire suivant :

$$(\mathcal{R}(n) = R', \mathcal{W}(n) = w) \xrightarrow{A_{RR'}^{gfm c}} (\mathcal{R}(n+1) = R, \mathcal{W}(n+1) = w \times b_{R'}), \quad (4.21)$$

d'équation maîtresse :

$$P_{n+1}^R(w) = \sum_{R' \in \mathcal{H}} A_{RR'}^{gfm c} P_n^{R'}\left(\frac{w}{b_{R'}}\right), \quad (4.22)$$

où $P_n^R(w)$ est la probabilité pour un marcheur que $\mathcal{R}(n) = R$ et $\mathcal{W}(n) = w$, c'est-à-dire la probabilité qu'il soit en R au temps n , avec le poids w . L'expression informelle (4.21) signifie qu'un marcheur se trouvant en R' à l'instant n est placé à l'instant $n+1$ en R avec la probabilité $A_{RR'}^{gfm c}$. De plus, lors de ce mouvement, le poids du marcheur est multiplié par $b_{R'}$.

• Introduisons maintenant la quantité Q_n^R , définie comme la valeur moyenne à l'instant n du poids d'un marcheur situé en R :

$$\boxed{Q_n^R = \sum_w w P_n^R(w)}. \quad (4.23)$$

En notant Q_n le vecteur colonne de composantes Q_n^R , on a :

$$\boxed{Q_{n+1} = G Q_n}. \quad (4.24)$$

On a ainsi construit par un processus aléatoire une quantité Q_n vérifiant, comme $|\Psi_n\rangle$, l'équation de Schrödinger discrétisée (4.8). Les propriétés (4.10) et (4.24) nous assurent que : $\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n = |\Psi^0\rangle$. L'algorithme GFMC nous permet donc théoriquement d'accéder à l'état fondamental exact $|\Psi^0\rangle$.

Démonstration de l'équation (4.24)

D'après l'équation (4.22), on a :

$$Q_{n+1}^R = \sum_w \left(\sum_{R'} A_{RR'}^{gfm c} P_n^{R'}\left(\frac{w}{b_{R'}}\right) \right) = \sum_{R'} A_{RR'}^{gfm c} b_{R'} \left(\sum_w \frac{w}{b_{R'}} P_n^{R'}\left(\frac{w}{b_{R'}}\right) \right) = \sum_{R'} G_{RR'} Q_n^{R'},$$

d'où la relation (4.24). ■

En pratique, le processus (4.21) est simulé numériquement en utilisant M marcheurs qui diffusent indépendamment selon $A^{gfm c}$. Au début de la simulation, les poids des marcheurs sont tous posés égaux à 1 puis à chaque itération, ils sont modifiés de sorte à corriger le processus stochastique $A^{gfm c}$, introduit pour les besoins du numérique mais différent de G par définition. Au bout d'un «grand» nombre d'itérations, le système est projeté dans l'état fondamental. Plutôt que d'estimer la valeur moyenne Q_n^R donnant $|\Psi^0\rangle$, nous allons exploiter l'information contenue dans les M marcheurs pour calculer statistiquement des estimateurs de quantités physiques (énergie, densité, ...) dans l'état fondamental. Nous verrons comment procéder au 4.3.2. Mais avant cela, l'algorithme GFMC doit être amélioré car, utilisé tel quel, les quantités calculées sont affectées de barres d'erreur (dûes aux fluctuations statistiques) beaucoup trop importantes. Pour pallier à cette imprécision, on corrige l'algorithme par la méthode de reconfiguration stochastique des marcheurs, dont nous allons expliquer à présent le principe.

Méthode de reconfiguration stochastique des marcheurs

La grande imprécision de l'algorithme GFMC décrit précédemment vient de l'évolution du poids d'un marcheur selon $\mathcal{W}(n+1) = b_{\mathcal{R}(n)}\mathcal{W}(n)$. En effet, la multiplication par le facteur $b_{\mathcal{R}(n)}$ à chaque itération peut faire exploser ou amortir ce poids, de façon exponentielle. En particulier, si l'un des marcheurs numéro i a un poids $\mathcal{W}_i(n)$ à l'instant n , beaucoup plus grand que ceux des autres marcheurs, tout se passe comme si la statistique ne prenait en compte que le marcheur numéro i , même si un très grand nombre de marcheurs M a été traité numériquement. Il s'ensuit une grande incertitude sur les quantités calculées.

L'idée de la méthode de reconfiguration stochastique introduite dans [256], est d'égaliser, tous les temps Δ ($\ll \beta$), les poids des M marcheurs, de sorte qu'aucun marcheur ne monopolise la statistique. Ainsi, tous les temps Δ correspondant à une itération n , on pose :

$$\forall i \in \llbracket 1, M \rrbracket, \mathcal{W}_i(n) = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathcal{W}_k(n). \quad (4.25)$$

L'information contenue dans les poids avant moyennage est sauvegardée en reconfigurant les marcheurs, c'est-à-dire en modifiant leur position dans \mathcal{H} . Ainsi, la nouvelle position R_i du $i^{\text{ème}}$ marcheur est prise égale à l'ancienne position R_j du $j^{\text{ème}}$ marcheur avec la probabilité $(\mathcal{W}_j(n) / \sum_k \mathcal{W}_k(n))$. Ceci permet de remplacer des marcheurs de poids faibles, contribuant peu à la statistique, par des marcheurs de poids plus élevés, à nombre de diffuseurs fixe.

Pour finir, il est essentiel de vérifier que le moment Q'_n associé à la nouvelle distribution des M marcheurs après reconfiguration est égal au moment Q_n , avant reconfiguration [80]. La relation $Q_{n+1} = GQ_n$ reste donc valable, ce qui valide l'algorithme.

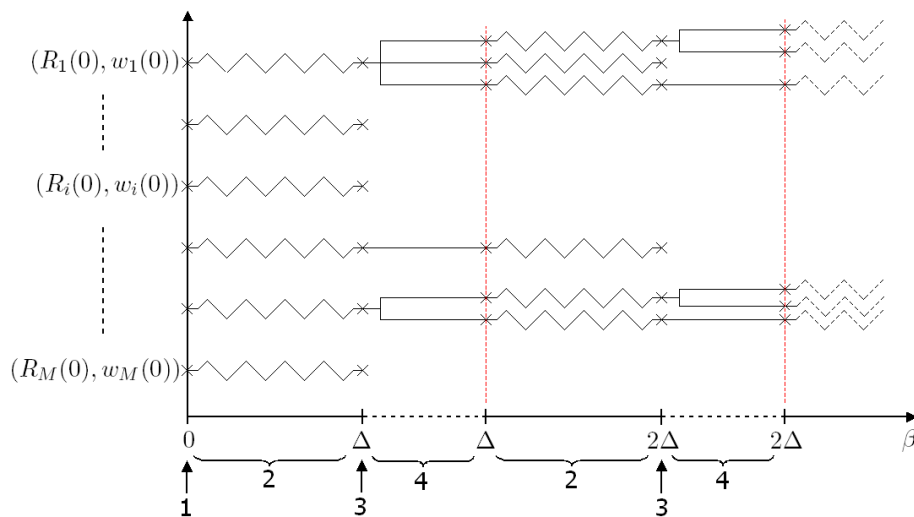


FIG. 4.3 – Principales étapes de l'algorithme GFMC. 1) Distribution initiale des marcheurs selon $(\Psi^G)^2$. Tous les poids sont égaux à 1. 2) Avancée des marcheurs dans \mathcal{H} selon A^{gfmc} et modification des poids selon b . 3) Mesure d'observables physiques tous les temps Δ . 4) Reconfiguration stochastique.

Pour aider à la compréhension, nous avons représenté sur la figure 4.3 le principe de l'exploration de l'espace des configurations par M marcheurs, en GFMC. Initialement, les M marcheurs sont distribués dans \mathcal{H} selon une certaine distribution P_0 ($P_0 = |\Psi^G|^2$ en pratique) et sont tous affectés du même poids, pris égal à 1. Puis, on les fait avancer dans \mathcal{H} selon

la matrice $A^{gfm c}$, tandis que leur poids sont modifiés par $b = (b_R)_{R \in \mathcal{H}}$. Tous les temps Δ , on effectue sur le système une mesure, de l'énergie par exemple (voir 4.3.2). Juste après la mesure, on procède à une reconfiguration stochastique à nombre de marcheurs M constant : les marcheurs de poids faibles sont supprimés au profit des marcheurs de poids importants, qui sont multipliés. On répète ensuite le processus pendant un temps β , correspondant au temps de projection par l'opérateur $e^{-\beta H} \simeq G^n$ (où $\beta = n\tau$). Si β est pris «assez grand», le système est projeté dans l'état fondamental $|\Psi^0\rangle$.

Optimisation de l'échantillonnage par le procédé d'«Importance Sampling»

Intéressons-nous à présent au procédé d'«Importance Sampling» qui apporte une amélioration aux méthodes Monte Carlo Quantique [222] et qui a été appliqué à notre algorithme GFMC. L'objectif de ce procédé est d'optimiser l'échantillonnage en faisant explorer préférentiellement aux marcheurs les zones de l'espace de Hilbert \mathcal{H} où la fonction d'onde du fondamental $|\Psi^0\rangle$ est non négligeable. Comme nous ne connaissons pas $|\Psi^0\rangle$ avant application de l'algorithme, nous utilisons la fonction d'onde guide $|\Psi^G\rangle$, que nous pensons proche de $|\Psi^0\rangle$. Nous définissons alors l'opérateur «Importance Sampling» G^{is} par :

$$\boxed{\forall R, R' \in \mathcal{H}, G_{RR'}^{is} = \frac{\Psi^G(R)}{\Psi^G(R')} G_{RR'}} \quad (4.26)$$

où $G = I - \tau H$ est l'opérateur de Green. A cet opérateur G^{is} , nous pouvons associer la matrice $A_{is}^{gfm c}$ selon :

$$\forall R, R' \in \mathcal{H}, (A_{is}^{gfm c})_{RR'} = \frac{G_{RR'}^{is}}{b_{R'}^{is}}, \text{ où } b_{R'}^{is} = \sum_R G_{RR'}^{is}. \quad (4.27)$$

Ces objets $A_{is}^{gfm c}$ et b^{is} définissent un mouvement aléatoire pour nos M marcheurs dans $\mathcal{H} \otimes \mathbb{R}$. Grâce au terme $\frac{\Psi^G(R)}{\Psi^G(R')}$, ces derniers ont une forte probabilité d'aller vers des configurations R où $\Psi^G(R)$ est grande : leur mouvement est donc optimisé par rapport à celui défini par $A^{gfm c}$. Par ailleurs, on voit apparaître la nécessité de calculer à chaque saut de marcheur le quotient $\frac{\Psi^G(R)}{\Psi^G(R')}$. Pour ce faire, rappelons que nous utilisons l'algorithme «update» (§4.2.3).

On vérifie au 4.3.2 qu'avec ce procédé, on peut calculer des valeurs moyennes d'observables dans l'état fondamental, qui sont les quantités qui nous intéressent physiquement. L'opérateur G^{is} est même justement particulièrement adapté à ce type de calcul (du moins pour l'énergie). Ainsi, à partir de maintenant, nous utiliserons systématiquement G^{is} pour générer le mouvement aléatoire des marcheurs.

Passage en temps continu

Jusqu'à présent, nous avons présenté l'algorithme GFMC en temps discrétisé $\beta = n\tau$, avec $\tau \ll 1$: l'avancée d'un marcheur de R vers R' est faite avec la probabilité $(A_{is}^{gfm c})_{R'R}$ tous les pas de temps τ correspondant à une itération. L'inconvénient de travailler avec un paramètre τ est que la probabilité $(A_{is}^{gfm c})_{RR}$ qu'un marcheur reste à sa place R tend vers 1 à la limite continue $\tau \rightarrow 0$ (d'après (4.9) et (4.27)). La conséquence en est dramatique pour le temps de calcul car l'exploration de l'espace de Hilbert par les marcheurs se fait ainsi de manière très lente, chaque marcheur ayant une très grande probabilité de rester sur place.

C'est pourquoi il est préférable de travailler directement en temps (imaginaire) continu,

en tenant compte du temps t_R pendant lequel le marcheur reste à sa place R . Il est facile de vérifier (voir ci-dessous) que la variable aléatoire t_R est distribuée selon la distribution $p(t_R)$ suivante :

$$p(t_R) = \Gamma_R e^{-\Gamma_R t_R}, \quad \text{où } \Gamma_R = H_{RR} - E_R, \quad (4.28)$$

E_R étant l'énergie locale de $|\Psi^G\rangle$ en R , définie à l'équation (4.17). A chaque itération, t_R étant calculé, le marcheur est ensuite contraint à effectuer un saut vers une nouvelle configuration $R' \neq R$. Le mouvement n'est plus régi par la matrice stochastique $A \equiv A_{is}^{gfm c}$ mais par une autre matrice A^* telle que $A_{RR}^* = 0$ et $A_{R'R}^* = K A_{R'R}$ pour $R \neq R'$ (K constante). La condition de normalisation impose que :

$$A_{R'R}^* = \frac{A_{R'R}}{1 - A_{RR}} \quad \text{pour } R \neq R'. \quad (4.29)$$

Au cours du mouvement, le poids du marcheur est toujours modifié par b_R^{is} , donné par (4.27), et l'on montre facilement à la limite continue que $b_R^{is} = e^{-t_R E_R}$. En résumé, à chaque itération Monte Carlo, on calcule pour chaque marcheur le temps où celui-ci reste à sa place, on le force ensuite à effectuer un saut selon A^* et on modifie son poids.

Démonstration de l'équation (4.28)

On note ici A , la matrice $A_{is}^{gfm c}$. La probabilité $p(t)$ que le marcheur reste à sa place R pendant un temps $t = n\tau$ avant de faire un saut vaut : $p(t) = A_{RR}^n (1 - A_{RR}) / \tau$. Or :

$$A_{RR} = \frac{G_{RR}^{is}}{b_R^{is}} \quad \text{avec } G_{RR}^{is} = 1 - \tau H_{RR} \quad \text{et } b_R^{is} = \sum_{R'} G_{R'R}^{is} = 1 - \tau E_R,$$

d'où à la limite $\tau \rightarrow 0$ (à l'ordre 1 en τ) : $A_{RR} \approx 1 - \tau \Gamma_R$, avec $\Gamma_R = H_{RR} - E_R$. L'équation (4.28) suit immédiatement. ■

4.3.2 Calcul d'observables en GFMC

Introduction de la fonction de partition

Notre objectif est de calculer des valeurs moyennes d'observables physiques dans l'état fondamental $|\Psi^0\rangle$. Pour cela, il est utile d'introduire la pseudo-fonction de partition Z définie par : $Z(\beta) = \langle \Psi^G | e^{-\beta H} | \Psi^G \rangle$. En effet, comme en physique statistique, cette fonction permet indirectement de calculer des valeurs moyennes. On retiendra pour la suite que :

$$Z(\beta = n\tau) = \sum_{R, R'} [(G^{is})^n]_{RR'} [\Psi^G(R')]^2. \quad (4.30)$$

Démonstration de l'équation (4.30)

$$\begin{aligned} \text{On a : } Z(\beta = n\tau) &= \langle \Psi^G | G^n | \Psi^G \rangle = \sum_{R_0, \dots, R_n} \Psi^G(R_0) G_{R_0 R_1} \dots G_{R_{n-1} R_n} \Psi^G(R_n) \\ &= \sum_{R_0, \dots, R_n} \Psi^G(R_0) \left(\frac{\Psi^G(R_1)}{\Psi^G(R_0)} G_{R_0 R_1}^{is} \right) \dots \left(\frac{\Psi^G(R_n)}{\Psi^G(R_{n-1})} G_{R_{n-1} R_n}^{is} \right) \Psi^G(R_n) \\ &= \sum_{R_0, R_n} \left(\sum_{R_1, \dots, R_{n-1}} G_{R_0 R_1}^{is} \dots G_{R_{n-1} R_n}^{is} \right) [\Psi^G(R_n)]^2. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Application au calcul de l'énergie du système

Pour calculer à l'aide de nos M marcheurs l'énergie $E(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi(\frac{\beta}{2}) | H | \Psi(\frac{\beta}{2}) \rangle$ du système dans l'état $|\Psi(\beta)\rangle = e^{-\beta H} |\Psi^G\rangle$, on introduit l'estimateur $\mathcal{E}_M(n)$ défini par :

$$\mathcal{E}_M(n) = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{W}_i(n) E_{\mathcal{R}_i(n)}}{\sum_{i=1}^M \mathcal{W}_i(n)}, \quad (4.31)$$

où $\mathcal{W}_i(n)$ et $\mathcal{R}_i(n)$ désignent la position et le poids du marcheur numéro i à l'instant n et E_R est l'énergie locale au point R :

$$E_R \equiv \sum_{R'} \frac{1}{\Psi^G(R)} H_{RR'} \Psi^G(R'), \quad (4.32)$$

déjà définie à l'équation (4.17). Si l'on distribue initialement les M marcheurs selon la distribution $(\Psi^G)^2$ alors la valeur moyenne quantique $E(\beta)$ que l'on cherche à estimer est donnée par la limite à grand M de $\mathcal{E}_M(n)$:

$$\boxed{\lim_{M \rightarrow \infty} \mathcal{E}_M(n) = E(\beta = n\tau) = \frac{\langle \Psi(\frac{\beta}{2}) | H | \Psi(\frac{\beta}{2}) \rangle}{\langle \Psi(\frac{\beta}{2}) | \Psi(\frac{\beta}{2}) \rangle}}. \quad (4.33)$$

Ce résultat, démontré ci-dessous, signifie en pratique que l'on peut estimer l'énergie $E(\beta = n\tau)$ du système, en calculant numériquement à l'itération n la quantité $\mathcal{E}_M(n)$. En guise d'illustration, nous avons tracé sur la figure 4.4 l'énergie $E(\beta)$ calculée de cette manière, pour un échantillon donné (sans moyennage sur le désordre). A l'instant initial $\beta = 0$, E coïncide avec l'énergie variationnelle $E^{VMC} = \langle \Psi^G | H | \Psi^G \rangle / \langle \Psi^G | \Psi^G \rangle$. Ensuite E décroît, d'abord rapidement puis plus lentement (en $1/\beta$ comme le montre l'insert), au fur et à mesure que l'opérateur d'évolution $e^{-\beta H}$ est appliqué sur $|\Psi^G\rangle$. Au bout d'un temps imaginaire β_{th} suffisamment long, que l'on peut appeler temps de thermalisation pour reprendre la terminologie introduite plus haut, E sature à la valeur de l'énergie E_0 du fondamental $|\Psi^0\rangle$ car $|\Psi^G\rangle$ a été projetée sur $|\Psi^0\rangle$. En moyennant $E(\beta)$ sur le plateau $\beta > \beta_{th}$, il nous est ainsi possible de calculer E_0 avec une précision meilleure que $\pm 0.001 E_F$, en utilisant typiquement 20000 marcheurs. Avec désordre, cette barre d'erreur extrêmement petite est toujours négligeable devant l'écart d'énergie typique entre deux échantillons présentant deux configurations différentes du potentiel aléatoire. C'est pourquoi dans la suite, lorsque nous calculerons des énergies moyennées sur le désordre, nous indiquerons comme barre d'erreur celle liée à la statistique du potentiel aléatoire et négligerons la barre d'erreur Monte Carlo.

Démonstration de l'équation (4.33)

Il est facile d'adapter la démonstration de (4.30) pour montrer que $E(\beta)$ s'écrit :

$$E(\beta) = \frac{\langle \Psi^G | H G^n | \Psi^G \rangle}{Z(\beta)} = \frac{\sum_{R, R'} E_R [(G^{is})^n]_{RR'} [\Psi^G(R')]^2}{\sum_{R, R'} [(G^{is})^n]_{RR'} [\Psi^G(R')]^2}.$$

Par ailleurs, les espérances des variables aléatoires $\mathcal{W}_i(n)$ et $\mathcal{W}_i(n) E_{\mathcal{R}_i(n)}$ valent par définition :

$$\overline{\mathcal{W}_i(n)} = \sum_{R, w} w P_n^R(w) = \sum_R Q_n^R \quad \text{et} \quad \overline{\mathcal{W}_i(n) E_{\mathcal{R}_i(n)}} = \sum_{R, w} w E_R P_n^R(w) = \sum_R E_R Q_n^R.$$

Or, d'après (4.24), sachant qu'on utilise à présent G^{is} , on a : $Q_n = (G^{is})^n Q_0$. De plus : $Q_0 = (\Psi^G)^2$ par hypothèse. Donc : $Q_n^R = \sum_{R'} [(G^{is})^n]_{RR'} [\Psi^G(R')]^2$. Ainsi : $\lim_{M \rightarrow \infty} \mathcal{E}_M(n) = \frac{\overline{\mathcal{W}_i(n) E_{\mathcal{R}_i(n)}}}{\overline{\mathcal{W}_i(n)}} = E(\beta)$. ■

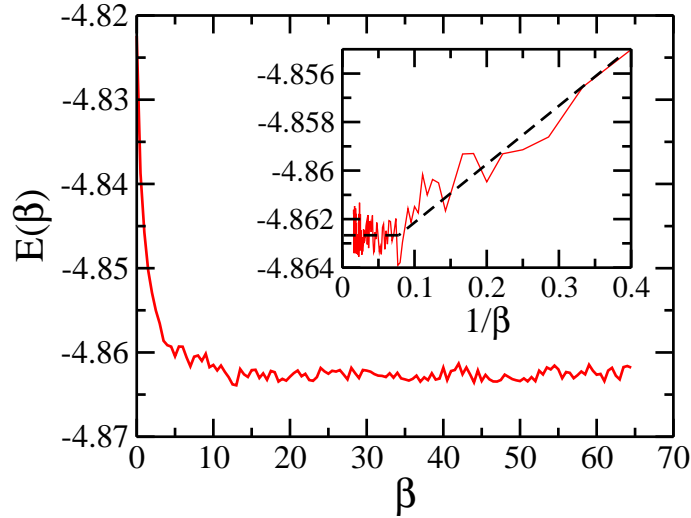


FIG. 4.4 – Courbe typique d'énergie $E(\beta)$ (en unité de $2N\pi v t$) calculée en GFMC pour un échantillon donné ($N = 36$ particules sans spin dans 24×36 sites, $r_s = 5$ et $k_{Fl} = 2.7$). 27000 marcheurs ont été utilisés. Insert : idem en fonction de $1/\beta$. Les droites en pointillés sont des fits linéaires servant à guider l'oeil.

Généralisation au calcul de moyennes quantiques mixtes

Il est aussi possible de calculer en GFMC la moyenne quantique dite mixte, $\langle O \rangle_{MX}(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi^G | O e^{-\beta H} | \Psi^G \rangle$, d'un observable O diagonal dans l'espace $\{R\}$ ($\langle R | O | R' \rangle = O_R \delta_{RR'}$). Pour ce faire, on introduit l'estimateur :

$$\mathcal{O}_M(n) = \sum_{i=1}^M \mathcal{W}_i(n) O_{\mathcal{R}_i(n)} / \sum_{i=1}^M \mathcal{W}_i(n), \quad (4.34)$$

et on montre exactement de la même manière que pour l'énergie que :

$$\boxed{\lim_{M \rightarrow \infty} \mathcal{O}_M(n) = \langle O \rangle_{MX}(\beta = n\tau)}. \quad (4.35)$$

Si O ne commute pas avec H , cette moyenne mixte est différente de la « vraie » valeur moyenne $\langle O \rangle(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi^G | e^{-\frac{\beta H}{2}} O e^{-\frac{\beta H}{2}} | \Psi^G \rangle$ qui est *a priori* la quantité physique intéressante. En particulier, par l'estimateur mixte (4.34) à grand n , on a accès à $\frac{\langle \Psi^G | O | \Psi^0 \rangle}{\langle \Psi^G | \Psi^0 \rangle}$ mais pas à $\langle O \rangle_0 = \frac{\langle \Psi^0 | O | \Psi^0 \rangle}{\langle \Psi^0 | \Psi^0 \rangle}$. Faute de mieux, certains auteurs ont tout-de-même utilisé des estimateurs mixtes pour évaluer des moyennes quantiques $\langle O \rangle_0$, l'idée étant que la fonction guide $|\Psi^G\rangle$, obtenue en VMC (§4.2), est normalement assez proche du fondamental $|\Psi^0\rangle$.

Calcul de moyennes quantiques par la technique de « Forward Walking »

Pour obtenir en GFMC la moyenne quantique non biaisée d'un observable O (toujours diagonal dans la base $\{R\}$), on utilise la technique de « Forward Walking » [43]. On peut en effet montrer (voir la thèse d'H. Falakshahi [80]) que l'estimateur à deux temps $n' > n$:

$$\mathcal{O}_M(n, n') = \sum_{i=1}^M \mathcal{W}_i(n') O_{\mathcal{R}_i(n')} / \sum_{i=1}^M \mathcal{W}_i(n'), \quad (4.36)$$

converge vers la moyenne quantique à deux temps :

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \mathcal{O}_M(n, n') = \frac{\langle \Psi(\beta' = (n' - n)\tau) | O | \Psi(\beta = n\tau) \rangle}{\langle \Psi(\beta') | \Psi(\beta) \rangle}, \quad (4.37)$$

où $|\Psi(\beta)\rangle = e^{-\beta H} |\Psi^G\rangle$. En particulier, pour $n' = 2n$, on a accès à $\langle O \rangle(2\beta) = \frac{\langle \Psi(\beta) | O | \Psi(\beta) \rangle}{Z(2\beta)}$ et donc à grand β , à la moyenne quantique de O dans l'état fondamental, $\langle O \rangle_0 = \frac{\langle \Psi^0 | O | \Psi^0 \rangle}{\langle \Psi^0 | \Psi^0 \rangle}$. Pour calculer en pratique cette valeur moyenne, on fait avancer les M marcheurs pendant n itérations, on relève à l'instant n leur position $\mathcal{R}_i(n)$ que l'on garde en mémoire, puis on les fait de nouveau avancer pendant n itérations. A la fin (*i.e.* à l'instant $2n$), on relève leur poids $\mathcal{W}_i(2n)$ et on calcule l'estimateur $\mathcal{O}_M(n, 2n)$ qui nous donne $\langle O \rangle_0$ à grand n . Lors de cette thèse, nous avons utilisé cette technique pour calculer des moyennes de quantités physiques ne commutant pas avec le Hamiltonien, comme la densité de particules ou la fonction de corrélation densité-densité statique. Précisons toutefois que les quantités calculées ainsi, par la technique de « Forward Walking », souffre d'un petit rapport signal sur bruit car la statistique est détériorée par les reconfigurations (naissances et morts de marcheurs) ayant lieu après la mesure de l'observable (*i.e.* de n à $2n$). La méthode RQMC que nous présenterons au §4.4 permet d'effectuer ce type de calcul avec une bien meilleure précision.

Ainsi, la méthode GFMC décrite jusqu'ici permet de calculer dans l'état fondamental exact, les valeurs moyennes de certains observables. Rappelons tout-de-même que nous avons fait l'hypothèse au §4.3.1 que tous les éléments de l'opérateur de Green G sont positifs. Sans cette hypothèse, l'algorithme fonctionnerait théoriquement mais en pratique, pour un système fermionique comme le nôtre, les estimateurs employés convergeraient mal, au point que la méthode deviendrait beaucoup trop imprécise. Dans la section suivante, nous expliquons comment procéder pour nous ramener à un opérateur G d'éléments positifs et ainsi éviter ce problème, appelé problème de signe des fermions.

4.3.3 Problème de signe et approximation Fixed Node

Les relations d'anticommutation pour les fermions imposent que les termes $H_{RR'}$ de notre Hamiltonien (3.2) aient des signes différents. Il en est donc inévitablement de même pour les $G_{RR'}^{is}$, si bien que l'hypothèse de positivité faite au §4.3.1 n'est *a priori* pas valable. En théorie, il est tout-de-même possible de définir le processus stochastique (4.27) en remplaçant $G_{RR'}^{is}$ par $|G_{RR'}^{is}|$ et en assignant la variable de signe aux marcheurs via la définition $b_{R'}^{is} = \text{sgn}(G_{RR'}^{is}) \sum_R |G_{RR'}^{is}|$. Formellement, l'algorithme GFMC ainsi construit fonctionne et permet de calculer l'état fondamental exact du système. Mais en pratique, le procédé conduit à un mauvais rapport signal sur bruit des divers estimateurs car, au cours du mouvement de diffusion, les poids des marcheurs régis par b^{is} changent constamment de signe. Il s'ensuit une grande incertitude sur les quantités calculées, rendant inefficace la méthode. Ce problème, appelé problème de signe des fermions, est en quelque sorte la plaie des méthodes Monte Carlo Quantique à température nulle (telle que la méthode GFMC mais aussi la méthode RQMC, ou encore la méthode DMC), lorsqu'il s'agit de traiter des systèmes fermioniques. Des algorithmes élaborés ont permis de le juguler dans le cas de petits systèmes contenant peu de particules (petites molécules) [64] mais ils restent inadaptés au problème général à N -corps.

Pour éviter ce problème de signe, nous utilisons une approximation usuelle en Monte Carlo Quantique, connue sous le nom d'approximation Fixed Node ou approximation de la surface nodale fixée⁹ [13]. Son implémentation sur réseau consiste à remplacer le Hamiltonien H par un autre Hamiltonien dont tous les termes sont de même signe [264]. Ainsi, nous définissons un nouvel hamiltonien H^{FN} à partir du «vrai» hamiltonien H et d'une fonction guide Ψ^G , par :

$$H_{RR'}^{FN} = \begin{cases} H_{RR'} & \text{si } R \neq R' \text{ et } G_{RR'}^{is} > 0 \\ 0 & \text{si } R \neq R' \text{ et } G_{RR'}^{is} < 0 \\ H_{RR} + \sum_{R''/G_{R''R}^{is} < 0} \Psi^G(R'') H_{R''R} \frac{1}{\Psi^G(R)} & \text{si } R = R' \end{cases}. \quad (4.38)$$

Cela signifie que les liens $R \rightarrow R'$ tels que $G_{RR'}^{is} < 0$ sont coupés et remplacés par l'ajout d'un potentiel effectif diagonal dans H_{RR} . De cette manière, tous les termes de H^{FN} sont de même signe : il n'y a donc plus de problème de signe! Notons que la fonction d'onde Ψ^G de (4.38) peut être théoriquement différente de la fonction d'onde d'essai utilisée pour définir l'opérateur «Importance Sampling» G^{is} au 4.3.1. Néanmoins, dans la suite, nous les prendrons égales, ce qui explique pourquoi nous avons utilisé la notation Ψ^G comme précédemment.

En remplaçant le Hamiltonien H par le Hamiltonien H^{FN} dépendant de Ψ^G , la méthode GFMC exacte devient variationnelle. En effet, on peut se convaincre facilement à partir de la définition de H^{FN} , qu'au cours du processus stochastique, l'amplitude de la fonction d'onde Ψ^G est optimisée en chaque point de l'espace de Hilbert, en maintenant constant son signe (la condition $G_{RR'}^{is} > 0$ étant équivalente à $\Psi^G(R)\Psi^G(R') > 0$), d'où d'ailleurs le nom d'approximation Fixed Node. On peut même montrer que le fondamental Ψ_0^{FN} de H^{FN} , calculé par la méthode GFMC dans l'approximation Fixed Node, coïncide avec la fonction d'onde de plus basse énergie, ayant la même structure nodale que la fonction guide variationnelle Ψ^G [264]. En particulier, si Ψ^G a été choisie de sorte à avoir la même surface nodale que le vrai fondamental Ψ^0 alors l'algorithme nous fournit exactement Ψ^0 . Mais en général, ce n'est pas le cas et la méthode reste approximative. Il se trouve de surcroît que l'approximation faite est difficile à contrôler car elle n'a pas d'interprétation physique simple. Toutefois, l'expérience montre que les algorithmes Monte Carlo Quantique dans l'approximation Fixed Node sont extrêmement précis. Par exemple, ils ont permis de tabuler la plupart des énergies de corrélation utilisées comme point de départ dans les méthodes de calcul *ab initio* de systèmes électroniques. L'approximation Fixed Node s'est donc avérée être une bonne approximation.

4.3.4 Limites du GFMC

En échantillonnant l'espace des configurations avec la méthode de reconfiguration stochastique et le procédé d'Importance Sampling, tout en utilisant l'approximation Fixed Node, l'algorithme GFMC permet de calculer avec une grande précision l'énergie du système. En outre, comme cela est schématisé sur la figure 4.4, il est possible d'effectuer des mesures de l'énergie au fur et à mesure d'un même «run». Cela permet de suivre l'évolution de l'énergie

⁹La surface nodale d'une fonction d'onde à N corps Ψ est le lieu des points de l'espace $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ où Ψ s'annule en changeant de signe.

du système vers l'énergie du fondamental. Ainsi, en ce qui concerne le calcul de l'énergie, l'algorithme GFMC est très puissant. C'est pourquoi il a déjà été utilisé avec succès pour résoudre notamment des problèmes de chimie quantique ou pour tabuler des méthodes dites *ab-initio*.

Cependant, si l'on transpose la technique utilisée en GFMC pour le calcul de l'énergie, à d'autres observables ne commutant pas avec le Hamiltonien, nous ne pouvons estimer qu'une moyenne mixte (§4.3.2). Le calcul de « vraies » valeurs moyennes est possible par la technique de Forward Walking mais s'avère imprécis. Dans la section suivante, nous présentons un autre algorithme, similaire au GFMC, qui a l'avantage de permettre le calcul, avec une bonne précision, de valeurs moyennes et également de fonctions de réponse.

4.4 Approche en terme d'intégrale de chemin : RQMC

Avec le GFMC, nous avons vu à la section précédente une méthode stochastique permettant de calculer des observables dans l'état fondamental, via l'implémentation de l'équation de Schrödinger discrétisée $|\Psi_{n+1}\rangle = G|\Psi_n\rangle$. Nous proposons ici une seconde méthode, la méthode Reptation Quantum Monte Carlo (RQMC), qui utilise au contraire le formalisme d'intégrales de chemins de la mécanique quantique. Cette approche permet d'exploiter la dynamique du processus de diffusion de l'équation de Schrödinger et ainsi de calculer naturellement des fonctions de corrélation en temps imaginaire. Introduit en 1999 par S. Baroni et S. Moroni [25], le RQMC n'a pour l'instant été exploité que dans le continu par C. Pierleoni et D. Ceperley [193]. Lors de cette thèse, nous avons participé à sa première implémentation sur réseau. Nous avons d'abord bien sûr vérifié que GFMC et RQMC donnent les mêmes résultats (aux barres d'erreur statistiques près) pour l'énergie ou la densité de particules. Puis nous avons mis à l'épreuve le RQMC en ce qui concerne le calcul de fonctions de réponse densité-densité et de susceptibilités de spin. Nos premiers résultats, encore peu approfondis et en marge de la problématique de cette thèse, ne sont pas présentés dans ce manuscrit (à l'exception d'une figure d'illustration).

Les méthodes GFMC et RQMC étant duales l'une de l'autre, certains concepts introduits lors de l'étude du GFMC se retrouvent dans le RQMC. En particulier, nous allons travailler à nouveau avec l'opérateur de Green « Importance Sampling » :

$$G_{RR'}^{is} = \delta_{RR'} - \tau \Psi^G(R) H_{RR'} \frac{1}{\Psi^G(R')} . \quad (4.39)$$

Pour contourner le problème de signe des fermions auquel le RQMC n'échappe pas, l'algorithme est en pratique implémenté dans l'approximation Fixed Node, en remplaçant H par H^{FN} (voir §4.3.3). Dans la suite, nous nous le précisons pas (on notera juste H).

4.4.1 Principe du RQMC et comparaison avec le GFMC

En GFMC, le fondamental est obtenu en appliquant, itération après itération, l'opérateur d'évolution $e^{-\tau H}$ sur une fonction guide de départ. Pour ce faire, l'algorithme garde en mémoire la position des marcheurs à la dernière itération et stocke globalement l'information sur leur passé dans un poids. Le RQMC procède différemment en utilisant le formalisme d'intégrales de chemin, permettant l'écriture de quantités physiques sous la forme de moyennes, pondérées par un poids approprié, sur un ensemble de chemins (pour une introduction, voir [299]). En

pratique, comme cela est schématisé sur la figure 4.5, le RQMC conserve en mémoire toute l'histoire en temps imaginaire d'un seul et unique marcheur. La projection sur le fondamental se fait ensuite en explorant l'espace des chemins dans \mathcal{H} et en se dirigeant préférentiellement vers ceux d'action minimale. Dans la suite, nous expliquons comment construire un chemin en RQMC, comment lui faire explorer l'espace des chemins puis comment en déduire des valeurs moyennes quantiques dans l'état fondamental.

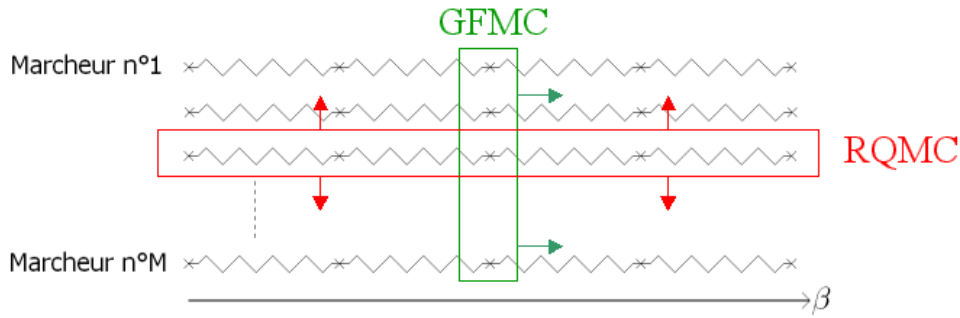


FIG. 4.5 – Comparaison des approches stochastiques utilisées en GFMC et RQMC pour l'exploration au cours du temps de l'espace de Hilbert. Chaque croix correspond à une configuration $|R\rangle = |r_1, \dots, r_N\rangle$ des N électrons dans le système, les « zigzags » symbolisent les sauts des marcheurs et β est le temps imaginaire.

Définition de la matrice stochastique A^{rqmc} et propriétés

Les méthodes GFMC et RQMC diffèrent notamment par la manière dont est exploré l'espace de Hilbert par les marcheurs. En GFMC, le mouvement des marcheurs dans \mathcal{H} est imposé par la matrice stochastique A^{gfmtc} définie par : $A_{RR'}^{gfmtc} = \frac{G_{RR'}^{is}}{b_{R'}^{is}} = \frac{G_{RR'}^{is}}{1 - \tau E_{R'}}$, où E_R est l'énergie locale au point R (équation (4.17)). En RQMC, nous introduisons une autre matrice stochastique, A^{rqmc} , pour engendrer le mouvement des marcheurs :

$$\boxed{A_{RR'}^{rqmc} = G_{RR'}^{is} + \tau E_R \delta_{RR'}}. \quad (4.40)$$

On vérifie facilement que :

- $A^{rqmc} = A^{gfmtc}$ quand $\tau \rightarrow 0$. En pratique, puisque nous travaillons justement à la limite continue $\tau \rightarrow 0$, cela signifie que l'avancée d'un marcheur se fait en fait de la même manière en GFMC qu'en RQMC, la seule différence étant qu'en RQMC, le marcheur ne transporte pas de poids.
- A^{rqmc} possède la propriété de balance détaillée (4.5) pour $(\Psi^G)^2$. Ainsi $(\Psi^G)^2$ est la distribution d'équilibre du processus markovien défini par A^{rqmc} . On peut donc l'échantillonner en appliquant suffisamment de fois A^{rqmc} . Cette méthode constitue une alternative à l'algorithme Metropolis (§4.2.1) pour l'échantillonnage de $(\Psi^G)^2$, nécessaire en VMC mais aussi au début du GFMC et, nous le verrons, du RQMC.
- G^{is} peut se déduire de A^{rqmc} dans la limite $\tau \rightarrow 0$ par :

$$G_{RR'}^{is} = A_{RR'}^{rqmc} (1 - \tau E_R \delta_{RR'}) + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (4.41)$$

Calcul de la fonction de partition par une intégrale de chemin

Expliquons maintenant comment procède le RQMC pour calculer la pseudo-fonction de partition $Z(\beta) = \langle \Psi^G | e^{-\beta H} | \Psi^G \rangle$, de laquelle se déduisent les valeurs moyennes quantiques.

D'après (4.30) et (4.41), elle s'écrit pour $\beta = n\tau$:

$$Z(\beta) = \sum_{R_0, \dots, R_n} \prod_{i=1}^n G_{R_i R_{i-1}}^{is} [\Psi^G(R_0)]^2 = \sum_{R_0, \dots, R_n} \left(\prod_{i=1}^n A_{R_i R_{i-1}}^{rqmc} [\Psi^G(R_0)]^2 \prod_{i=1}^n (1 - \tau E_{R_i} \delta_{R_i R_{i-1}}) \right).$$

Introduisons à ce stade les notations suivantes :

- $X = (R_0, \dots, R_n)$: X désigne un chemin dans l'espace de Hilbert.
- $P(X) = \prod_{i=1}^n A_{R_i R_{i-1}}^{rqmc} [\Psi^G(R_0)]^2$. En prenant égale à $[\Psi^G(R_0)]^2$ la probabilité qu'un marcheur soit initialement en R_0 (comme c'est le cas pour le GFMC), $P(X)$ s'interprète comme la probabilité pour un marcheur régi par A^{rqmc} d'emprunter le chemin X .
- $S(X) = \tau \sum_{i=1}^n E_{R_i}$. $S(X)$ peut être vue comme l'action associée à un chemin X et permet d'écrire : $\prod_{i=1}^n (1 - \tau E_{R_i} \delta_{R_i R_{i-1}}) = e^{-S(X)}$, quand $\tau \rightarrow 0$.

Avec ces notations, Z devient une « intégrale » de chemin (en pratique sur plusieurs milliers de variables) :

$$\boxed{Z(\beta) = \sum_X P(X) e^{-S(X)}}. \quad (4.42)$$

Notons que cette relation est aussi valable en GFMC, dans la limite $\tau \rightarrow 0$, en définissant $P(X) = \prod_i A_{R_i R_{i-1}}^{gfmc} [\Psi^G(R_0)]^2$, puisque dans cette limite $A^{rqmc} = A^{gfmc}$. Néanmoins, les deux méthodes procèdent différemment pour calculer Z et les valeurs moyennes qui s'en déduisent. En GFMC, on échantillonne $P(X)$ grâce à A^{gfmc} et on traite $e^{-S(X)}$ comme un poids avec lequel on fait les moyennes. L'idée de la méthode RQMC est d'échantillonner directement des chemins X distribués selon $\Pi(X) = P(X) e^{-S(X)}$. Dans ce cas, contrairement au GFMC, la statistique exploitée pour calculer des valeurs moyennes est faite sur un seul marcheur dont on retient toute l'histoire c'est-à-dire tout le chemin parcouru pendant le temps β . D'un point de vue pratique, il est donc nécessaire de garder en mémoire tout le chemin parcouru par le marcheur.

Passage en temps continu

La méthode RQMC n'étant valable que dans la limite $\tau \rightarrow 0$, il est pratique de travailler directement dans la limite continue pour s'affranchir du paramètre τ . Comme $A^{rqmc} = A^{gfmc}$ quand $\tau \rightarrow 0$, l'avancée des marcheurs dans \mathcal{H} en temps continu se fait de la même manière en RQMC qu'en GFMC : on calcule le temps de latence du marcheur à sa position R d'après (4.28) puis on l'oblige à sauter sur une nouvelle position $R' \neq R$ avec la probabilité $A_{R'R}^{rqmc} / (1 - A_{RR}^{rqmc})$. Ainsi, nous pouvons échantillonner $P(X)$ en temps continu.

En travaillant à la limite continue, les expressions analytiques des différentes quantités physiques deviennent plus agréables à manipuler. En particulier, l'action définie pour $\tau \ll 1$ par $S(X) = \tau \sum_i E_{R_i}$ s'écrit : $S(X) = \int_0^\beta dt E_{X(t)}$, où β est la longueur totale du chemin et $X(t)$ la position dans \mathcal{H} à laquelle se trouve le marcheur à l'instant t .

Dans la section suivante, nous expliquons comment échantillonner des chemins selon $\Pi(X)$.

4.4.2 Algorithme utilisé pour l'échantillonnage des chemins

Nous avons vu au 4.2.1 que toute distribution de probabilité dans un espace de configuration fini \mathcal{C} peut être échantillonnée en utilisant l'algorithme de Metropolis. Nous utilisons donc cette méthode pour $\Pi(X)$, sachant qu'ici, notre espace de configuration \mathcal{C} est l'ensemble des chemins X de l'espace de Hilbert \mathcal{H} . On échantillonne d'abord $P(X)$ à l'aide de $A^{r_{qmc}}$ puis on se sert de la distribution obtenue comme base pour un algorithme Metropolis où $e^{-S(X)}$ est utilisé dans le critère d'acceptation/rejet.

Chaque chemin $X = (R_0, \dots, R_n)$ de longueur β est paramétrisé par une variable temporelle t telle que $\beta_0 \leq t \leq \beta_f$, où β_0 et β_f sont les dates de «départ» et d'«arrivée» du marcheur ($\beta = \beta_f - \beta_0$). De plus, comme nous travaillons en temps continu, on stocke pour chaque position R_i du marcheur la date β_i d'arrivée en ce site et le temps t_{R_i} passé sur ce site ($t_{R_i} = \beta_{i+1} - \beta_i$). Ces notations sont illustrées sur la figure 4.6.

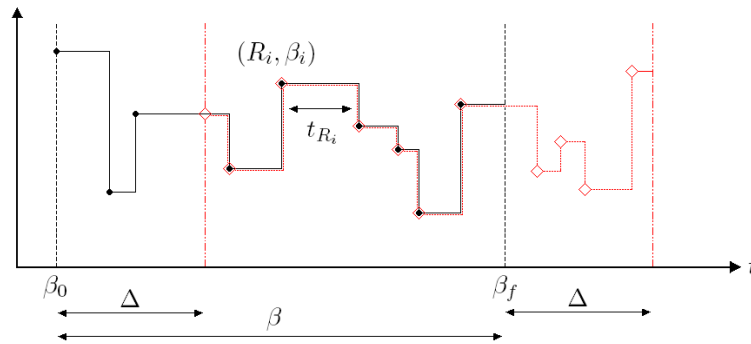


FIG. 4.6 – Schématisation d'un chemin en RQMC. En trait continu noir : paramétrisation d'un chemin X . L'ensemble $\{R_i, \beta_i\}$ des positions du marcheur et des dates d'arrivée sur chacune d'elles caractérise entièrement ce chemin. En pointillé rouge : chemin X' construit à partir de X par l'algorithme « reptation ».

Les principales étapes de l'algorithme RQMC sont alors les suivantes :

1. On génère à l'aide de $A^{r_{qmc}}$ un chemin de longueur β distribué selon $(\Psi^G)^2$.
2. On construit un chemin X' de longueur β à partir de X en faisant avancer le marcheur pendant un temps Δ dans une certaine direction. X' est distribué selon $P(X)$. Cette étape est représentée sur la figure 4.6 où X est le chemin en trait continu noir et X' le chemin en pointillés rouges.
3. Le chemin X' est accepté avec la probabilité $\min(1, e^{-(S(X')-S(X))})$. Ainsi, si $e^{-(S(X')-S(X))} > 1$, on accepte le chemin X' . Sinon, on l'accepte avec la probabilité $e^{-(S(X')-S(X))}$. S'il est refusé, on conserve le chemin X pour l'itération suivante et de plus, on change la direction de propagation du marcheur. On échantillonne donc préférentiellement par cette méthode les chemins dans \mathcal{H} qui minimisent l'action.
4. On relève ce qui est nécessaire pour effectuer des calculs d'observables physiques (voir 4.4.3).
5. On répète les étapes 2, 3 et 4 jusqu'à acquérir une statistique suffisante. Dans la suite, on note N_{MC} le nombre de pas Monte Carlo effectués.
6. A la fin de la simulation Monte Carlo, on calcule les différents estimateurs des quantités physiques avec leur barre d'erreur.

Nous attirons l'attention sur le fait que dans le procédé décrit ci-dessus, le marcheur change de direction à chaque rejet. Ainsi, cet algorithme est appelé algorithme « bounce » [193] et

représente une amélioration par rapport à l'algorithme initial «reptation» introduit dans [25]. Nous avons vérifié que cet algorithme permet bien d'échantillonner des chemins selon $\Pi(X)$.

Dans la remarque ci-dessous, nous discutons du choix des paramètres β , Δ et N_{MC} puis dans la section suivante, nous explicitons les formules permettant de calculer des valeurs moyennes d'observables en RQMC.

Remarque : choix des paramètres β , Δ et N_{MC}

Il apparaît dans cet algorithme RQMC trois paramètres, β , Δ et N_{MC} , qui doivent être choisis avant d'entreprendre une simulation.

- N_{MC} est le nombre de pas Monte Carlo c'est-à-dire le nombre de fois qu'étant donné un chemin X , nous proposons un chemin X' , accepté ou non. En pratique, N_{MC} est décomposé selon $N_{MC} = N_{therm} + N_{data}$, où N_{therm} est le nombre de pas nécessaires à la thermalisation du Metropolis (voir §4.2.1) et N_{data} est le nombre de pas sur lesquels nous calculons les estimateurs des quantités physiques. Comme l'erreur faite par un estimateur décroît en $1/\sqrt{N_{data}}$, on choisit N_{data} de sorte à assurer un juste équilibre entre minimisation de l'erreur et temps de calcul.
- β est la « taille » des chemins échantillonnés. Physiquement, il correspond au temps imaginaire pendant lequel on applique l'opérateur d'évolution $e^{-\beta H}$ à la fonction guide Ψ^G . Il doit donc être choisi assez grand pour que le système soit projeté dans le fondamental, mais pas trop car sinon le temps de calcul explose. Pour avoir un ordre de grandeur du β à prendre pour atteindre le fondamental, il est utile de commencer par effectuer une simulation en GFMC.
- Δ correspond à un pas de temps RQMC, c'est-à-dire à la « longueur » rajoutée à une extrémité d'un chemin X et retirée à l'autre, pour passer à un chemin X' . L'effet de ce paramètre est sans doute le plus délicat à estimer. Typiquement, si Δ est très grand, les chemins sont presque systématiquement refusés : il faut donc effectuer un nombre gigantesque de pas Monte Carlo pour obtenir des chemins décorrélés. À l'inverse, si Δ est très petit, les chemins sont presque toujours acceptés et la longueur de corrélation du processus markovien sous-jacent augmente de manière radicale. Ainsi, le paramètre Δ n'influence pas le résultat obtenu mais sa barre d'erreur.

4.4.3 Calcul d'observables en RQMC

Grâce au formalisme d'intégrales de chemin développé pour le calcul de Z au 4.4.1, nous allons pouvoir écrire presque immédiatement les valeurs moyennes quantiques d'observables.

Exemple du calcul de l'énergie du fondamental

L'énergie $E(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi(\frac{\beta}{2}) | H | \Psi(\frac{\beta}{2}) \rangle$ du système dans l'état $|\Psi(\frac{\beta}{2})\rangle = e^{-\frac{\beta H}{2}} |\Psi^G\rangle$ est donnée par l'intégrale de chemin suivante :

$$E(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_X E_{X(\beta)} \Pi(X) \equiv \langle E_{X(\beta)} \rangle_{\Pi}, \quad (4.43)$$

où $X(\beta)$ est la position du marcheur à l'extrémité β et $\langle \cdot \rangle_{\Pi}$ désigne la valeur moyenne sur les chemins X distribués selon $\Pi(X)$ ¹⁰. En particulier, pour des temps de projection β assez grands, on obtient l'énergie E_0 du fondamental¹¹. Le choix de l'estimateur de l'énergie est

¹⁰On a aussi $E(\beta) = \langle E_{X(0)} \rangle_{\Pi}$ où $X(0)$ est la position du marcheur à la première extrémité. Le mieux est donc de calculer $E(\beta)$ en moyennant sur les deux extrémités $E(\beta) = \frac{1}{2} \langle E_{X(0)} + E_{X(\beta)} \rangle_{\Pi}$.

¹¹Rappelons que dans le cadre de l'approximation Fixed Node, nous calculons en réalité l'énergie du fondamental Ψ_0^{FN} de H^{FN} (voir 4.3.3).

trivial puisque l'algorithme RQMC décrit au 4.4.2 permet d'échantillonner des chemins selon $\Pi(X)$:

$$\langle E_{X(\beta)} \rangle_{MC} \equiv \frac{1}{N_{data}} \sum_i E_{X_i(\beta)}, \quad (4.44)$$

c'est-à-dire la moyenne arithmétique des énergies locales mesurées au bout des N_{data} chemins X_i échantillonnés. En effet, d'après la loi des grands nombres (4.13), on a :

$$\boxed{\langle E_{X(\beta)} \rangle_{MC} \underset{N_{data} \rightarrow \infty}{\approx} \langle E_{X(\beta)} \rangle_{\Pi} \pm \frac{\sigma}{\sqrt{N_{data}/N_c}}}, \quad (4.45)$$

où σ^2 est la variance des variables aléatoires $E_{X_i(\beta)}$ et N_c est le nombre de pas Monte Carlo nécessaires pour renouveler entièrement un chemin (temps de corrélation).

Démonstration de l'équation (4.43)

Il suffit de remarquer pour $\beta = n\tau$ que $E(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi^G | HG^n | \Psi^G \rangle$ car H et G commutent puis d'écrire, comme nous l'avons fait au §4.3.2 :

$\langle \Psi^G | HG^n | \Psi^G \rangle = \sum_{R, R'} E_R [(G^{is})^n]_{RR'} [\Psi^G(R')]^2 = \sum_X E_{X(n)} P(X) e^{-S(X)}$, où $X(n)$ est le dernier point de X . En prenant la limite $\tau \rightarrow 0$, on obtient (4.43). ■

Généralisation au calcul d'observables diagonaux

L'avantage de la méthode RQMC est de permettre le calcul de valeurs moyennes d'observables, avec une « bonne » précision, même si celles-ci ne commutent pas avec le Hamiltonien. Comme nous l'avons vu au 4.3.2, ce type de calcul est particulièrement délicat en GFMC.

Considérons un observable O que l'on suppose diagonal dans la base $\{R\}$. On note $\langle R | O | R' \rangle = O_R \delta_{RR'}$ et $\langle O \rangle(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi^G | e^{-\frac{\beta H}{2}} O e^{-\frac{\beta H}{2}} | \Psi^G \rangle$ la valeur moyenne quantique de O dans l'état $|\Psi(\frac{\beta}{2})\rangle = e^{-\frac{\beta H}{2}} | \Psi^G \rangle$. Le formalisme d'intégrales de chemin permet d'écrire directement :

$$\boxed{\langle O \rangle(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_X O_{X(\beta/2)} \Pi(X) \equiv \langle O_{X(\beta/2)} \rangle_{\Pi}}, \quad (4.46)$$

mais on peut bien sûr le vérifier explicitement comme nous l'avons fait pour le calcul de $E(\beta)$. En pratique, pour calculer $\langle O \rangle(\beta)$, on génère des chemins X selon $\Pi(X)$. Pour chacun de ces chemins X de longueur β , on relève la valeur $O_{X(\beta/2)}$ de O en leur milieu. On estime ensuite $\langle O_{X(\beta/2)} \rangle_{\Pi}$ en moyennant les $O_{X(\beta/2)}$ sur les chemins X échantillonnés.

Ce raisonnement peut également être appliqué pour calculer la valeur moyenne quantique $\langle O(\tau) \rangle(\beta)$ de $O(\tau) = e^{\tau H} O e^{-\tau H}$ dans l'état $|\Psi(\frac{\beta}{2})\rangle = e^{-\frac{\beta H}{2}} | \Psi^G \rangle$:

$$\boxed{\langle O(\tau) \rangle(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \langle \Psi^G | e^{-(\frac{\beta}{2}-\tau)H} O e^{-(\frac{\beta}{2}+\tau)H} | \Psi^G \rangle = \langle O_{X(\frac{\beta}{2}+\tau)} \rangle_{\Pi}}. \quad (4.47)$$

Ce résultat est illustré par la figure 4.7(a), où nous avons tracé $\langle O(\tau) \rangle(\beta)$ en fonction de τ à β fixé, pour $O = H^{int}$, la partie d'interaction du Hamiltonien H de notre modèle (3.2). Outre la symétrie $\tau \rightarrow -\tau$, il est d'intéressant de remarquer que l'évolution de $\langle H^{int}(\tau) \rangle(\beta)$ se divise en une phase transitoire pour $\frac{\beta}{2} - \beta_{stat} \leq |\tau| \leq \frac{\beta}{2}$ (extrémités du chemin) et en une phase stationnaire pour $|\tau| \leq \frac{\beta}{2} - \beta_{stat}$ (milieu du chemin), où β_{stat} est un temps représenté

sur la figure 4.7. Cela se comprend facilement en interprétant β_{stat} comme le temps nécessaire à la projection de la fonction guide Ψ^G sur le fondamental Ψ_0^{FN} . En pratique, on l'estime en traçant préalablement l'énergie $E(\beta)$ en GFMC et en relevant le temps à partir duquel elle sature (voir la figure 4.4). Il ressort de cette figure que, pour calculer des valeurs moyennes $\langle O \rangle(\beta) = \langle O(\tau = 0) \rangle(\beta)$ avec une bonne précision, on a tout intérêt à moyenner $\langle O(\tau) \rangle(\beta)$ sur le plateau central $|\tau| \leq \frac{\beta}{2} - \beta_{stat}$.

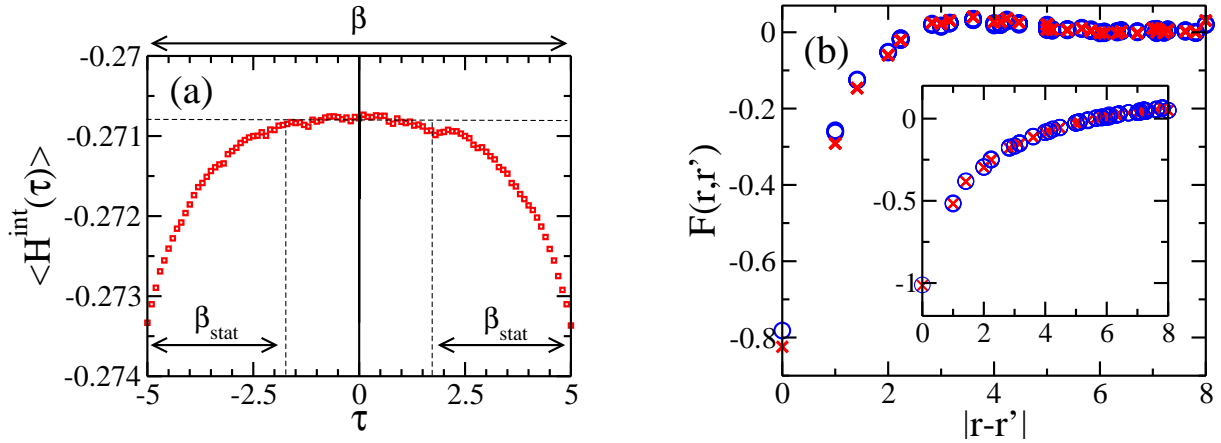


FIG. 4.7 – (a) Energie d'interaction $\langle H^{int}(\tau) \rangle(\beta)$, calculée en RQMC, en fonction du temps imaginaire τ , à $\beta = 10$ fixé, pour un système de $N = 9$ particules sans spin dans 18×18 sites, à $r_s = 1$ et $1/k_F l = 0$. (b) Fonction de réponse densité-densité $F(r, r')$ (tracée en fonction de $|r - r'|$) d'un système 2D de fermions ($N = 9$ particules sans spin dans 18×18 sites) sans interaction et sans désordre, calculée par une méthode exacte (croix rouge) et par l'algorithme RQMC (cercles bleus). Insert : idem avec des bosons. L'erreur RQMC présente pour les fermions disparaît pour les bosons.

Calcul de fonctions de corrélation et de fonctions de réponse

Le calcul de fonctions de corrélation en temps imaginaire et à température nulle $\langle TO(\tau)O'(\tau') \rangle(\beta) = \frac{1}{Z} \langle \Psi(\frac{\beta}{2}) | TO(\tau)O'(\tau') | \Psi(\frac{\beta}{2}) \rangle$ (où T désigne le produit ordonné en temps) devient tout aussi naturel en RQMC, grâce au formalisme d'intégrale de chemin :

$$\langle TO(\tau)O'(\tau') \rangle(\beta) = \left\langle O_{X(\frac{\beta}{2}+\tau)} O'_{X(\frac{\beta}{2}+\tau')} \right\rangle_{\Pi}, \quad (4.48)$$

toujours pour des observables O et O' diagonaux dans la base $\{R\}$ et en notant $O(\tau) = e^{\tau H} O e^{-\tau H}$. De plus, il est possible d'en déduire des fonctions de réponse par le théorème fluctuation-dissipation. En effet, si λV est une petite perturbation au Hamiltonien H , la fonction de réponse de l'observable O s'écrit :

$$\left. \frac{d \langle O \rangle_{\lambda}}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau [\langle TV(\tau)O(0) \rangle_0 - \langle V(\tau) \rangle_0 \langle O(0) \rangle_0], \quad (4.49)$$

où $\langle \cdot \rangle_{\lambda}$ désigne la moyenne quantique dans l'état fondamental du Hamiltonien perturbé $H + \lambda V$ et $\langle \cdot \rangle_0$ celle dans l'état fondamental de H . Pour calculer cette fonction de réponse, on intègre la fonction de corrélation $\langle TV(\tau)O(0) \rangle(\beta) - \langle V(\tau) \rangle(\beta) \cdot \langle O(0) \rangle(\beta)$ (calculée par (4.47) et (4.48)) sur toute la longueur β des chemins échantillonnés, en s'assurant d'une part que β est pris assez grand de sorte qu'une portion de chaque chemin soit effectivement projeté

dans l'état fondamental et d'autre part, que la contribution à l'intégrale de la fonction de corrélation aux extrémités des chemins, non projetées dans l'état fondamental, est négligeable. En guise d'illustration, nous avons tracé sur la figure 4.7 (b) la fonction de réponse densité-densité¹² de notre modèle (3.2) sans spin, calculée ainsi en RQMC (cercles), en l'occurrence sans interaction et sans désordre (mais l'ajout de l'un de ces ingrédients ne change rien au calcul Monte Carlo en soi). On retrouve l'allure attendue de ce qu'on appelle les oscillations de Friedel, même si les oscillations proprement dites sont peu visibles car le système considéré est trop petit. Le résultat RQMC diffère toutefois légèrement du résultat exact (croix) à cause de l'approximation Fixed Node (voir la section suivante).

4.4.4 Limites du RQMC

Puisque nous avons encore peu exploité le RQMC, il nous est difficile d'en faire ici une analyse critique. Nous souhaitons toutefois formuler quelques remarques.

L'avantage théorique évident du RQMC par rapport au GFMC est le calcul naturel de valeurs moyennes temporelles, de fonctions de corrélation et de fonctions de réponse. En contrepartie, il est nécessaire de fixer au début de la simulation le temps total de projection β . Ainsi, en une simulation, on obtient par exemple pour l'énergie une valeur $E(\beta)$, là où le GFMC nous fournit toute la courbe en temps imaginaire de 0 à β . Pour ce type de calculs, le RQMC est donc moins performant que le GFMC, d'une part parce qu'il n'y a pas moyen de savoir, en une simulation, si le fondamental a bien été atteint, et d'autre part parce qu'à précision égale, le RQMC est plus coûteux en temps de calcul. Un autre défaut, plus subtil, du RQMC est lié à l'approximation Fixed Node (§4.3.3) lorsqu'il s'agit de traiter des systèmes fermioniques. L'algorithme permet certes de calculer des fonctions de corrélation et des fonctions de réponse mais le fait de remplacer H par H^{FN} biaise la dynamique des chemins, exploitée dans le calcul de ces grandeurs à deux temps. L'erreur ainsi introduite s'ajoute à celle due au fait que la fonction guide n'est pas projetée sur le fondamental Ψ^0 de H mais sur le fondamental Ψ_0^{FN} de H_{FN} . Ce point est illustré sur la figure 4.7 (b). Nous y avons tracé la fonction de réponse densité-densité spatiale de notre modèle (3.2) sans interaction ($r_s = 0$), calculée soit en RQMC dans l'approximation Fixed Node, soit par une méthode de diagonalisation exacte (algorithme Lanczos). La fonction guide Ψ^G initiant le RQMC a été prise égale au fondamental exact Ψ^0 de H , facilement calculable sans interaction, si bien que l'on est assuré que $\Psi_0^{FN} = \Psi_0$ et donc que l'algorithme RQMC projète Ψ^G sur le bon fondamental Ψ_0 . Toutefois, on constate que l'algorithme RQMC ne reproduit pas tout-à-fait les résultats trouvés par la méthode exacte. Nous attribuons cette erreur à l'approximation Fixed Node qui biaise le calcul de la fonction de réponse, même si $\Psi_0^{FN} = \Psi_0$. Pour le prouver, nous avons tracé en insert la même fonction de réponse pour un système bosonique, échappant au problème de signe et donc à l'approximation Fixed Node : nous trouvons dans ce cas un accord parfait entre les résultats exacts et les résultats RQMC (sans Fixed Node). Cet exemple simple relativise la performance du RQMC quant aux calculs de fonctions de réponse de systèmes fermioniques.

Dans le chapitre suivant, nous mettons à profit les méthodes VMC et GFMC pour l'étude des propriétés de localisation de notre modèle introduit au chapitre 3.

¹²Celle-ci est définie par $F(\vec{r}, \vec{r}') = \left. \frac{\delta \rho_{\vec{r}}}{\delta v_{\vec{r}'}} \right|_{v_{\vec{r}'}=0}$, où $\rho_{\vec{r}} = \frac{1}{N} c_{\vec{r}}^\dagger c_{\vec{r}}$ est l'opérateur densité en \vec{r} et $v_{\vec{r}'}$ est l'amplitude de désordre en \vec{r}' (avec les notations ci-dessus, $O = \rho_{\vec{r}}$ et $\lambda V = v_{\vec{r}'} \rho_{\vec{r}'}$).

Chapitre 5

Notre approche pour étudier la localisation d'Anderson en présence d'interaction

Sommaire

| | |
|--|------------|
| Résumé du chapitre 5 | 118 |
| 5.1 Choix des fonctions guides sous la forme Slater-Jastrow | 119 |
| 5.1.1 Fonction Jastrow et condition de « cusp » | 120 |
| 5.1.2 Fonction guide « Liquide » | 121 |
| 5.1.3 Fonction guide « Hartree » | 121 |
| 5.2 Comment mesurer les propriétés de localisation du gaz 2D ? | 125 |
| 5.2.1 Conductance de Thouless comme mesure de localisation | 126 |
| 5.2.2 Lien avec le coefficient de diffusion en temps imaginaire | 128 |
| 5.2.3 Discussion du rôle de l'approximation Fixed Node | 131 |
| 5.2.4 Lois de distribution des coefficients de diffusion | 133 |
| 5.3 Extrapolation à la limite thermodynamique : théorie d'échelle | 134 |
| 5.3.1 Dépendance du coefficient de diffusion avec la taille du système | 135 |
| 5.3.2 Calcul de la fonction d'échelle β | 136 |
| 5.3.3 Extraction de la longueur de localisation ξ à partir de $\beta(g)$ | 139 |

Résumé du chapitre 5

Nous expliquons dans ce chapitre comment procéder pour étudier la localisation d'Anderson en présence d'interactions électroniques, à l'aide de nos algorithmes Monte Carlo Quantiques (§4). Comme ceux-ci calculent la fonction d'onde de plus basse énergie ayant la même structure nodale que la fonction guide de départ Ψ^G , il est essentiel de choisir Ψ^G avec minutie. Nous la prenons sous la forme d'un produit Slater \times Jastrow (§5.1) où le Jastrow, toujours positif, prend en compte la répulsion coulombienne et le déterminant de Slater détermine la structure nodale de Ψ^G . Celui-ci est construit en diagonalisant de manière exacte la matrice Hamiltonienne H du modèle (3.2) sans interaction, en incluant ou non un potentiel de champ moyen de type Hartree. Ce procédé conduit à deux classes de fonctions guides Ψ^G que l'on appelle « Liquide » et « Hartree », ce qui permet entre autres de tester le rôle de l'approximation Fixed Node. Elles sont optimisées pour chaque système de manière variationnelle, par l'algorithme VMC (§4.2). Il est important de retenir que sans interaction, on calcule toujours la solution exacte.

Pour mesurer les propriétés de localisation du système (§3), on utilise la conductance de Thouless D_x (§5.2.1). Cette quantité est sensible à une modification des conditions aux limites du système, induite par l'application d'un flux d'Aharonov-Bohm Φ , au centre du gaz 2D replié sur un tore dans la direction x . Elle est définie par $D_x = \partial^2 E_0 / \partial \Phi^2 |_{\Phi=0}$ où E_0 est l'énergie de l'état fondamental à température nulle. En réalité, pour des raisons pratiques, on calcule en Monte Carlo Quantique g_x , le coefficient de diffusion du centre de masse en temps imaginaire β dans la direction x , qui est directement proportionnel à D_x (§5.2.2) :

$$g_x \equiv \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{N \langle R_x^2(\beta) \rangle}{\beta} = \frac{L_x^2}{N} D_x.$$

Ici, R_x est la composante selon x du centre de masse des N particules et la moyenne quantique $\langle \cdot \rangle$ est prise, quand $\beta \rightarrow \infty$, dans l'état fondamental Fixed Node Ψ_0^{FN} . On peut de même définir D_y et g_y si le gaz 2D est replié sur un tore dans la direction y . Dans l'approximation Fixed Node, on a toujours $g_x \geq 0$ et $g_y \geq 0$.

Pour extrapoler les propriétés de localisation du système à la limite thermodynamique (système infini), on fait de la théorie d'échelle en regardant comment $g = (g_x + g_y)/2$ varie avec la taille du système (§5.3.1). On est ainsi capable de calculer la fonction d'échelle β de la théorie d'échelle de la localisation (§1.3.3), sans interaction mais aussi avec. Sans interaction, on retrouve bien la forme connue de β et nos résultats montrent qu'avec interaction, β est inchangée (§5.3.2). On peut donc extraire le paramètre de cette théorie d'échelle à un paramètre qui est la longueur de localisation ξ du système thermodynamique, et cela avec ou sans interaction, pour divers degrés de désordre (§5.3.3). Nous avons vérifié avec soin que les longueurs de localisation extraites ne dépendent effectivement pas de la taille du système, ni du facteur de remplissage ν , et donc que l'on calcule bien les longueurs de localisation aux limites thermodynamique et continue.

L'approche que nous adoptons dans cette thèse pour étudier la zone centrale du diagramme de phase désordre/interaction 1.2 consiste à partir de la limite sans interaction, à savoir l'isolant d'Anderson, puis à brancher petit à petit l'interaction électronique. Comme nous l'avons vu au §1.3.3, la simulation numérique s'est avérée très efficace pour explorer la localisation à un corps et en particulier pour vérifier la théorie d'échelle [154]. En revanche, le problème à N corps correspondant, encore plus complexe, a toujours résisté aux approches numériques, malgré de multiples tentatives instructives mais néanmoins incomplètes (§2.7). Dans ce chapitre, nous présentons la méthode que nous avons mise au point pour étudier en présence d'interaction électron-électron, la localisation d'Anderson [89]. Nous insistons sur le fait que l'élaboration de cette méthode a sans doute été le point le plus complexe de cette thèse. Nous rappelons par ailleurs que le modèle utilisé et les notations s'y rapportant ont été préalablement introduits au chapitre 3.

Le plan de ce chapitre suit les différentes étapes de notre méthode numérique. On commence par définir les fonctions d'onde guides Ψ^G , points de départ des simulations Monte Carlo Quantiques (voir le chapitre 4). Puis on introduit la conductance de Thouless qui nous permet de mesurer les propriétés de localisation du système et on explique comment la calculer en Monte Carlo Quantique, à température nulle. Enfin, on montre qu'on est capable de calculer la fonction d'échelle β de la théorie d'échelle de la localisation et d'en extraire la longueur de localisation du système corrélé, à la limite thermodynamique. Tout au long de ce chapitre, nous illustrons notre méthode sur le cas d'électrons sans spin et sans vallée (c'est-à-dire plus rigoureusement d'électrons polarisés en spin, dans une seule vallée) mais elle reste valable pour des électrons avec spin et/ou vallée, comme nous le verrons au chapitre suivant où nous discuterons des résultats physiques obtenus avec cette méthode.

5.1 Choix des fonctions guides sous la forme Slater-Jastrow

Les algorithmes GFMC et RQMC présentés au chapitre précédent reposent sur le choix d'une fonction guide Ψ^G qui doit être donnée explicitement au début de la simulation Monte Carlo. Elle doit être la plus proche possible de l'état fondamental Ψ^0 du Hamiltonien H de notre modèle (équation (3.2)) et cela pour deux raisons. La première est due à l'approximation Fixed Node (§4.3.3). En effet, lors de la simulation, Ψ^G est projetée sur Ψ_0^{FN} , l'état de plus basse énergie ayant la même structure nodale que Ψ^G . Ainsi, plus la structure nodale de Ψ^G sera proche de celle de Ψ^0 , plus Ψ_0^{FN} sera proche du fondamental exact Ψ^0 et donc meilleure sera l'approximation Fixed Node. La seconde raison est purement pratique : si la fonction guide Ψ^G est mauvaise alors il faut beaucoup de temps pour la projeter sur Ψ_0^{FN} , d'autant plus que l'échantillonnage de l'espace de Hilbert se fait préférentiellement, via le procédé d'« importance sampling », dans les zones où l'amplitude de Ψ^G est importante (§4.3.1).

Dans toutes nos simulations, nous avons pris Ψ^G sous la forme d'un produit d'un déterminant de Slater de fonctions d'onde à un corps $\phi_i(\vec{r})$ et d'une fonction appelée Jastrow :

$$\Psi^G[(\vec{r}_1, \sigma_1), \dots, (\vec{r}_N, \sigma_N)] = \prod_{\sigma=1}^M \text{Det} [\phi_i(\vec{r}_j | \sigma_j = \sigma)] \times \prod_{i < j} J_{\sigma_i \sigma_j}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|). \quad (5.1)$$

Nous rappelons qu'ici N désigne le nombre de particules et M le nombre de degrés de liberté internes de celles-ci ($M = 1, 2$ ou 4). $\sigma (= 1, \dots, M)$ et \vec{r} correspondent respectivement au pseudo-spin et au vecteur position d'un électron dans le gaz 2D. Le Jastrow a pour rôle de tenir

compte, à un niveau basique, de la répulsion électrostatique entre les électrons. Il est toujours positif et donc ne contribue pas à la structure nodale de Ψ^G . Ce sont les déterminants de Slater qui fixent cette structure nodale. Ils sont construits en diagonalisant de manière exacte la matrice hamiltonienne H sans interaction (*i.e.* à $r_s = 0$), avec ou sans approximation de champ moyen de type Hartree. Ce procédé conduit à deux classes de fonctions guides que nous nommons « Liquide » et « Hartree ». Dans la suite de cette section, nous explicitons la forme du Jastrow et discutons des deux types de fonctions guides dont nous disposons.

5.1.1 Fonction Jastrow et condition de « cusp »

Le second terme $\prod_{i < j} J_{\sigma_i \sigma_j}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ de la fonction guide (5.1) est appelé Jastrow. Il prend en compte les corrélations entre les électrons, en réduisant la probabilité de trouver deux particules proches l'une de l'autre, et permet ainsi d'abaisser l'énergie d'interaction de Ψ^G . Nous le choisissons sous la forme d'une fonction Yukawa [29, 79] :

$$J_{\sigma\sigma'}(r) = \exp \left[\frac{a A_{\sigma\sigma'}}{r} \left(1 - \exp \left(\frac{-B_{\sigma\sigma'} r}{a} \right) \right) \right], \quad (5.2)$$

où $a = 1/\sqrt{\pi\nu}$ est la distance moyenne entre électrons¹. Par symétrie des rôles joués par les différents pseudo-spins, les paramètres $A_{\sigma\sigma'}$ et $B_{\sigma\sigma'}$ se ramènent à :

$$\begin{cases} A_{\sigma\sigma} = A_{\parallel} & \text{et } B_{\sigma\sigma} = B_{\parallel}, & \text{si } \sigma = \sigma' \\ A_{\sigma\sigma'} = A_{\perp} & \text{et } B_{\sigma\sigma'} = B_{\perp}, & \text{si } \sigma \neq \sigma'. \end{cases} \quad (5.3)$$

On impose de plus la condition de « cusp » sur ces paramètres, de façon à ce que la divergence de l'énergie coulombienne à courte distance soit parfaitement compensée par une divergence du terme cinétique (dûe au « cusp » créé dans la fonction guide) [91, 120]. Pour le Jastrow (5.2), cette condition s'écrit :

$$B_{\parallel} = \sqrt{\frac{r_s}{A_{\parallel}}} \quad \text{et} \quad B_{\perp} = \sqrt{\frac{2r_s}{A_{\perp}}}. \quad (5.4)$$

Il est facile de la démontrer analytiquement². Nous avons aussi vérifié numériquement, à l'aide de l'algorithme Monte Carlo Variationnel (VMC) présenté au §4.2, que l'énergie de la fonction guide est effectivement minimale lorsque cette condition est remplie, même en présence de désordre. Les deux derniers paramètres A_{\parallel} et A_{\perp} sont optimisés, pour chaque système de taille, désordre et interaction donnés, de manière variationnelle, en VMC : on calcule l'énergie de Ψ^G pour différentes valeurs de A_{\parallel} et A_{\perp} jusqu'à trouver le couple $(A_{\parallel}, A_{\perp})$ qui la minimise. Nous avons constaté que les valeurs optimales de ces paramètres ne dépendent pas du désordre et qu'en première approximation, il n'est pas mauvais de prendre $A_{\parallel} = A_{\perp}$.

On retiendra que $J_{\sigma\sigma'} > 0$ et donc que la structure nodale de Ψ^G ne dépend pas du Jastrow. Ainsi, après projection de la fonction guide en GFMC ou RQMC, les résultats numériques ne doivent pas dépendre des $A_{\sigma\sigma'}$ et $B_{\sigma\sigma'}$. Seuls le temps de projection sur le fondamental (Fixed Node) et la précision des résultats peuvent être modifiés par ces paramètres.

¹La régularisation en $r = 0$ est faite en posant $J_{\sigma\sigma'}(0) = J_{\sigma\sigma'}(b)$ où $b(=1)$ est le pas du réseau

²Le lecteur pourra par exemple trouver une démonstration dans la thèse d'H. Falakshahi [80].

5.1.2 Fonction guide « Liquide »

Les fonctions guides « Liquide » et « Hartree » que nous utilisons diffèrent par la manière dont sont calculées les orbitales à un corps ϕ_i intervenant dans les slaters de l'équation (5.1). Dans le cas de la fonction guide « Liquide », ces orbitales sont obtenues par diagonalisation exacte du Hamiltonien H du modèle (3.2) sans interaction, noté h :

$$h = -t \sum_{\langle \vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma \rangle} c_{\vec{r}\sigma}^\dagger c_{\vec{r}'\sigma} + \sum_{\vec{r}\sigma} v_{\vec{r}} n_{\vec{r}\sigma}. \quad (5.5)$$

Cette diagonalisation est facile, même en présence de désordre, puisque sans interaction le problème à N corps se réduit à un problème à un corps : la matrice h n'est donc plus que de taille $V = L_x L_y$ et peut donc être rapidement diagonalisée à l'aide de l'algorithme Lanczos. Chacun des M slaters du produit $\prod_{\sigma=1}^M \text{Det} [\phi_i(\vec{r}_j | \sigma_j = \sigma)]$ de l'équation (5.1) est ensuite construit à partir des N_σ orbitales ϕ_i de plus basses énergies, où N_σ est le nombre de particules de pseudo-spin σ . Ces déterminant de Slater assurent l'antisymétrie de la fonction guide Ψ^G fermionique et fixent ainsi sa structure nodale. Remarquons qu'en procédant de la sorte, Ψ^G est antisymétrique si l'on échange deux particules de même pseudo-spin mais n'a pas de symétrie particulière vis-à-vis d'un échange de deux particules de pseudo-spins différents. Cela n'est pas gênant car nous n'avons pas introduit de terme de « spin-flip » dans notre Hamiltonien si bien que deux particules de pseudo-spins différents peuvent être considérées comme discernables. En outre, le fait de construire M petits slaters de taille N_σ^2 au lieu d'un gros de taille N^2 (complètement antisymétrique) est très avantageux d'un point de vue numérique car beaucoup moins coûteux en mémoire.

Sans interaction ($r_s = 0$), la fonction guide « Liquide » coïncide avec le fondamental exact du système, pourvu que l'on prenne $A_{\parallel} = A_{\perp} = B_{\parallel} = B_{\perp} = 0$ dans le Jastrow (5.2). Par conséquent, les algorithmes GFMC et RQMC nous fournissent également après projection le vrai fondamental Ψ^0 à $r_s = 0$. Ce point est très important car il signifie que notre fonction guide « Liquide » est un excellent point de départ pour étudier ensuite en Monte Carlo ce que devient la localisation d'Anderson lorsque l'on branche petit à petit les interactions. C'est d'ailleurs pour cette raison que nous avons qualifié cette fonction guide de « liquide » : à faible interaction, elle décrit bien l'état fondamental ; or celui-ci doit être un liquide de Fermi (du moins sans désordre).

5.1.3 Fonction guide « Hartree »

Dans la fonction guide « Liquide », les corrélations électroniques sont uniquement introduites dans le Jastrow. Pour que la fonction guide Ψ^G prenne un peu plus en compte les interactions, l'idée à présent est de calculer dans l'approximation de Hartree³ les orbitales à un corps ϕ_i des déterminants de Slater (équation (5.1)). Pour cela, on diagonalise le Hamiltonien à un corps $h_H = h + V_H$ contenant en plus du terme cinétique et du potentiel de désordre $v(\vec{r})$, un potentiel de champ moyen $V_H(\vec{r})$ de type Hartree qui correspond au

³Rappelons que l'approximation Hartree-Fock est une approximation de champ moyen donnant le meilleur déterminant de Slater, c'est-à-dire celui qui minimise l'énergie du Hamiltonien à N -corps de type (3.2). Son énoncé précis est un classique que l'on pourra trouver par exemple dans la référence [20]. Ici, il est uniquement question de la contribution Hartree.

potentiel électrostatique créé par le bain d'électrons :

$$\boxed{V_H(\vec{r}) = U \sum_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}')}. \quad (5.6)$$

Ici U désigne l'intensité de l'interaction (reliée à r_s) et $V(\vec{r})$ le potentiel d'Ewald, conformément aux notations introduites au §3.2. $\rho(\vec{r})$ correspond à la densité d'électrons au site \vec{r} , définie par :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\sigma=1}^M \sum_{i=1}^{N_\sigma} |\phi_i(\vec{r})|^2, \quad (5.7)$$

où $\phi_1, \dots, \phi_{N_\sigma}$ sont les N_σ fonctions propres de plus basses énergies du Hamiltonien à un corps h_H . En pratique, le calcul des fonctions d'onde ϕ_i se fait par diagonalisations successives auto-cohérentes. On commence par diagonaliser le Hamiltonien à un corps sans le potentiel de Hartree, comme si l'on voulait construire la fonction guide « Liquide », ce qui nous fournit les orbitales $\phi_i^{(0)}$. On en déduit la densité $\rho^{(0)}$ par l'équation (5.7) puis le potentiel de Hartree $V_H^{(0)}$ par l'équation (5.6). On diagonalise alors à nouveau le Hamiltonien à un corps, cette fois-ci en présence du potentiel $V_H^{(0)}$. Les orbitales $\phi_i^{(1)}$ obtenues permettent de calculer $V_H^{(1)}$... et ainsi de suite. En réalité, l'implémentation pratique de ces itérations successives est légèrement plus compliquée. Elle est présentée dans la remarque ci-dessous que l'on peut sauter en première lecture.

Remarque : implémentation pratique du processus itératif de Hartree

Pour calculer les orbitales à un corps ϕ_i de (5.1) dans l'approximation de Hartree, on diagonalise le Hamiltonien à un corps h_H de manière auto-cohérente, par itérations successives :

- on diagonalise le Hamiltonien H sans interaction, $h_H^{(0)} = h$, de fonctions propres $\phi_i^{(0)}$.
- on calcule la densité $\rho^{(0)} = \sum_{\sigma} \sum_i |\phi_i^{(0)}(\vec{r})|^2$ puis on pose $\tilde{\rho}^{(0)} = \lambda \rho^{(0)} + (1 - \lambda) \frac{N}{V}$ où λ est un nombre compris entre 0 et 1 dont la valeur est discutée ci-après.
- on en déduit le potentiel de Hartree $V_H^{(1)}(\vec{r}) = U \sum_{\vec{r}'} \tilde{\rho}^{(0)}(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}')$ et donc le Hamiltonien $h_H^{(1)} = h + V_H^{(1)}$.
- on diagonalise $h_H^{(1)}$ de fonctions propres $\phi_i^{(1)}$.
- on en déduit $\rho^{(1)}$ puis on pose $\tilde{\rho}^{(1)} = \lambda \rho^{(1)} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}^{(0)}$. On construit ainsi $V_H^{(2)}$ puis $h_H^{(2)} = h + V_H^{(2)}$.
- on diagonalise $h_H^{(2)}$ de fonctions propres $\phi_i^{(2)}$.

⋮ ⋮ ⋮

- on diagonalise $h_H^{(n)}$ de fonctions propres $\phi_i^{(n)}$.
- on calcule $\rho^{(n)} = \sum_{\sigma} \sum_i |\phi_i^{(n)}(\vec{r})|^2$ puis on pose $\tilde{\rho}^{(n)} = \lambda \rho^{(n)} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}^{(n-1)}$. On en déduit $V_H^{(n+1)}(\vec{r}) = U \sum_{\vec{r}'} \tilde{\rho}^{(n)}(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}')$ et $h_H^{(n+1)} = h + V_H^{(n+1)}$.
- on diagonalise $h_H^{(n+1)}$ de fonctions propres $\phi_i^{(n+1)}$.

⋮ ⋮ ⋮

- on réitère autant que nécessaire de façon à minimiser l'énergie de la fonction guide « Hartree » Ψ^G construite selon (5.1).

Le paramètre λ introduit ici est fixé au début du programme. Il doit être choisi suffisamment petit pour que la modification $\lambda \rho^{(n)}$ de la densité électronique à l'itération n soit faible par rapport à la contribution $(1 - \lambda) \tilde{\rho}^{(n-1)}$ de la densité préalable à l'itération $n - 1$. De cette manière, les puits du potentiel désordonné v se remplissent petit à petit ce qui évite des instabilités dues au remplissage immédiat des puits qui se transforment en bosses puis de nouveau en puits, etc ..., sans jamais que le processus ne converge. Dans toutes nos simulations, nous avons pris $\lambda = 0.01$ (sauf dans cette section où $\lambda = 0.05$).

Délocalisation par le champ moyen de Hartree

Plus que les simples détails techniques, il est important de comprendre « intuitivement » la physique contenue dans l'approximation de Hartree. Comme cela est représenté sur la figure 5.1(a), les électrons ont tendance à peupler les puits du potentiel désordonné $v(\vec{r})$. Par conséquent, après une itération Hartree, le désordre effectif $V_{\text{eff}} = v + V_H$ est lissé par rapport au désordre initial v , puisque V_H est directement relié à la densité électronique par (5.6). Et ainsi de suite aux itérations suivantes. Ce point est vérifié sur la figure 5.1 (b) où nous avons tracé en pointillés bleus la variance ΔV_{eff}^2 du potentiel effectif V_{eff} en fonction du nombre d'itérations Hartree pour un système corrélé donné :

$$\Delta V_{\text{eff}}^2 = \overline{\langle V_{\text{eff}}^2 \rangle} - \langle V_{\text{eff}} \rangle^2, \quad (5.8)$$

où $\langle X \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{r}} X(\vec{r})$ et $\overline{\quad}$ représente la moyenne sur les configurations du potentiel aléatoire v . Initialement (*i.e.* à l'itération 0), $V_{\text{eff}} = v$ et donc d'après l'équation (3.3), $\Delta V_{\text{eff}}^2 = W^2/12$. Puis, au fur et à mesure que l'on itère le processus de Hartree, cette variance diminue jusqu'à saturer lorsqu'une solution stationnaire $\{\phi_i\}$ a été atteinte. Ainsi, dans l'approximation de Hartree, les interactions ont pour effet de lisser le potentiel désordonné.

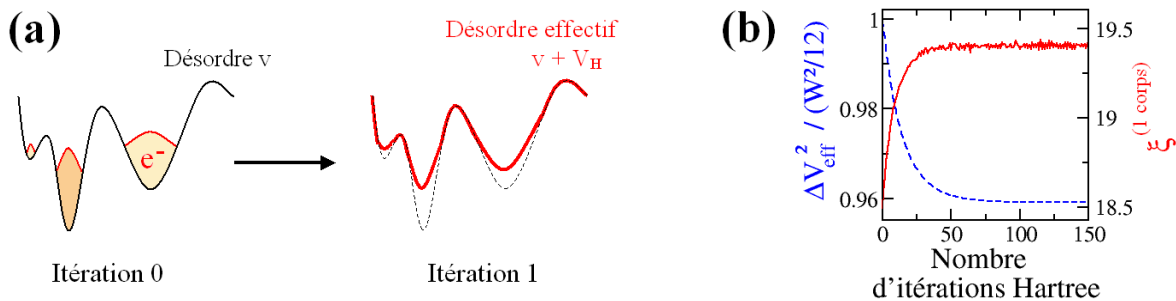


FIG. 5.1 – (a) Représentation schématique de la variation du désordre effectif au cours d'une itération Hartree : le potentiel de Hartree V_H remplit les puits du potentiel extérieur v qui se lisse peu à peu. (b) Variance ΔV_{eff}^2 en unité de $W^2/12$ (en pointillés bleus) et longueur de localisation $\xi^{(1 \text{ corps})}$ (en rouge) en fonction du nombre d'itérations Hartree. Système : $N = 16$ électrons (sans spin, sans vallée) dans 24×36 sites, désordre $k_F l = 37.7$, degré d'interaction $r_s = 1$, moyennage sur 400 échantillons, $\lambda = 0.05$.

Dans cette vision effective à un corps, cette diminution du désordre s'accompagne nécessairement d'une augmentation de la longueur de localisation du système. Pour vérifier cette conclusion, nous avons utilisé comme mesure de localisation la racine carrée du « participation ratio » [132] que nous notons $\xi^{(1 \text{ corps})}$:

$$\xi^{(1 \text{ corps})} = \sqrt{\frac{1}{\sum_{\vec{r}} |\phi_N(\vec{r})|^4}}. \quad (5.9)$$

Dans cette définition, ϕ_N est la fonction propre, au niveau de Fermi, du Hamiltonien à un corps h_H^4 . Nous constatons sur la figure 5.1 (b) que la longueur de localisation $\xi^{(1 \text{ corps})}$ aug-

⁴L'expression (5.9) est donnée ici pour des électrons polarisés dans une vallée ($M = 1$) car c'est ce cas qui est illustré sur la figure 5.1 (b) mais on pourrait tout aussi bien la généraliser au cas $M \neq 1$. On pourrait aussi moyenner sur les orbitales de la mer de Fermi, au lieu de ne considérer que l'orbitale au niveau de Fermi, sans que le comportement qualitatif de $\xi^{(1 \text{ corps})}$ en soit changé.

mente quand la variance ΔV_{eff}^2 diminue ce qui confirme l'idée selon laquelle les interactions délocalisent le gaz 2D, dans l'approximation de Hartree, en lissant le potentiel de désordre vu par les électrons. Nous avons d'ailleurs plusieurs fois utilisé cet argument dans les chapitres 1 et 2.

Intérêts de la fonction guide « Hartree »

En calculant les orbitales à un corps ϕ_i en présence d'un potentiel de champ moyen (5.6), on améliore considérablement la fonction guide Ψ^G . En effet, on constate sur la figure 5.2 (a) que l'énergie E^{VMC} de Ψ^G ($= \frac{\langle \Psi^G | H | \Psi^G \rangle}{\langle \Psi^G | \Psi^G \rangle}$), calculée en Monte Carlo Variationnel, décroît au fur et à mesure des itérations Hartree. Elle atteint un minimum en un nombre critique d'itérations (ici 3) puis se remet à croître et finalement sature lorsqu'un état stationnaire du Hamiltonien h_H est atteint. Il s'avère qu'un tel état n'est pas favorable énergétiquement puisque son énergie est comparable à celle de la fonction guide « Liquide », donnée par la valeur initiale de E^{VMC} à l'itération 0 (et peut même être plus élevée pour d'autres échantillons). Ainsi, pour abaisser l'énergie de la fonction guide, il ne faut réaliser que quelques itérations Hartree. En pratique, le nombre optimal d'itérations à effectuer pour minimiser E^{VMC} est déterminé pour chaque système en Monte Carlo Variationnel, en même temps que les paramètres du Jastrow A_{\parallel} et A_{\perp} (§5.1.1).

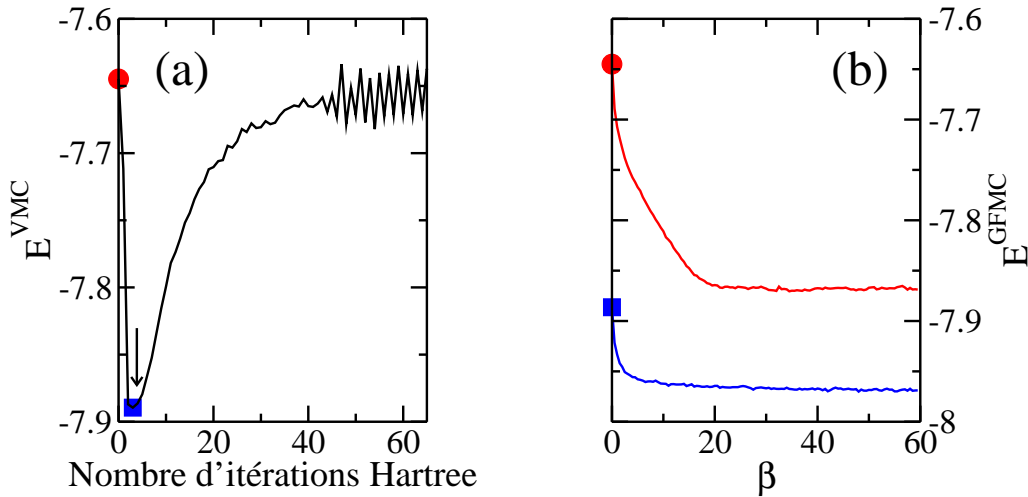


FIG. 5.2 – (a) Énergie E^{VMC} de la fonction guide Ψ^G (5.1) en fonction du nombre d'itérations Hartree. Le cercle rouge désigne l'énergie de la fonction guide « Liquide » et le carré bleu, celle de la fonction guide « Hartree » construite de façon à minimiser E^{VMC} (flèche noire). Système : $N = 16$ électrons (sans spin, sans vallée) dans 20×20 sites, désordre $k_{Fl} = 0.97$, degré d'interaction $r_s = 6$, 1 seul échantillon, $\lambda = 0.05$, $A_{\parallel} = 1.5$. (b) Énergie E^{GFMC} calculée par l'algorithme GFMC, en fonction du temps imaginaire β , pour le même système que dans (a), à partir de la fonction guide « Liquide » (en rouge) ou de la fonction guide « Hartree » (en bleu). Toutes les énergies sont exprimées en unité de $2N\pi vt$.

Après avoir optimisé de manière variationnelle la fonction guide « Hartree » Ψ_{Har}^G (ou « Liquide » Ψ_{Liq}^G), celle-ci est projetée par l'algorithme GFMC ou RQMC sur la fonction d'onde de plus basse énergie ayant la même structure nodale, Ψ_0^{FN} . Sur la figure 5.2 (b), nous avons tracé l'énergie du système étudié dans la figure 5.2 (a), au cours de ce mécanisme de projection en temps imaginaire β , en partant soit de Ψ_{Liq}^G (en rouge), soit de Ψ_{Har}^G (en bleu). On constate que si l'on prend Ψ_{Har}^G comme point de départ, on atteint beaucoup plus rapidement

le fondamental Ψ_0^{FN} proche en énergie, que si l'on prend Ψ_{Liq}^G . De plus, l'état fondamental Fixed Node Ψ_0^{FN} obtenu à partir de Ψ_{Har}^G est manifestement de plus basse énergie que celui obtenu à partir de Ψ_{Liq}^G et est donc plus proche du vrai fondamental de H , Ψ_0 . En ce sens, la fonction guide « Hartree » est meilleure que la fonction guide « Liquide ». D'un point de vue pratique, cela se traduit par le fait qu'il faut prendre un moins grand β pour atteindre le fondamental Ψ_0^{FN} et donc moins de marcheurs en GFMC pour une même précision sur la quantité calculée. L'utilisation de la fonction guide « Hartree » apporte donc un gain appréciable en temps de calcul qui rendra possible dans la suite de ce chapitre et aux chapitres suivants, l'étude de systèmes fortement corrélés. Par ailleurs, outre l'intérêt pratique, le fait de disposer d'une classe de fonctions guides « Hartree » de structures nodales différentes de celles des fonctions guides « Liquide » permet de tester l'approximation Fixed Node et donc la validité de nos différents résultats Monte Carlo. On verra heureusement au §5.3.3 (figure 5.11) que nos conclusions relatives aux propriétés de localisation du gaz 2D sont indépendantes du choix de la fonction de guide de départ.

Remarque sur l'allure de l'énergie E^{VMC} au cours du processus itératif de Hartree

Pour comprendre un peu mieux la forme de la courbe E^{VMC} de la figure 5.2 (a), nous avons étudié séparément la contribution de l'énergie cinétique, de l'énergie potentielle associée au désordre effectif et de l'énergie d'interaction. La chute de E^{VMC} aux premières itérations se comprend par la diminution de l'énergie cinétique et de l'énergie d'interaction au fur et à mesure que les particules se délocalisent. Puis c'est l'énergie potentielle de désordre, qui ne cesse de croître, qui l'emporte sur les deux autres contributions énergétiques et est ainsi responsable de l'augmentation de E^{VMC} à partir de quelques itérations. La croissance de cette énergie potentielle se comprend par le fait que la valeur moyenne du potentiel de désordre effectif est constamment augmentée au cours des itérations, même si sa variance diminue, puisque les puits se remplissent. Précisons par ailleurs que le comportement de E^{VMC} au fur et à mesure du processus itératif de Hartree est fortement dépendant du paramètre λ introduit dans la précédente remarque. Il a essentiellement pour effet de dilater la courbe E^{VMC} de la figure 5.2 (a) : plus il est petit, plus il faut d'itérations Hartree pour atteindre le minimum énergétique mais s'il est trop grand, ce minimum n'apparaît pas. Enfin, si la courbe E^{VMC} paraît bruitée, c'est parce qu'elle n'a été obtenue que sur un seul échantillon. La structure oscillante apparaît au bout d'un grand nombre d'itérations, lorsque le potentiel effectif est à peu près lissé et donc que les petits « puits » deviennent rapidement des petites « bosses » puis de nouveau des petits « puits », etc ... Elle disparaît en moyennant sur différentes configurations du potentiel aléatoire.

5.2 Comment mesurer les propriétés de localisation du gaz 2D ?

De nombreuses méthodes ont été proposées dans la littérature pour mesurer la localisation [132]. Nous en avons déjà citées quelques unes au §2.7. On peut par exemple étudier le comportement asymptotique des fonctions d'onde $\Psi(L) \propto \exp(-L/\xi)$ ou celui de la conductance de Kubo ou encore celui du coefficient de transmission. On peut aussi définir une longueur de localisation via le « participation ratio » (ce que nous avons d'ailleurs fait pour le problème à un corps au §5.1.3) ou les exposants de Lyapunov. L'étude de la sensibilité du système aux conditions aux limites ou des fluctuations spectrales peut également s'avérer très utile dans l'exploration des propriétés de localisation. Dans notre cas, la difficulté à surmonter a été de trouver un observable physique qui *i*) soit sensible aux propriétés de localisation du système corrélé et *ii*) soit calculable en Monte Carlo Quantique (en particulier par nos algorithmes GFMC et/ou RQMC). Par exemple, la densité électronique $\rho(\vec{r})$ ne convient pas car

même si elle peut être facilement calculée en Monte Carlo, elle devient spatialement uniforme dès que l'on moyenne sur les configurations du désordre et est donc transparente à la localisation des électrons. Pendant les premiers mois de cette thèse, nous avons essayé d'extraire une longueur de localisation ξ à partir de la fonction de réponse $F(\vec{r}, \vec{r}') = \delta\rho(\vec{r})/\delta v(\vec{r}')$ donnant le comportement de la densité $\rho(\vec{r})$ lorsque le potentiel de désordre v est modifié en un point \vec{r}' . Nous avons réussi à calculer cette quantité (voir §4.4.3) mais avons malheureusement échoué quant à l'établissement d'un procédé systématique permettant de définir une longueur de localisation à partir de F .

L'outil que nous avons finalement utilisé pour mesurer les propriétés de localisation du gaz 2D est la conductance de Thouless. Nous commençons cette section en définissant cette quantité et en justifiant sa pertinence comme mesure de localisation. Puis nous expliquons comment la calculer en Monte Carlo Quantique, via le coefficient de diffusion du centre de masse en temps imaginaire. Nous discutons ensuite du rôle de l'approximation Fixed Node quant au signe de la conductance de Thouless calculée. Enfin, nous étudions la distribution statistique de cette conductance, dans le but de déterminer comment moyenner intelligemment sur les configurations du potentiel aléatoire.

5.2.1 Conductance de Thouless comme mesure de localisation

Définition de la conductance de Thouless

Du fait des conditions aux limites périodiques imposées au §3.1, notre système bidimensionnel a la géométrie d'un tore. Pour fixer les idées, nous prenons dans la suite les conventions de directions x et y schématisées sur la figure 5.3 (x direction longitudinale et y direction transversale). On fait passer dans ce tore un flux d'Aharonov-Bohm ϕ qui induit un potentiel vecteur \vec{A} dans le système et on pose $\Phi = 2\pi\phi/\phi_0$, où $\phi_0 = h/e$ le quantum de flux. Il est important de comprendre que malgré la présence de ce flux magnétique Φ , le champ magnétique $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$ est strictement nul sur le tore. *A priori*, le potentiel \vec{A} a pour effet de modifier le Hamiltonien cinétique $\vec{p}^2/2m$ en $(\vec{p} - e\vec{A})^2/2m$, tandis que les conditions aux limites périodiques s'écrivent toujours pour une fonction d'onde Ψ , $\Psi(x + L_x, y) = \Psi(x, y)$. On peut cependant montrer par un choix de jauge approprié $\Psi(\vec{r}) \rightarrow e^{i\varphi(\vec{r})}\tilde{\Psi}(\vec{r})$, avec $\varphi(\vec{r}) = (e/\hbar) \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{l}) \cdot d\vec{l}$, que ce potentiel \vec{A} peut être absorbé en modifiant les conditions aux limites du problème sans flux selon $\tilde{\Psi}(x + L_x, y) = e^{i\Phi}\tilde{\Psi}(x, y)$ [4]. Plus précisément, il est facile de montrer que le Hamiltonien (3.2) de notre modèle reste le même en présence d'un flux d'Aharonov-Bohm pourvu que l'on change le terme de saut entre proches voisins t selon :

$$t \longrightarrow \begin{cases} t e^{+i\frac{\Phi}{L_x}} & \text{si la particule bouge selon } x \text{ dans le sens des } x \text{ positifs} \\ t e^{-i\frac{\Phi}{L_x}} & \text{si la particule bouge selon } x \text{ dans le sens des } x \text{ négatifs} \\ t & \text{si la particule bouge selon la direction } y \end{cases} \quad (5.10)$$

Ainsi notre Hamiltonien H devient hermitien, si bien qu'un courant I_x apparaît dans le tore selon la direction x . Dans l'état fondamental, ce courant, appelé courant permanent, est relié à l'énergie totale E_0 du fondamental par :

$$I_x = -\frac{\partial E_0}{\partial \Phi}. \quad (5.11)$$

Précisons que l'on pourrait tout aussi bien définir un courant I_x à partir d'un état excité E du Hamiltonien total mais dans la suite, on ne s'intéressera qu'aux propriétés de l'état fondamental.

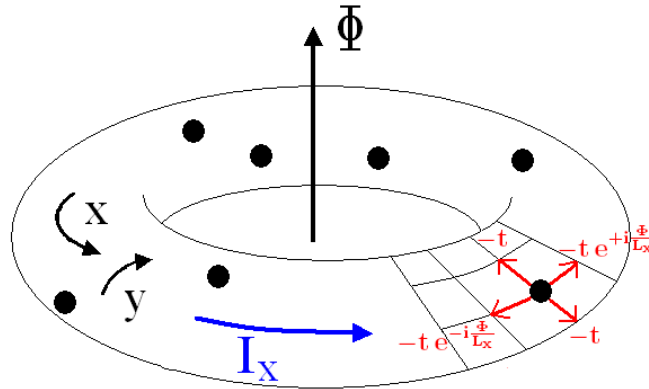


FIG. 5.3 – Gaz 2D replié sur un tore en présence d'un flux Aharonov-Bohm Φ . Celui-ci modifie le terme de saut t selon (5.10) dans le modèle discrétisé et permet à un courant I_x de circuler dans la direction x . Les ronds noirs représentent les particules.

Introduisons à présent la conductance de Thouless D_x , définie comme la courbure de l'énergie E_0 à flux nul :

$$D_x = \left. \frac{\partial^2 E_0}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=0}. \quad (5.12)$$

En effectuant un développement limité du courant I_x à petit flux Φ , on trouve :

$$I_x = D_x \Phi, \quad \text{à petit } \Phi. \quad (5.13)$$

Ainsi la conductance de Thouless D_x apparaît comme la fonction de réponse reliant le courant I_x au flux d'Aharonov-Bohm Φ qui lui a donné naissance. On comprend donc pourquoi D_x est appelée conductance.

Nous précisons pour finir qu'il est évidemment possible de refaire le même raisonnement en inversant les directions x et y c'est-à-dire en « pliant dans l'autre sens » le gaz 2D sous la forme d'un tore. Le terme de saut t est alors uniquement modifié selon la direction y . On observe un courant permanent I_y selon y et l'on définit une conductance de Thouless D_y .

Conductance de Thouless et conductance

La conductance de Thouless D , encore appelée (en anglais) « Drude weight » ou « conductivity stiffness », peut être parfois reliée à la conductance usuelle. Ainsi, dans [128], W. Kohn a montré que D est donnée par la limite à basse fréquence de la partie imaginaire de la conductivité de Kubo. Par ailleurs, D. Braun *et al* ont établi numériquement que la valeur absolue de D , moyennée sur le désordre, est proportionnelle à la conductance de Landauer-Büttiker dans le régime diffusif, ainsi que dans le régime ballistique si l'on soustrait la contribution de la résistance de Sharvin (ou résistance de contact) de façon à mesurer la conductance dans le bulk. Dans le régime localisé, une même relation de proportionnalité est trouvée en moyennant le logarithme de ces quantités [39]. Le plus souvent, la conductance de Thouless D est positive mais dans certains cas que l'on discutera ci-après, elle peut être négative [93, 146, 289], si bien que l'interprétation de D comme une conductance devient problématique. Dans les systèmes bosoniques, D est toujours positive et est simplement reliée à la fraction superfluide [196].

Conductance de Thouless et sensibilité aux conditions aux limites

Outre le lien entre conductance de Thouless et conductance, il est essentiel de comprendre dans le cadre de cette thèse que la conductance de Thouless est quoiqu'il arrive une bonne mesure des propriétés de localisation du système car elle est sensible à une variation des conditions aux limites. Il a en effet été montré, dès le début des années 70, par J. T. Edwards et D. J. Thouless, que la sensibilité aux conditions aux limites est un bon critère de localisation [72, 267]. L'argument est simple : si un état est localisé spatialement alors il est insensible aux conditions aux limites, pourvu qu'il soit suffisamment éloigné de la frontière. Si de plus le système est périodique, la position de cette frontière peut être modifiée à souhait par une transformation de jauge et donc cette position n'a plus d'importance. En particulier, la variation de l'énergie du système en réponse à un changement des conditions aux limites doit être exponentiellement petite si le système est localisé. Or il se trouve que la conductance de Thouless, définie par l'équation (5.12), mesure exactement ce type de variation. Dans ce cas, comme nous l'avons expliqué précédemment, les conditions aux limites sont modifiées par l'application d'un flux d'Aharonov-Bohm Φ et c'est la courbure de l'énergie par rapport à ce flux qui sert de mesure de sensibilité.

On retiendra donc que la conductance de Thouless permet de mesurer les propriétés de localisation du système, qu'il soit corrélé ou non, et qu'il s'agit bien, plus ou moins, d'une conductance. Dans la suite, nous expliquons comment calculer cette quantité en Monte Carlo Quantique.

5.2.2 Lien avec le coefficient de diffusion en temps imaginaire

En pratique, on ne calcule pas directement la conductance de Thouless D_x (ou D_y) en mettant un flux Φ dans le système mais on exploite le lien entre celle-ci et la constante de diffusion dans la direction x du centre de masse en temps imaginaire, g_x :

$$g_x = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{N \langle R_x^2(\beta) \rangle}{\beta}. \quad (5.14)$$

Dans cette expression, R_x est la composante selon x du centre de masse des N particules et $\langle . \rangle$ désigne la moyenne quantique prise dans l'état $|\Psi(\beta)\rangle = e^{-\beta H} |\Psi^G\rangle$, qui coïncide avec l'état fondamental Fixed Node Ψ_0^{FN} à grand temps imaginaire β . Rappelons qu'en réalité β est exprimé en unité de $1/t$ si bien qu'il faut diviser le terme de droite par t dans (5.14) mais comme on prend $t = 1$, on omet de préciser t dans ces expressions. Précisons également que l'on peut bien sûr définir de la même manière une constante de diffusion g_y associée au mouvement des particules dans la direction y .

Le coefficient de diffusion g_x est simplement relié à la conductance de Thouless D_x par :

$$g_x = \frac{L_x^2}{N} D_x, \quad (5.15)$$

et de même pour g_y et D_y . Ce résultat est démontré ci-dessous. Il a été utilisé dans la littérature pour calculer la fraction superfluide de systèmes bosoniques, notamment en Monte Carlo Quantique par E. L. Pollock et D. M. Ceperley [196].

Démonstration de la relation (5.15)

La première étape consiste à calculer la fonction de partition Z introduite au §4.3.2, en présence d'un flux d'Aharonov-Bohm Φ :

$$Z(\beta, \Phi) = \langle \Psi^G | e^{-\beta H(\Phi)} | \Psi^G \rangle . \quad (5.16)$$

Ici, comme nous l'avons vu au §5.2.1, le Hamiltonien $H(\Phi)$ est le même que le Hamiltonien $H(0) = H$ du modèle (3.2), excepté que le terme de saut t est remplacé selon (5.10). En discrétisant le temps imaginaire β en $\beta = n\tau$, on écrit facilement :

$$Z(\beta, \Phi) = \sum_X \Psi^G(R_0) \langle R_0 | e^{-\tau H(\Phi)} | R_1 \rangle \dots \langle R_{n-1} | e^{-\tau H(\Phi)} | R_n \rangle \Psi^G(R_n) , \quad (5.17)$$

où R_i est un point de l'espace de Hilbert à N particules (attention, pas le centre de masse!) et $X = (R_0, \dots, R_n)$ est un chemin dans cet espace, conformément aux notations introduites au chapitre 4. Pour calculer le terme générique $\langle R | e^{-\tau H(\Phi)} | R' \rangle$, on écrit $e^{-\tau H(\Phi)} = 1 - \tau H(\Phi)$ à petit τ et l'on sépare le cas $R = R'$ du cas $R \neq R'$, sachant que seuls les termes non-diagonaux de H sont modifiés par Φ :

$$\langle R | e^{-\tau H(\Phi)} | R' \rangle = \begin{cases} 1 - \tau \langle R | H(0) | R \rangle & \text{si } R = R' \\ -\tau \langle R | H(0) | R' \rangle e^{i \frac{\Phi}{L_x} s(R, R')} & \text{si } R \neq R' , \end{cases}$$

où $s(R, R') = +1[-1]$ si entre R et R' , une particule a bougé sur un proche voisin dans la direction $x > 0$ [$x < 0$], et $s(R, R') = 0$ sinon. On a donc finalement :

$$\langle R | e^{-\tau H(\Phi)} | R' \rangle = \langle R | e^{-\tau H(0)} | R' \rangle e^{i \frac{\Phi}{L_x} s(R, R')} ,$$

ce qui donne en injectant dans (5.17) :

$$Z(\beta, \Phi) = \sum_X \underbrace{\Psi^G(R_0) \langle R_0 | e^{-\tau H(0)} | R_1 \rangle \dots \langle R_{n-1} | e^{-\tau H(0)} | R_n \rangle \Psi^G(R_n)}_{(*)} \exp \left(i \frac{\Phi}{L_x} \sum_{i=0}^{n-1} s(R_i, R_{i+1}) \right) .$$

Le terme (*) ne fait intervenir que le Hamiltonien sans flux $H(0) = H$ et peut donc se réécrire, d'après le §4.4.1, sous la forme $P(X) e^{-S(X)}$. Il s'interprète comme la distribution de probabilité associée aux chemins X . Par ailleurs, le terme $m(X) \equiv \sum_{i=0}^{n-1} s(R_i, R_{i+1})$ est directement relié à ce qui est souvent appelé en anglais le « winding number ». Il comptabilise le nombre total de mouvements vers les x positifs moins ceux vers les x négatifs, au cours du chemin X en temps imaginaire. Ainsi, finalement, la fonction de partition Z s'écrit :

$$Z(\beta, \Phi) = Z(\beta, 0) \left\langle e^{i \frac{\Phi}{L_x} m(X)} \right\rangle_{\Phi=0} , \quad (5.18)$$

où la moyenne quantique $\langle \cdot \rangle_{\Phi=0}$ est prise à flux nul, en intégrant sur les différents chemins X distribués selon $P(X) e^{-S(X)}$.

La fin de la démonstration se fait à présent en deux courtes étapes :

- pour faire apparaître le second moment du centre de masse $\langle R_x^2(\beta) \rangle = \langle m^2(X(\beta)) \rangle / N^2$ puis la constante de diffusion g_x définie par (5.14), on effectue un développement limité à petit Φ de $Z(\beta, \Phi)$ et l'on prend la valeur à grand β :

$$\frac{Z(\beta, \Phi)}{Z(\beta, 0)} = 1 - \frac{N\beta\Phi^2}{2L_x^2} g_x + O(\Phi^3) , \quad (5.19)$$

où nous avons utilisé le fait que $\langle m(X) \rangle = 0$ par symétrie des directions $x > 0$ et $x < 0$.

- par ailleurs, la fonction de partition $Z(\beta, \Phi)$ peut toujours s'écrire à grand β sous la forme $Z(\beta, \Phi) = \alpha(\Phi) e^{-\beta E_0(\Phi)}$, où $E_0(\Phi)$ est l'énergie du fondamental de $H(\Phi)$ (il suffit pour s'en convaincre de développer dans (5.16) la fonction guide Ψ^G sur la base des fonctions propres). En faisant un développement limité de $E_0(\Phi)$ à petit Φ , en remarquant que le courant permanent (5.11) est nul à flux nul et en utilisant la définition (5.12), on trouve :

$$\frac{Z(\beta, \Phi)}{Z(\beta, 0)} = 1 - \frac{\beta\Phi^2}{2} D_x + O(\Phi^3) . \quad (5.20)$$

Par comparaison des équations (5.19) et (5.20), on déduit $g_x = L_x^2 D_x / N$ c'est-à-dire l'équation (5.15).

Calcul pratique en Monte Carlo Quantique du coefficient de diffusion

Pour calculer en Monte Carlo Quantique la conductance de Thouless D_x , on calcule le coefficient de diffusion du centre de masse en temps imaginaire g_x , car celui-ci est plus facile d'accès dans les simulations. En effet, comme cela est expliqué dans la remarque ci-dessus, le coefficient de diffusion g_x est relié au « winding number » qui s'obtient simplement en comptabilisant au cours du processus stochastique le nombre de fois qu'une particule va vers la droite moins le nombre de fois qu'une particule va vers la gauche (dans la direction x). Un exemple de calcul de g_x est donné sur la figure 5.4 (a). On trace le second moment $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ en fonction du temps imaginaire β , soit en GFMC, soit en RQMC⁵. Au bout d'un certain temps imaginaire critique β_c , la fonction guide Ψ^G est projetée sur le fondamental Fixed Node Ψ_0^{FN} , ce que l'on vérifie en regardant soigneusement quand l'énergie du système $E(\beta)$ converge. On constate alors que le mouvement du centre de masse selon x devient diffusif, c'est-à-dire que $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ devient linéaire en β . Par un fit linéaire, on extrait la pente de la droite $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ à $\beta > \beta_c$ et on en déduit ainsi g_x selon (5.14). Nous insistons sur le fait qu'il est essentiel de vérifier que l'énergie $E(\beta)$ a bien convergé avant d'extraire g_x de $\langle R_x^2(\beta) \rangle$. En effet, il arrive parfois que $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ semble linéaire « à l'oeil » alors que le fondamental Ψ_0^{FN} n'a pas été atteint. La valeur de la pente de $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ à ces β trop courts peut sensiblement différer de celle obtenue à $\beta > \beta_c$.

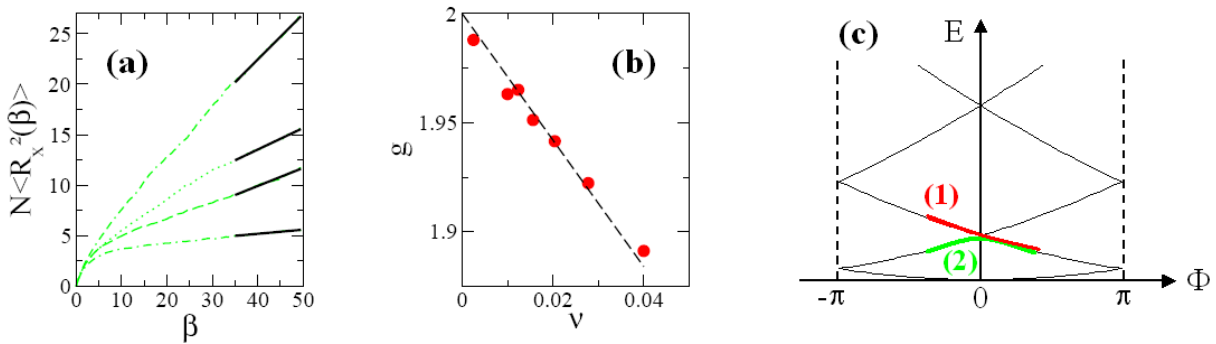


FIG. 5.4 – (a) Exemple de courbes $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ pour quatre échantillons différents, avec $N = 16$ particules (sans spin, sans vallée) dans 20×20 sites, $k_{Fl} = 1.51$ et $r_s = 4$. Les lignes continues noires en gras correspondent aux fits utilisés pour extraire les valeurs de g_x selon (5.14). (b) $g = (g_x + g_y)/2$ en fonction du facteur de remplissage ν pour des systèmes carrés ayant un nombre de particules $N = 25$ fixé (sans spin, sans vallée), sans interaction ($r_s = 0$) et sans désordre ($W = 0.001$, soit $k_{Fl} \rightarrow \infty$). La droite en pointillé est le fit linéaire $y = 2 - 2.9\nu$. (c) Spectre énergétique, sans interaction et sans désordre, du gaz 2D en présence d'un flux d'Aharonov-Bohm Φ couplé à une direction (en unité de $\Phi_0/2\pi$). Les situations (1) et (2) distinguent deux façons de calculer les courbures des niveaux.

Limite sans interaction et sans désordre

Sans interaction et sans désordre, il est facile de montrer analytiquement à la limite continue que les niveaux d'énergie à un corps du gaz bidimensionnel, en présence d'un flux d'Aharonov-Bohm Φ couplé par exemple à la direction x (toujours exprimé en unité de $\Phi_0/2\pi$), s'écrivent $E_{n,m} = t(2\pi n + \Phi)^2/L_x^2 + t(2\pi m/L_y)^2$ où n et m sont des entiers relatifs (dans les

⁵En pratique, l'algorithme GFMC est plus efficace que l'algorithme RQMC car il fournit en une seule simulation toute la courbe $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ de $\beta = 0$ à β . Au contraire, une simulation RQMC ne fournit qu'un point à un β donné et il faut donc lancer plusieurs simulations pour obtenir la courbe entière. C'est pourquoi, dans ce chapitre et les suivants, le coefficient de diffusion du centre de masse g_x est toujours calculé en GFMC.

unités du modèle discret, voir §3.3). Et inversement ($L_x \leftrightarrow L_y$) si Φ est couplé à la direction y . Ces niveaux d'énergie sont représentés dans la zone réduite $-\pi \leq \Phi < \pi$, à $m = 0$ fixé, sur la figure 5.4(c). La question est ensuite de savoir comment en déduire la conductance de Thouless $D_x = \partial^2 E_0 / \partial \Phi^2|_{\Phi=0}$, où E_0 est l'énergie du fondamental. Deux approches non équivalentes sont *a priori* possibles. La première consiste à sommer les courbures individuelles à un corps de tous les N niveaux d'énergie. Chaque courbure est calculée comme cela est schématisé sur le cas (1) rouge de la figure 5.4(c), en supposant que la variation du flux est suffisamment rapide pour que l'électron reste sur son niveau d'énergie individuel. On trouve alors en utilisant (5.15) que théoriquement, sans interaction et sans désordre, $g_x = 2$ (et de même $g_y = 2$). C'est ce qu'on pourrait appeler la limite de Kohn [128]. La seconde approche consiste à remarquer que si l'on fait varier le flux très lentement autour de 0, de manière adiabatique, chaque électron ne reste plus sur son niveau individuel mais suit le niveau de plus basse énergie (situation (2) verte). C'est cette approche qui est sans doute la bonne pour calculer la vraie conductance de Thouless, puisque celle-ci est définie à partir de l'énergie de l'état fondamental. Ainsi, sans interaction et sans désordre, on ne s'attend pas en toute rigueur à ce que le coefficient de diffusion g_x , déduit de la conductance de Thouless D_x , vaille $g_x = 2$.

Pour déterminer laquelle de ces deux approches est adoptée dans nos calculs numériques, nous avons tracé sur la figure 5.4(b) le coefficient de diffusion du centre de masse obtenu en GFMC, dans la limite sans interaction et sans désordre⁶, pour différentes valeurs du facteur de remplissage ν . Pour augmenter la précision, nous avons moyenné le coefficient de diffusion sur les directions x et y , $g = (g_x + g_y)/2$, mais nous avons bien sûr vérifié que $g_x = g_y$ aux erreurs Monte Carlo près (nombre fini de marcheurs). A la limite continue $\nu \ll 1$, on trouve $g = 2$, tandis que les effets de réseau en ν sont bien maîtrisés par le fit linéaire $g = 2 - 2.9\nu$. Ainsi, la conductance de Thouless que nous calculons, via le coefficient de diffusion, correspond sans interaction et sans désordre à la somme des courbures des niveaux d'énergie à un corps (*i.e.* à la limite de Kohn). Ceci est une conséquence de l'approximation Fixed Node qui, même si elle permet de calculer le fondamental exact sans interaction, perturbe la dynamique du système et contraint ainsi les coefficients de diffusion g_x et g_y à être toujours positifs. Nous allons en reparler dans la section suivante. Avant cela, ajoutons qu'il faudra retenir pour la suite que les coefficients de diffusion g_x et g_y calculés, proportionnels aux conductances de Thouless D_x et D_y , sont bornés par 2, contrairement à la conductance usuelle (dans le bulk) qui diverge lorsque les porteurs sont complètement délocalisés.

5.2.3 Discussion du rôle de l'approximation Fixed Node

Dans l'approximation Fixed Node (§4.3.3), les coefficients de diffusion g_x et g_y sont nécessairement positifs par construction. En effet, si l'on raisonne par exemple à partir de l'algorithme GFMC, on voit bien que $\langle R_x^2(\beta) \rangle$ et $\langle R_y^2(\beta) \rangle$ ne peuvent qu'augmenter au cours du temps imaginaire β puisque $R_x^2 > 0$, $R_y^2 > 0$ et la moyenne quantique $\langle \cdot \rangle$ est prise en pondérant les valeurs de R_x^2 et R_y^2 des différents marcheurs par des poids b_R toujours positifs (voir §4.3). Cependant, on ne nie pas qu'il puisse exister des systèmes fermioniques pour lesquels la conductance de Thouless est en réalité négative et donc pour lesquels le coeffi-

⁶Tout au long de cette thèse, le cas sans désordre a été en réalité étudié en ajoutant un désordre très faible de l'ordre de $W = 0.001$ de façon à lever les dégénérescences du problème à un corps, diagonalisé de manière exacte. Nous avons vérifié que ce petit désordre, purement technique, ne modifie pas les propriétés du système sans désordre.

cient de diffusion du centre de masse en temps imaginaire l'est aussi. Il est bien connu par exemple que la conductance de Thouless est négative dans des systèmes unidimensionnels contenant un nombre pair d'électrons sans spin⁷ [146]. C'est aussi le cas dans des systèmes bidimensionnels d'électrons ayant plusieurs états fondamentaux dégénérés [93]. De façon générale, on ne peut pas exclure qu'il existe à deux dimensions des configurations particulières du désordre et/ou des valeurs de l'interaction tels que les coefficients de diffusion g_x et/ou g_y soient négatifs (pour des fermions bien sûr). Ainsi, il faut être conscient qu'en utilisant l'approximation Fixed Node, on ne calcule pas toujours la vraie conductance de Thouless du système. Malheureusement, à ce jour, on ne sait pas très bien en quoi consiste physiquement cette approximation, c'est-à-dire quel est le lien entre nos coefficients de diffusion toujours positifs et les vrais coefficients de diffusion qui peuvent être négatifs : est-ce que l'approximation revient simplement à prendre toujours la valeur absolue ou est-ce plus complexe ?

Quoi qu'il en soit, le problème étant extrêmement difficile, nous n'avons pas d'autre choix que d'utiliser cette approximation. Pour justifier toutefois du bien-fondé de l'ensemble de nos résultats numériques, nous avons établi tout au long de cette thèse, une série d'arguments qui nous conforte dans l'idée que l'approximation Fixed Node est une bonne approximation et qu'on peut lui accorder notre confiance :

- L'approximation Fixed Node a déjà été validée maintes et maintes fois dans la littérature. Par exemple, divers algorithmes Monte Carlo dans l'approximation Fixed Node ont servi à la tabulation des énergies de corrélation intervenant dans les méthodes DFT (basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité). Et les résultats obtenus, comparés aux données expérimentales, se sont avérés remarquables. Aujourd'hui, ces méthodes DFT sont utilisées avec succès dans de multiples domaines, aussi bien en physique de la matière condensée qu'en chimie quantique, et sont à l'origine de plusieurs dizaines de publications par an.
- Sans interaction, nos algorithmes GFMC et RQMC dans l'approximation Fixed Node nous fournissent le fondamental exact de notre modèle, car notre fonction guide est prise elle-même égale à ce fondamental (et donc en particulier de même structure nodale). Or, ces deux algorithmes ne différencient pas le cas corrélé ($r_s \neq 0$) du cas décorrélé ($r_s = 0$), dans le sens où ils fonctionnent exactement de la même manière dans les deux cas. En particulier, il n'est pas plus difficile pour le Monte Carlo de résoudre le problème avec interaction que sans.
- Les coefficients de diffusion g_x et g_y que nous calculons dans l'approximation Fixed Node, qu'ils soient égaux (à un coefficient multiplicatif près) ou non à la conductance de Thouless exacte, sont invariants de jauge et sont donc quoi qu'il arrive, de bonnes mesures de la localisation.
- On verra au §5.3.2 que l'on retrouve avec notre méthode dans l'approximation Fixed Node, la fonction d'échelle $\beta(g)$ de la localisation, avec ou sans interaction. On admettra facilement qu'il y a tout-de-même peu de chance que d'une part les corrélations modifient

⁷A ce sujet, pour comprendre un peu mieux le problème du signe de la conductance de Thouless, nous nous sommes intéressés au cas unidimensionnel. Cette réflexion a donné naissance à l'article [289] que l'on pourra trouver en annexe ?? . Il y est établi une borne inférieure pour l'énergie libre de l'anneau unidimensionnel, quelque soit la forme du potentiel d'interaction ou des potentiels extérieurs. Le signe du courant permanent est ensuite discuté. Nous n'en parlerons pas plus dans ce manuscrit dans la mesure où ces travaux s'éloignent de la problématique centrale de cette thèse. En outre, ils sont le fruit d'une collaboration avec X. Waintal, K. Kazymyrenko, M. Houzet, P. Schmitteckert et D. Weinmann, à laquelle nous n'avons en fait que très modestement participé.

la fonction d'échelle sans interaction et d'autre part que l'approximation Fixed Node fausse les résultats, de sorte qu'au final la fonction d'échelle corrélée retombe justement « par hasard » sur la fonction d'échelle bien connue sans corrélation.

- On verra aussi au §5.3.3 et §6 que l'on retrouve la forme bien connue sans interaction $\xi = Ak_{Fl} \exp(Bk_{Fl})$ pour la longueur de localisation ξ et que cette forme est inchangée avec interaction, quitte à renormaliser les paramètres A et B . On montrera également que nos résultats sont qualitativement en accord avec les théories perturbatives de B. Altshuler et A. Aronov, en ce qui concerne les effets des interactions sur les propriétés de localisation du gaz 2D.
- A la fin du §5.3.3 (figure 5.11), on vérifiera la stabilité de nos résultats face à un changement de la structure nodale de la fonction guide (de laquelle dépend l'approximation Fixed Node). Plus précisément, on montrera que les longueurs de localisation calculées à partir de la fonction guide « Liquide » ou à partir de la fonction guide « Hartree », sont égales aux erreurs statistiques près. En particulier, même en partant de la fonction guide « Hartree » délocalisée par les interactions, la méthode parvient à déterminer le fondamental qui au contraire, sans spin, se localise avec les interactions.
- Enfin, on s'attend *a priori* à ce que l'approximation Fixed Node localise le système, en coupant des liens de $|R\rangle = |r_1^{\vec{r}}, \dots, r_N^{\vec{r}}\rangle$ vers $|R'\rangle$. Toutefois, ceci n'a pas empêché notre méthode à mettre en évidence un effet de délocalisation par les interactions, avec spin et/ou vallée (voir §6).

Ainsi, même si on ne comprend pas très bien tout ce qui est caché derrière l'approximation Fixed Node que nous utilisons, on peut avoir confiance dans les résultats présentés dans cette thèse concernant les propriétés de localisation du système.

5.2.4 Lois de distribution des coefficients de diffusion

On s'intéresse dans cette partie à la distribution des coefficients de diffusion g_x (ou de manière équivalente g_y) pour différents échantillons, c'est-à-dire différentes configurations du potentiel aléatoire $v(\vec{r})$, tous les paramètres N , L_x , L_y , r_s et k_{Fl} étant fixés par ailleurs. Le but est de déterminer comment moyenner les g_x sur le désordre de sorte que la valeur moyenne ainsi obtenue caractérise bien le système. Sur la figure 5.5, nous avons tracé en rouge les distributions de probabilité $P(\log g_x)$ des $\log g_x$, d'un système sans interaction, pour différents désordres k_{Fl} . Pour cela, nous avons calculé numériquement les $\log g_x$ pour une centaine d'échantillons puis nous avons utilisé un petit programme qui permet essentiellement de lisser l'histogramme de distribution des $\log g_x$. Nous avons rajouté en bleu, pour chaque désordre, la distribution de probabilité $P(\log g_x)$ qu'auraient les $\log g_x$ si les g_x suivaient une loi normale (ou gaussienne) :

$$P_g(g_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_g} \exp \left[-\frac{(g_x - \overline{g_x})^2}{2\sigma_g^2} \right]$$

et en vert, celle qu'auraient les $\log g_x$ si les g_x suivaient une loi log-normale :

$$P_{\log}(g_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}g_x\sigma_{\log}} \exp \left[-\frac{(\log g_x - \overline{\log g_x})^2}{2\sigma_{\log}^2} \right]$$

où $\overline{g_x}$, $\overline{\log g_x}$, σ_g et σ_{\log} sont respectivement les valeurs moyennes et les variances de ces distributions que l'on estime numériquement (et non pas des paramètres ajustables, sinon les

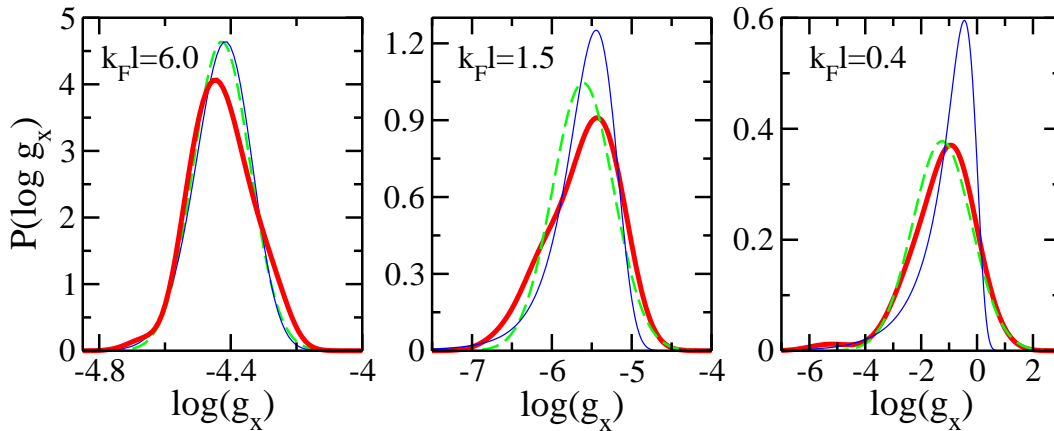


FIG. 5.5 – Distribution de probabilité $P(\log g_x)$ de $\log g_x$ pour le système constitué de $N = 16$ électrons (sans spin, sans vallée) dans 40×40 sites, à $r_s = 0$ et différents désordres, $k_F l = 6.03$ (à gauche), $k_F l = 1.51$ (au milieu) et $k_F l = 0.38$ (à droite). Les courbes rouges en gras correspondent aux distributions de probabilité calculées à partir de nos données numériques avec, à chaque fois, une centaine d'échantillons. Les courbes bleues et les courbes vertes en pointillés donnent respectivement les distributions de probabilité $P(\log g_x)$ si g_x suit une loi de distribution normale ou une loi de distribution log-normale.

fits seraient bien meilleurs). A faible désordre ($k_F l > 1$), on constate que les g_x ne suivent ni une loi normale, ni une loi log-normale mais qu'aucune de ces deux lois n'est très éloignée de la vraie distribution des g_x . En revanche, à fort désordre dans le régime localisé ($k_F l < 1$), la distribution des coefficients de diffusion g_x se rapproche étroitement d'une distribution log-normale. C'est pourquoi, tout au long de cette thèse, on a systématiquement moyenné les $\log g_x$ et non pas les g_x (en l'occurrence sur quelques dizaines à quelques centaines d'échantillons). On est ainsi assuré que dans le régime localisé qui nous intéresse particulièrement, la valeur moyenne calculée $\overline{\log g_x}$ caractérise bien le système, puisqu'elle coïncide avec la valeur la plus probable de $\log g_x$. A plus faible désordre, calculer $\overline{\log g_x}$ n'est pas non plus mauvais. Cette étude de la loi de distribution des coefficients de diffusion mériterait néanmoins d'être affinée et étendue aux systèmes corrélés ($r_s \neq 0$). Ajoutons que dans la suite, les barres d'erreur indiquées sur les valeurs moyennes seront toujours celles liées à la statistique du potentiel aléatoire, les erreurs Monte Carlo étant plus petites.

5.3 Extrapolation à la limite thermodynamique : théorie d'échelle

Dans cette section, nous montrons comment extraire pour chaque système de désordre $k_F l$ et d'interaction r_s , à partir de nos données Monte Carlo de coefficients de diffusion g_x et g_y , une longueur de localisation $\xi(k_F l, r_s)$, qui soit celle du système thermodynamique ($N \gg 1$) à la limite continue ($\nu \ll 1$). L'idée est de calculer la fonction d'échelle β de la théorie d'échelle à un paramètre car, comme nous l'avons vu au §1.3.3, le paramètre en question est justement la longueur de localisation du système à la limite thermodynamique. Rappelons que nous n'étudions dans ce chapitre que des systèmes d'électrons sans spin et sans vallée.

Pour apprécier correctement la suite du manuscrit, il est important de garder en tête

que nos simulations Monte Carlo sont extrêmement coûteuses en temps de calcul. Ce temps augmente bien sûr avec la taille du système mais aussi avec le degré de désordre $1/k_F l$ (car il faut d'autant plus moyenner sur les échantillons) et le degré d'interaction r_s (car plus r_s est grand, plus il faut un grand temps imaginaire β pour projeter la fonction guide sur le fondamental). Typiquement, une seule simulation correspondant à un jeu de paramètres $(N, \nu, k_F l, r_s)$ coûte de l'ordre de 500 à 1000 heures de temps de calcul sur des clusters récents⁸ (pour des valeurs $N \approx 10 - 40$, $\nu \approx 1/25$, $k_F l \approx 1$ et $r_s \approx 0 - 8$) et nous avons aussi calculé quelques points nécessitant chacun plus de 10000 heures de calcul, soit plus d'un an sur un PC de bureau. Ainsi, chaque point a dû être mûrement réfléchi avant d'être calculé.

5.3.1 Dépendance du coefficient de diffusion avec la taille du système

Nous montrons ici numériquement que le coefficient de diffusion du centre de masse, introduit au §5.2.2, est effectivement une bonne mesure des propriétés de localisation du système. Ainsi, nous avons tracé sur la figure 5.6, $\overline{\log g} = (\overline{\log g_x} + \overline{\log g_y})/2$ (moyenné sur le désordre) en fonction de la taille $L = L_x = L_y$ de systèmes carrés, à remplissage $\nu = 1/25$ fixé, pour différentes valeurs du désordre et des interactions. Sans interaction (voir §1.3), on s'attend à ce qu'à faible désordre, $\overline{\log g}$ soit indépendant de L , conformément à la loi d'Ohm. A plus fort désordre, la conductance (de Thouless) doit décroître exponentiellement avec L de sorte que $\overline{\log g} = \log g_0 - L/\xi$ où ξ , indépendant de L , est la longueur de localisation du système thermodynamique. La théorie d'échelle de la localisation [1] prédit en outre que $\log g_0$ est une pure constante numérique, indépendant de l'amplitude du désordre. Nos résultats numériques présentées sur la figure 5.6 sont en parfait accord avec ces prédictions : pour $k_F l \gg 2.7$, $\overline{\log g}$ est à peu près constant et à plus fort désordre, $\overline{\log g}$ décroît linéairement avec L (symboles vides pour $r_s = 0$). De plus, toutes ces droites correspondant à différents désordres se rejoignent en un même point à $L = 0$, tel que $\log g_0 = -0.47 \pm 0.08$. Ainsi, on retrouve bien avec notre méthode numérique la théorie d'échelle de la localisation sans interaction. On comprend par ailleurs, qu'en fittant des droites sur $\overline{\log g}(L)$, il est possible d'extraire à fort désordre la longueur de localisation ξ du système thermodynamique pour différents désordres. On reviendra sur ce point au §5.3.3.

Il est remarquable sur la figure 5.6 que lorsque l'on branche les interactions électroniques ($r_s = 2, 4$ et 6 , symboles pleins), les courbes $\overline{\log g}(L)$ restent des droites qui se rejoignent toujours au même point à $L = 0$. Cela signifie que la théorie d'échelle de la localisation reste valable avec interaction pour ces systèmes d'électrons sans spin et sans vallée ou autrement dit, que la fonction d'échelle $\beta(g)$ est inchangée par les interactions. On constate par ailleurs sur cette même figure que les interactions localisent le système sans spin et sans vallée, puisque les droites se décalent vers le « bas » (*i.e.* le régime de plus en plus localisé) au fur et à mesure que r_s est augmenté. Nous reviendrons sur les implications physiques de ces résultats au §6.1.

En principe, les courbes $\log g(L)$ suffisent pour étudier la localisation mais en pratique, elles sont trop coûteuses en temps de calcul car elles nécessitent de varier la taille du système jusqu'à des valeurs d'autant plus élevées que sa longueur de localisation est grande. C'est pourquoi il est intéressant de calculer directement la fonction d'échelle $\beta(g) = d \log g / d \log L$

⁸Nous avons utilisé les clusters locaux du SPEC et de l'IPhT permettant de calculer sur 16 processeurs en parallèle. Nous avons aussi profité de la grosse machine *platine* du CCRT, sur laquelle nous avons calculé sur 16, 32 ou 64 processeurs en parallèle. Sur cette machine, près de 500000 heures nous ont été attribuées en trois ans, toutes dépensées. Nous pensons avoir utilisé à peu près le même nombre d'heures sur les clusters locaux mais cela est difficile à estimer.

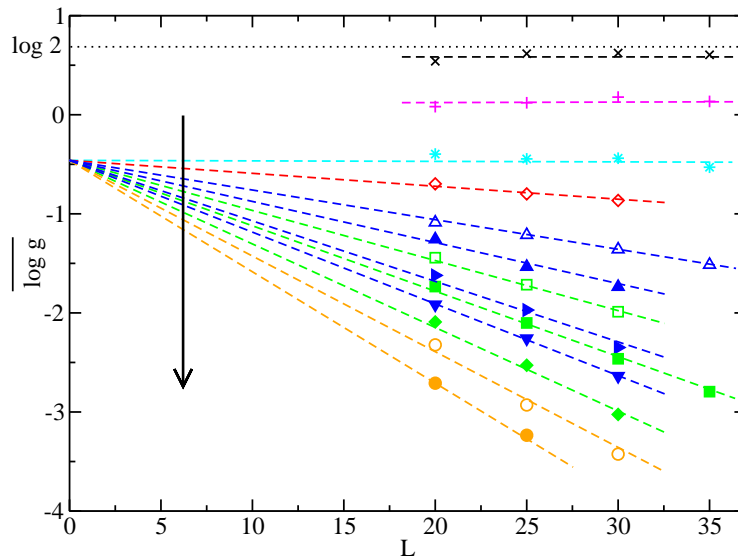


FIG. 5.6 – Logarithme du coefficient de diffusion $\overline{\log g}$ en fonction de la taille L de systèmes carrés d'électrons sans spin et sans vallée, à $\nu=1/25$. Les symboles correspondent à différents degrés de désordre et d'interaction, augmentés de haut en bas comme indiqué par la flèche : $k_{Fl}=2.4 \times 10^7$ i.e. système propre, $r_s=0$ (\times), $k_{Fl}=6.03$, $r_s=0$ ($+$), $k_{Fl}=2.68$, $r_s=0$ ($*$), $k_{Fl}=1.97$, $r_s=0$ (\diamond), $k_{Fl}=1.51$, $r_s=0$ (\triangle), $k_{Fl}=1.51$, $r_s=2$ (\blacktriangle), $k_{Fl}=1.51$, $r_s=4$ (\blacktriangleright), $k_{Fl}=1.51$, $r_s=6$ (\blacktriangledown), $k_{Fl}=1.19$, $r_s=0$ (\square), $k_{Fl}=1.19$, $r_s=2$ (\blacksquare), $k_{Fl}=1.19$, $r_s=4$ (\blacklozenge), $k_{Fl}=0.80$, $r_s=0$ (\circ) et $k_{Fl}=0.80$, $r_s=2$ (\bullet). La classe de fonctions guides utilisée est la classe « Hartree ». Le fait que les fits linéaires (droites en pointillés) se rejoignent en un même point à $L=0$ est la signature de la théorie d'échelle à un paramètre dans le régime localisé.

qui donne intrinsèquement la dépendance de g avec L . Il se trouve de plus que cette fonction β est devenu un « classique » de la littérature et il est donc avantageux d'utiliser cet outil largement diffusé. Dans la suite, nous expliquons comment calculer intelligemment $\beta(g)$.

5.3.2 Calcul de la fonction d'échelle β

Il est possible d'extraire la fonction d'échelle $\beta(g) = d \log g / d \log L$ (§1.3.3) de la figure 5.6, par la formule $\beta(g) = \frac{\log g(L_+) - \log g(L_-)}{\log L_+ - \log L_-}$ mais cette méthode n'est pas pratique et trop imprécise. Une méthode beaucoup plus efficace consiste à utiliser des échantillons non pas carrés, mais rectangulaires, tels que⁹ $L_y = 1.5 L_x$. Pour chaque échantillon (i.e. configuration du potentiel de désordre), on calcule les coefficients de diffusion g_x et g_y dans les directions x et y puis on déduit $\beta(g) = \frac{\log g_y - \log g_x}{\log L_y - \log L_x}$ en fonction de $\overline{\log g} = (\log g_x + \log g_y)/2$, en moyennant sur les échantillons. Ainsi, en une seule simulation Monte Carlo, correspondant à un jeu de paramètres (N, ν, k_{Fl}, r_s) , on est capable de calculer un point de la courbe β vs $\overline{\log g}$. On peut ensuite obtenir la courbe complète en faisant varier par exemple pour un système donné le paramètre de désordre k_{Fl} , par l'intermédiaire de l'amplitude W du potentiel aléatoire. Le résultat est montré sur la figure 5.7.

⁹Ce rapport $L_y/L_x = 1.5$ n'est pas choisi par hasard. Il permet d'avoir une surface de Fermi à peu près isotrope. Si on le respecte pas, la surface de Fermi devient clairement anisotrope et les effets de taille finie sont importants. En particulier, on ne retrouve pas $\beta \rightarrow 0$ à grand g .

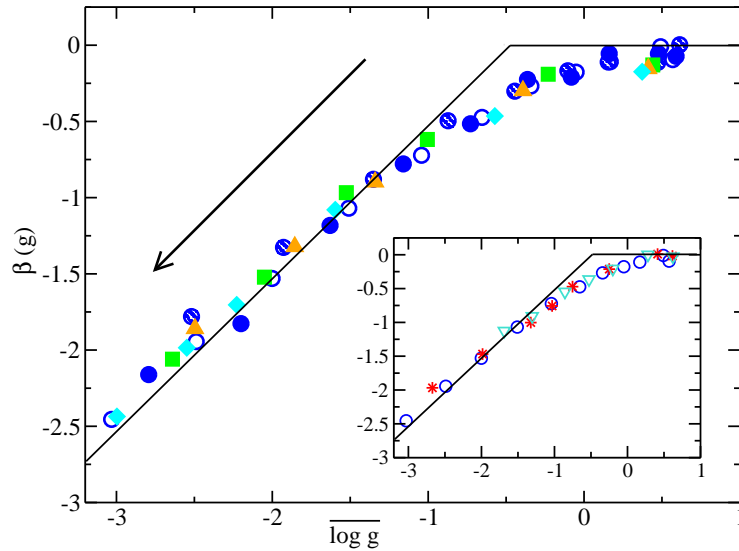


FIG. 5.7 – Fonction d'échelle $\beta(g)$ en fonction de $\overline{\log g}$, calculée dans des systèmes rectangulaires d'électrons sans spin et sans vallée tels que $\nu = 1/24$. Les symboles correspondent à différentes tailles de système, $N = 16$ particules dans 16×24 sites (symboles vides), $N = 25$ dans 20×30 (symboles pleins), $N = 36$ dans 24×36 (symboles rayés), et différents degrés d'interaction, $r_s = 0$ (cercles), $r_s = 2$ (carrés), $r_s = 4$ (triangles), $r_s = 6$ (diamants), pour plusieurs degrés de désordre ($k_{Fl} > 0.67$). Les droites noires correspondent aux limites asymptotiques attendues. En augmentant le désordre ou les interactions, le système s'enfonce vers le régime de plus en plus localisé, comme indiqué par la flèche. Insert : idem pour différents facteurs de remplissage, $\nu = 1/24$ (cercles), $\nu = 1/54$ (étoiles) et $\nu = 1/96$ (triangles), avec $N = 16$ particules, à $r_s = 0$.

Fonction d'échelle β sans interaction

Sans interaction (insert et cercles de la figure principale), on constate que toutes les données pour différentes valeurs de N , k_{Fl} et ν se superposent sur une même courbe, et cela sans aucune opération particulière : la superposition apparaît directement sur les données brutes. Or cette superposition des courbes est exactement ce qui est prédit par la théorie d'échelle de la localisation sans interaction lorsqu'elle stipule que la fonction d'échelle β est une fonction de g uniquement. De plus, la courbe $\beta(g)$ obtenue sur la figure 5.7 est en accord avec les limites asymptotiques connues, correspondant aux droites noires de pentes 1 (à fort désordre, régime localisé) et 0 (à faible désordre, loi d'Ohm). Ici, l'abscisse du point d'intersection de ces deux droites, $\log g_0$, est extrait de la figure 5.6. Ainsi, on vérifie bien la théorie d'échelle de la localisation sans interaction, ce qui valide notre méthode numérique. Nous avons déjà abouti à cette même conclusion au §5.3.1 mais le calcul effectif de la fonction β rend à présent notre analyse de la localisation beaucoup plus précise. Il faut toutefois signaler que notre fonction $\beta(g)$, obtenue numériquement, diffère de celle introduite par E. Abrahams *et al* dans [1] dans le sens où g désigne pour nous le coefficient de diffusion du centre de masse (proportionnel à la conductance de Thouless), majoré par la valeur 2 (§5.2.2), tandis que dans [1], g correspond à la conductance en unité de e^2/h qui diverge sans interaction et sans désordre. Le fait que notre g soit borné rend d'ailleurs difficile la confrontation de nos données $\beta(g)$ avec la formule perturbative $\beta(g) = -a/g$ (équation (1.25), a constante) dans le régime intermédiaire de localisation faible, car le cross-over entre régime localisé et régime diffusif est extrêmement étroit. Il s'avère que nos données ne sont pas en contradiction avec cette formule mais il

serait présomptueux de dire qu'elles sont en accord, compte-tenu de nos barres d'erreur (non montrées sur la figure 5.7 mais du même ordre de grandeur que celles de la figure 5.8).

Effet des interactions sur la fonction d'échelle β

On branche à présent les interactions coulombiennes sur un système donné, constitué en l'occurrence de $N = 25$ électrons dans 20×30 sites. On constate sur la figure 5.7 (carrés, triangles et diamants de la figure principale) que les courbes $\beta(g)$, obtenues chacune en variant le désordre, continuent à se superposer aux autres courbes, aux erreurs statistiques près. Ainsi, la théorie d'échelle à un paramètre reste valable avec interaction pour ces systèmes d'électrons sans spin et sans vallée, ce que nous avons déjà vu au §5.3.1. Le résultat établi dans ce même paragraphe selon lequel les interactions et le désordre localisent le système, se traduit ici par le fait que si l'on augmente les interactions et/ou le désordre sur un point β donné alors celui-ci se déplace sur la courbe vers le bas, c'est-à-dire vers le régime de plus en plus localisé. Nous reviendrons sur ces conclusions au §6.1 lorsque nous discuterons des implications physiques de ces résultats. Pour l'heure, puisque nous nous intéressons uniquement à la méthode utilisée pour étudier l'effet des corrélations sur la localisation d'Anderson, il est simplement important de retenir que si la fonction d'échelle à un paramètre $\beta(g)$ est inchangée par les interactions alors il est encore possible avec interaction d'extraire *le* paramètre de la théorie d'échelle à un paramètre qui est la longueur de localisation du système thermodynamique. Nous verrons comment procéder au §5.3.3.

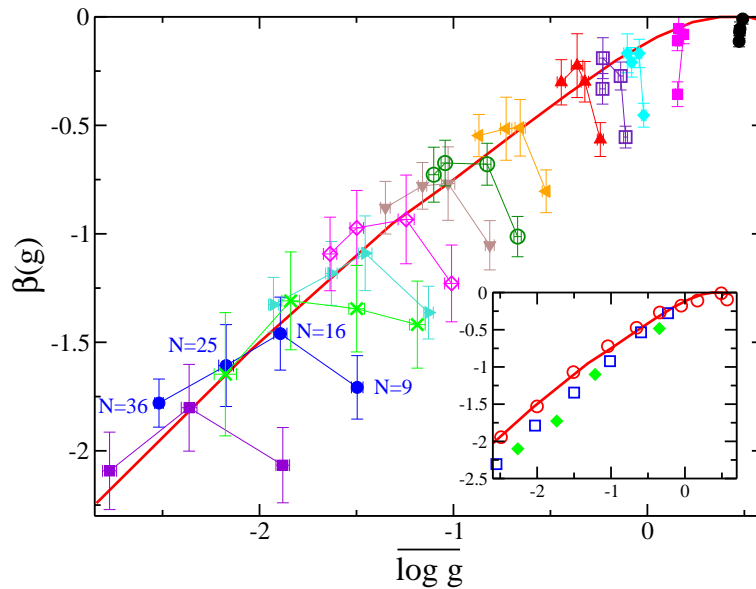


FIG. 5.8 – Effet de taille sur la fonction d'échelle $\beta(g)$ vs $\overline{\log g}$, à $\nu = 1/24$, pour des électrons sans spin et sans vallée. Les symboles correspondent à différents degrés de désordre ($0.82 < k_{Fl} < 25.2$) et d'interactions ($r_s = 0$ (symboles pleins), $r_s = 2$ (symboles vides) et $r_s = 4$ (croix)) pour différentes tailles de systèmes ($N = 9$, $N = 16$, $N = 25$ et $N = 36$). La ligne rouge est la fonction d'échelle du gaz 2D, calculée à $r_s = 0$ avec une extrême précision (avec le système contenant $N = 16$ électrons dans 16×24 sites). Insert : $\beta(g)$ en fonction de $\overline{\log g}$ avec $N = 16$ dans 16×24 sites, à $r_s = 0$ (cercles, ligne rouge), $r_s = 4$ (carrés) et $r_s = 6$ (diamants), pour différents désordres ($k_{Fl} > 0.67$). Pour ce petit système, des déviations apparaissent à la théorie d'échelle à « forte » interaction ($r_s \gg 4$).

Effet de taille finie en N sur la fonction d'échelle β

Nous avons déjà discuté au §3.4.2 de l'importance, mais aussi de la difficulté, de contrôler les effets de taille finie en N sur nos résultats. En effet, nous avons pour objectif de décrire les propriétés de localisation du gaz 2D à la limite thermodynamique ($N \gg 1$) mais nous savons aussi que nous sommes limités par le temps de calcul à l'étude de systèmes contenant quelques dizaines de particules. Sur la figure 5.8, nous étudions les effets de N -fini sur la fonction d'échelle $\beta(g)$. Nous avons ainsi tracé $\beta(g)$ en fonction de $\overline{\log g}$ pour des systèmes de tailles différentes : $N = 9$, $N = 16$, $N = 25$ et $N = 36$, à remplissage ν fixé, toujours pour des électrons sans spin et sans vallée. Les points à $N = 9$ montrent un fort effet de taille finie puisqu'ils ne tombent pas sur la fonction d'échelle universelle (ligne rouge). En revanche, on constate que $N = 16$ particules suffisent pour retrouver cette fonction universelle. Plus précisément, $N = 16$ particules suffisent à faible interaction ($r_s \ll 2$) mais à plus forte interaction ($4 \lesssim r_s \lesssim 8$, croix de la figure principale et insert), des déviations apparaissent à la théorie d'échelle si bien qu'il faut prendre en réalité $N \geq 25$ particules pour s'affranchir des effets de taille finie, à ces degrés de corrélation. Quoiqu'il en soit, qu'il en faille 16 ou 25, il s'avère que très peu de particules suffisent pour décrire la limite thermodynamique, ce qui est très avantageux. Cela se comprend notamment par le fait que le désordre lisse la surface de Fermi. On vérifie par ailleurs que si l'on augmente davantage N alors la « conductance » g diminue en suivant la courbe $\beta(g)$ (la loi d'échelle $\beta(g)$ donnant justement, par définition, le comportement de g avec la taille du système).

5.3.3 Extraction de la longueur de localisation ξ à partir de $\beta(g)$

Nous expliquons dans cette section comment extraire la longueur de localisation $\xi(k_F l, r_s)$ du système thermodynamique à la limite continue, à partir de la fonction d'échelle $\beta(g)$. Nous procédons ensuite à plusieurs vérifications afin de valider notre méthode. On commence par vérifier que les longueurs de localisation calculées ne dépendent ni de la taille du système, ni du facteur de remplissage, et donc que l'on atteint bien la limite thermodynamique continue. Puis nous vérifions que nous retrouvons bien ce qui est connu sur la localisation d'Anderson sans interaction, point de départ de notre étude. Enfin, nous montrons que nos résultats ne dépendent pas du choix initial de la fonction guide (§5.1) et sont donc insensibles à l'approximation Fixed Node.

Définition de la longueur de localisation ξ

Nous avons vu au §5.3.1 que la longueur de localisation ξ du système thermodynamique peut être extraite des courbes $\overline{\log g}(L)$, dans le régime localisé $\xi \ll L$ où $\overline{\log g} = \log g_0 - L/\xi$. Initialement, c'est cette méthode que nous avons utilisée lorsque nous étudions que des échantillons carrés mais elle n'est pas pratique. Le calcul de la fonction d'échelle $\beta(g)$ sur des échantillons rectangulaires (§5.3.2) nous permet d'extraire ξ de manière beaucoup plus efficace. En effet, tant que la loi d'échelle à un paramètre est vérifiée, on a par intégration de $\beta(g) = d \log g / d \log L$:

$$\int_{\log g_1}^{\log g_2} \frac{d \log g}{\beta[\log g]} = \log\left(\frac{L_2}{L_1}\right),$$

où $g_1 = g(L_1)$ et $g_2 = g(L_2)$, si bien que la quantité

$$\frac{1}{\xi} \equiv \frac{1}{L} \exp \int_{(\log g_0) - 1}^{\log g} \frac{d \log u}{\beta[\log u]} \quad (5.21)$$

est indépendante de la taille L du système (et donc de N à $\nu \ll 1$ fixé). Dans cette expression, la borne inférieure de l'intégrale, $(\log g_0) - 1$, est choisie de sorte qu'on retrouve bien dans le régime localisé, avec cette définition de ξ , $g = g_0 \exp(-L/\xi)$. Comme nous n'avons observé aucune déviation à la fonction d'échelle $\beta(g)$, avec ou sans interaction, on peut légitimement utiliser la définition (5.21) pour extraire la longueur de localisation ξ du système. Plus précisément, même s'il existe des déviations à la fonction $\beta(g)$ théorique sans interaction, celles-ci sont petites devant nos barres d'erreur dans le régime de paramètres considérés et on peut les ignorer. Il est par ailleurs important de souligner que cette méthode nous permet d'extraire ξ dans n'importe quel régime de désordre, et pas uniquement dans le régime localisé où $\xi \ll L$.

En pratique, pour extraire les longueurs de localisation ξ , on a d'abord calculé très précisément la fonction d'échelle $\beta(g)$ sans interaction, à partir du système contenant $N = 16$ électrons (sans spin, sans vallée) dans 24×36 sites. Puis on a fitté un polynôme sur les données de $1/\beta$ de façon à pouvoir facilement effectuer numériquement l'intégration (5.21), où l'on a d'ailleurs toujours pris $L = \sqrt{L_x L_y}$ et $(\log g_0) - 1 = -1.5$. Pour calculer ξ pour un jeu de paramètres (N, ν, k_{Fl}, r_s) , il nous a alors suffi de calculer le coefficient de diffusion g et d'utiliser (5.21) (après avoir constaté, répétons-le, que la loi d'échelle $\beta(g)$ est bien inchangée avec interaction). Signalons pour finir que nous avons vérifié qu'en calculant $\beta(g)$ sans interaction avec non pas $N = 16$ électrons mais $N = 36$ électrons, on retrouve bien les mêmes longueurs de localisation par (5.21).

Effet de taille et effet de réseau sur la longueur de localisation ξ

Sur la figure 5.9 (à gauche), on a tracé l'inverse de la longueur de localisation en fonction du nombre N d'électrons dans le système, à facteur de remplissage ν constant, pour différentes valeurs de l'interaction et du désordre. Les barres d'erreur indiquées sont déduites de l'incertitude (à un sigma) sur $\overline{\log g}$, en utilisant la définition (5.21). Sauf à très petits N (données pas toutes montrées), on constate que la longueur de localisation ξ ne dépend effectivement pas de la taille du système, comme prédit au paragraphe précédent. Plus précisément, à faible interaction ($r_s \lesssim 2$), seulement $N = 9$ particules suffisent pour atteindre la limite thermodynamique. Les effets de taille finie sur ξ sont donc moins importants que ceux sur $\beta(g)$ puisque nous avons vu au §5.3.2 que $N = 16$ particules sont nécessaires à ces degrés de corrélation pour retrouver la fonction d'échelle universelle. A plus forte interaction ($4 \lesssim r_s \lesssim 8$), il persiste un léger effet de taille finie jusqu'à $N = 25$ mais l'erreur faite sur ξ en utilisant seulement $N = 9$ électrons reste faible. Ainsi, cette figure prouve que les longueurs de localisation que nous calculons avec notre méthode correspondent bien aux longueurs de localisation du système à la limite thermodynamique.

Sur la figure 5.9 de droite, on étudie cette fois les effets de réseau en ν sur la longueur de localisation ξ , à N fixé. Comme ξ dépend évidemment de la discrétisation du système, on construit une quantité qui n'en dépend *a priori* pas en exprimant ξ en unité de la distance moyenne entre électrons, $a = 1/\sqrt{\pi\nu}$. Sans interaction (symboles vides), a/ξ ne dépend pas de ν pour $\nu \lesssim 0.04$ et donc on atteint bien la limite continue $\nu \ll 1$ pour ces valeurs de ν . Avec interaction ($r_s = 4$, symboles pleins), il existe manifestement un effet de réseau en ν sur

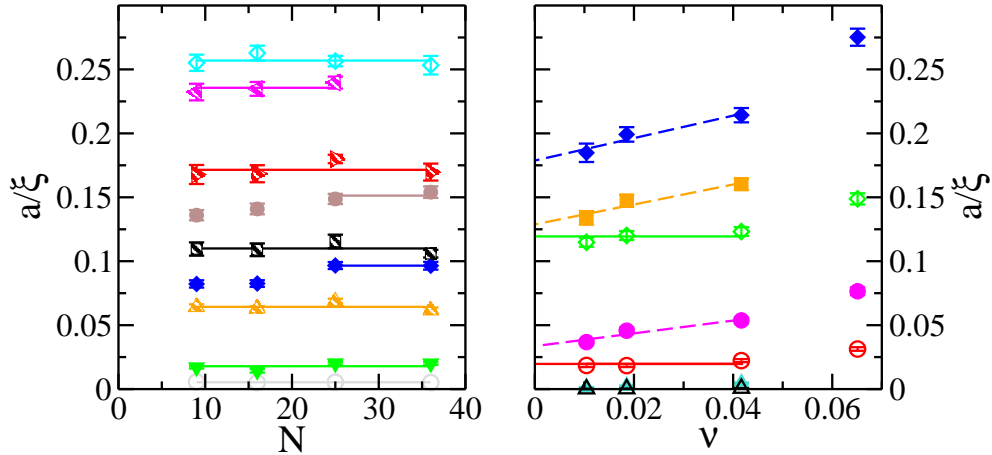


FIG. 5.9 – *A gauche* : a/ξ en fonction du nombre N d'électrons (sans spin et sans vallée) à $\nu = 1/24$ fixé. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction et de désordre ($r_s = 0$ (symboles vides, $0.8 < k_{Fl} < 4.1$), $r_s = 2$ (symboles rayés, $1.0 < k_{Fl} < 2.1$) et $r_s = 4$ (symboles pleins, $1.5 < k_{Fl} < 2.1$)). A faible interaction ($r_s \lesssim 2$), $N = 9$ électrons suffisent pour atteindre la limite thermodynamique. A plus forte interaction ($4 \lesssim r_s \lesssim 8$), il en faut $N = 25$ (mais $N \geq 9$ n'est pas mauvais). *A droite* : a/ξ en fonction du facteur de remplissage ν , avec $N = 25$ fixé. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction ($r_s = 0$ (symboles vides) et $r_s = 4$ (symboles pleins)) et différents degrés de désordre ($k_{Fl} = 6.03$ (triangles), $k_{Fl} = 2.68$ (cercles), $k_{Fl} = 1.51$ (carrés) et $k_{Fl} = 1.25$ (diamants)). Pour $\nu \lesssim 0.04$, les effets de réseau en ν sont négligeables.

a/ξ qui persiste jusqu'aux plus faibles valeurs de ν explorées (sauf à faible désordre, $k_{Fl} > 3$, où $a/\xi \approx 0$) et l'on trouve que le système continu est toujours moins localisé que le système discret. Cela étant dit, pour $k_{Fl} < 3$, on estime l'erreur sur a/ξ en prenant $\nu = 1/24 \approx 0.042$ à 0.03 ce qui est faible devant la variation de a/ξ avec le désordre et les interactions, dans le régime exploré ici et dans la suite. Ainsi, on pourra considérer qu'en prenant $\nu = 1/24$, on atteint la limite continue. Une étude plus systématique des effets de ν sur a/ξ serait néanmoins très profitable. Nous reviendrons sur ces effets de taille et de réseau aux chapitres 6 et 7 lorsque nous rajouterons le spin et les vallées. Nous verrons notamment que les effets de ν -fini observés ne remettent absolument pas en cause nos conclusions.

Étude de la longueur de localisation $\xi(r_s = 0)$ sans interaction

Sans interaction ($r_s = 0$), il est possible de diagonaliser de manière exacte notre Hamiltonien H . Pour calculer la longueur de localisation $\xi_{ex}(L)$ d'un système carré de taille L , on peut alors utiliser la racine carrée du « participation ratio » (équation (5.9)). On peut ensuite déduire la longueur de localisation ξ_{ex} du système thermodynamique en superposant sur une même courbe toutes les données $\xi_{ex}(L)$, selon la loi d'échelle $\xi_{ex}(L)/L = f(\xi_{ex}/L)$. Sur la figure 5.10 (à droite), nous comparons pour un même système carré sans interaction et différents désordres k_{Fl} , les longueurs de localisation ξ_{ex} calculées de manière exacte et les longueurs de localisation ξ calculées en Monte Carlo Quantique (GFMC) via les courbes $\overline{\log g(L)}$ (§5.3.1). Manifestement, les deux méthodes sont en très bon accord puisque l'on trouve $\xi \propto (\xi_{ex} - 1)$. Le retranchement de 1 à ξ_{ex} se comprend par le fait qu'à fort désordre, $\xi \rightarrow 0$ tandis que $\xi_{ex} \rightarrow 1$. Cette figure est donc rassurante quant à la validité de notre code Monte Carlo et l'utilisation du coefficient de diffusion g comme mesure de localisation.

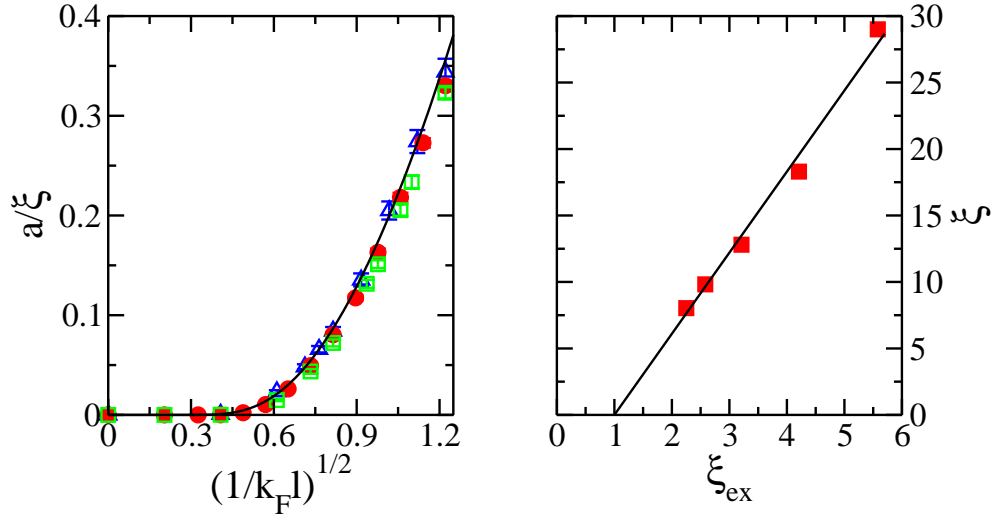


FIG. 5.10 – *A gauche* : a/ξ en fonction de $1/\sqrt{k_F l}$ à $r_s = 0$, pour différents facteurs de remplissage ($\nu = 1/25$ (triangles), $\nu = 1/54$ (cercles) et $\nu = 1/96$ (carrés)). Toutes les données se superposent. La courbe en noire correspond au fit $y = 0.386 x^2 \exp(-0.72/x^2)$. *A droite* : ξ calculée en GFMC en fonction de ξ_{ex} calculée par diagonalisation exacte du problème à un corps (voir texte), à $r_s = 0$, avec $\nu = 1/25$ et $0.67 < k_F l < 1.51$. La ligne droite noire est un fit linéaire $\xi \propto (\xi_{ex} - 1)$.

Par ailleurs, nous avons vu au §1.3.1 que sans interaction, la longueur de localisation du système thermodynamique dans le régime diffusif ($k_F l \gg 1$) s'estime par $\xi = l \exp(\frac{\pi}{2} k_F l)$, soit en exprimant ξ en unité de la distance entre électrons $a = 1/\sqrt{\pi\nu}$:

$$\frac{\xi}{a}(r_s = 0) = \frac{k_F l}{2} \exp\left(\frac{\pi}{2} k_F l\right). \quad (5.22)$$

Ainsi d'après cette formule, sans interaction, ξ/a dépend de $k_F l$ uniquement, où rappelons-le, $k_F l = 192\pi\nu/W^2$ pour des électrons sans spin et sans vallée (équation (3.10)). Nos résultats GFMC présentés sur la figure 5.10 (à gauche) sont en accord avec cette prédiction, pour une large gamme de désordre ($k_F l > 0.5$). En effet, toutes nos données a/ξ obtenues par (5.21) pour différentes valeurs de W et ν se superposent sur une même courbe lorsqu'elles sont tracées en fonction de $k_F l$. Elles sont de plus bien fittées par une courbe du type $a/\xi = (A/k_F l) \exp(-B k_F l)$ mais les paramètres numériques A et B ne correspondent pas à ceux de la formule théorique (5.22) :

$$\boxed{\frac{a}{\xi}(r_s = 0) = \frac{0.386}{k_F l} \exp(-0.72 k_F l)}. \quad (5.23)$$

Que le facteur multiplicatif A ne soit pas exactement celui de la formule théorique ($A = 0.386$ au lieu de 2) n'a rien d'étonnant car la longueur de localisation est définie à une constante multiplicative près, de l'ordre de 1. En revanche, il est plus surprenant que la constante B dans l'exponentielle, qui permet de fitter correctement nos données, ne soit pas celle donnée par la théorie : on trouve $B = 0.72$ au lieu de $\pi/2 \approx 1.57$ et il n'est pas du tout mauvais de prendre $B = \pi/4 \approx 0.79$. A ce jour, nous n'avons pas réussi à expliquer rigoureusement cette différence entre résultat théorique et résultat numérique. Il est probable que la formule

théorique (5.22) ne soit pas entièrement correcte puisqu'elle est dérivée dans le régime diffusif ($k_F l \gg 1$) en également les contributions de Drude σ_D et de localisation faible $\delta\sigma_{WL}$ à la conductivité (alors qu'on pourrait aussi écrire comme point de départ $|\sigma_D| = 2|\delta\sigma_{WL}|$ ce qui donnerait justement $B = \pi/4$). Ou autre hypothèse que nous privilégions : notre longueur de localisation ξ implique tous les électrons et pas seulement ceux au niveau de Fermi, contrairement au ξ de l'équation (5.22). Si l'on remarque que le niveau d'énergie moyen d'un électron est $E_F/2$ alors $k_F l$ doit être remplacé par $k_F l/2$ dans (5.22) pour que cette formule donne le comportement de tous les électrons en moyenne et ainsi, on retrouve le $\pi/4$ dans l'exponentielle. Cela étant dit, nous pensons qu'il ne faut pas donner à cette formule $\xi(k_F l)$ plus de sens qu'elle n'en a : elle donne le comportement exponentiel de ξ en ordre de grandeur mais sa validité quantitative est encore discutable. Bien sûr, il serait intéressant de trancher sur la forme de $\xi/a(k_F l)$ à $r_s = 0$ en effectuant des calculs numériques exacts, pour d'autres définitions de la longueur de localisation que celle employée ici.

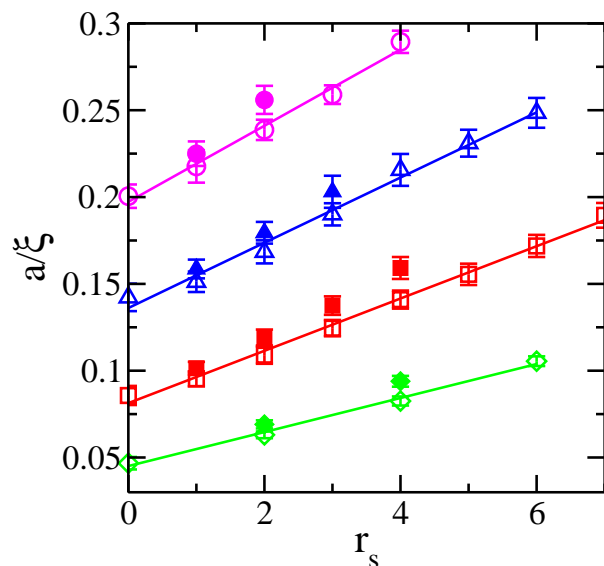


FIG. 5.11 – a/ξ en fonction de r_s , calculées à partir de la fonction guide « Liquide » (symboles pleins) et de la fonction guide « Hartree » (symboles vides), pour différents désordres ($k_F l = 2.05$ (diamants), $k_F l = 1.57$ (carrés), $k_F l = 1.25$ (triangles) et $k_F l = 1.00$ (cercles)). Le système d'étude est constitué de $N = 16$ électrons (sans spin et sans vallée) dans 16×24 sites. Les droites sont des fits linéaires pour guider l'œil. Les résultats obtenus avec les deux types de fonctions guides sont en très bon accord.

Avec interaction : rôle de la fonction guide

Sur la figure 5.11, nous comparons les longueurs de localisation calculées en GFMC à partir de la fonction guide « Liquide » (§5.1.2) et à partir de la fonction guide « Hartree » (§5.1.3), en fonction de l'interaction r_s , pour différents désordres. Nous avons bien sûr vérifié au préalable que sans interaction, les deux longueurs de localisation sont strictement identiques puisqu'à $r_s = 0$, les deux fonctions guides coïncident. Avec interaction, les deux longueurs restent en très bon accord ce qui signifie que nos résultats ne sont pas sensibles au choix de la fonction guide et donc que l'approximation Fixed Node (qui dépend de la fonction guide) ne peut remettre en cause nos conclusions. De plus, l'accord entre ces deux longueurs est un bon test de la robustesse de notre méthode. En effet, même avec la fonction guide « Hartree » qui

est moins localisée que la fonction guide «Liquide», l'algorithme GFMC parvient à trouver l'état fondamental Fixed Node, plus localisé. Nous reviendrons sur l'effet de localisation par les interactions sur les systèmes sans spin et sans vallée au chapitre suivant. Ici, seules notre méthode et sa validité ont été discutées.

Au cours de ce chapitre, nous avons expliqué et validé la méthode que nous avons développée pour étudier les effets des interactions sur la localisation. Dans le chapitre suivant, nous la mettons en pratique et présentons les résultats que nous avons obtenus avec ou sans spin et vallée.

Chapitre 6

Effets des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson à température nulle

Sommaire

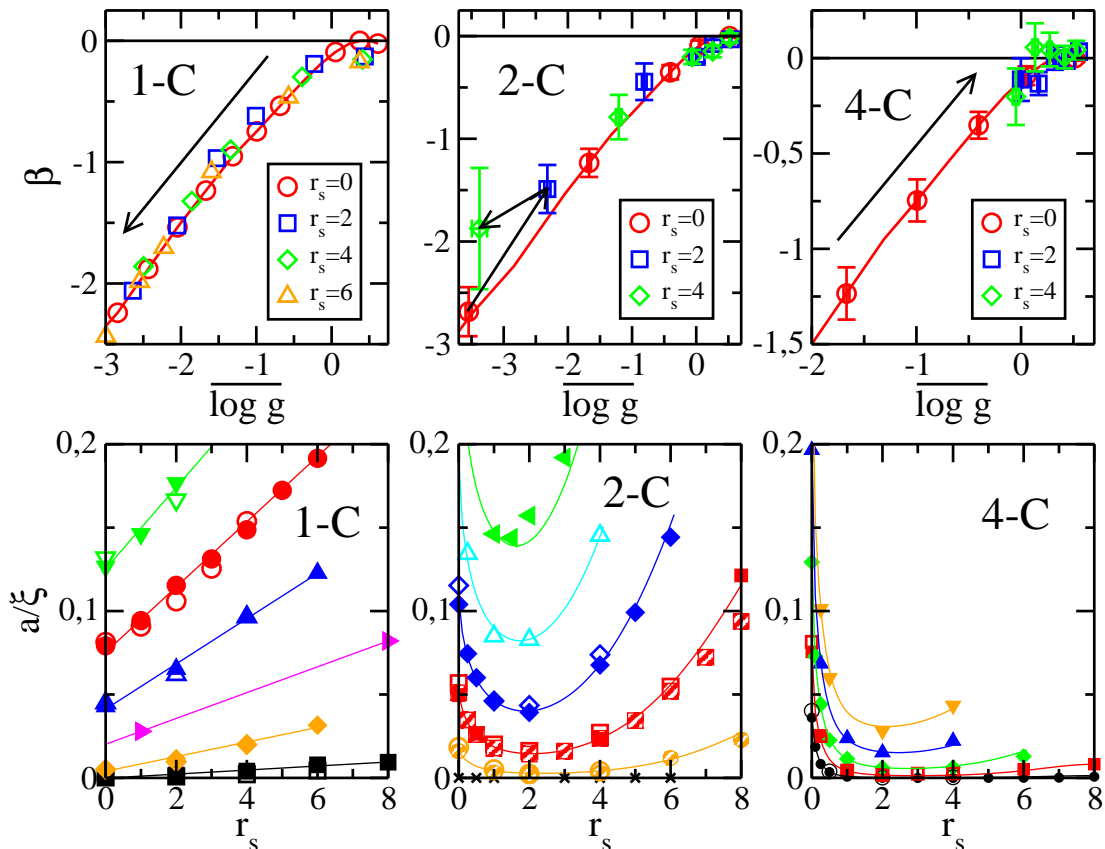
| | |
|---|------------|
| Résumé du chapitre 6 | 146 |
| 6.1 Systèmes à une composante de pseudo-spin | 148 |
| 6.1.1 Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction | 148 |
| 6.1.2 Etude de la longueur de localisation ξ^{1C} : localisation par les interactions | 148 |
| 6.2 Systèmes à deux composantes de pseudo-spin | 151 |
| 6.2.1 Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction | 151 |
| 6.2.2 Etude de la longueur de localisation ξ^{2C} : délocalisation par les interactions | 152 |
| 6.2.3 Test de l'approximation Fixed Node | 157 |
| 6.3 Systèmes à quatre composantes de pseudo-spin | 158 |
| 6.3.1 Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction | 158 |
| 6.3.2 Etude de la longueur de localisation ξ^{4C} : délocalisation drastique par les interactions | 160 |
| 6.4 Conclusion : description du gaz 2D par la théorie du liquide de Fermi | 163 |

Résumé du chapitre 6

On étudie dans ce chapitre l'effet des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson, et en particulier sur la théorie d'échelle, à température nulle. On distingue trois types de systèmes : les systèmes polarisés en spin dans une vallée (1-C), les systèmes non-polarisés en spin dans une vallée (2-C) et les systèmes non-polarisés en spin dans deux vallées (4-C). Dans tous les cas, on trouve que la fonction d'échelle $\beta(g)$ est inchangée en présence d'interaction modérée car nos données avec interaction restent sur la courbe sans interaction (figures du haut) : on en déduit en particulier que le gaz 2D corrélé est toujours isolant à la limite thermodynamique. Il s'avère de plus que les longueurs de localisation ξ de chacun de ces systèmes vérifient la formule suivante (au moins pour $0 \leq r_s \leq 8$) :

$$a/\xi(k_{Fl}, r_s) = (A(r_s)/k_{Fl}) \exp(-B(r_s)k_{Fl}) ,$$

où a est la distance entre particules. La dépendance en r_s de a/ξ est ici uniquement contenue dans la renormalisation des paramètres $A(r_s)$ et $B(r_s)$. Ainsi, nos résultats montrent que les propriétés de localisation du gaz 2D corrélé sont bien décrites par la théorie du liquide de Fermi. On trouve par ailleurs que l'effet des interactions sur la localisation dépend fortement du nombre de degrés de liberté internes des électrons. Les interactions localisent les systèmes polarisés en spin (1-C) tandis qu'elles délocalisent les systèmes non-polarisés (2-C). En présence de dégénérescence de vallées (4-C), l'effet de délocalisation est encore plus important si bien que l'on a $a/\xi \approx 0$ pour $k_{Fl} \gtrsim 1$: la longueur de localisation est alors beaucoup plus grande que la taille du système et donc le système est métallique, au sens pratique.



Dans ce chapitre, on utilise notre méthode numérique présentée aux chapitres 4 et 5 pour étudier l'effet des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson à température nulle [88]. Les questions posées ici sont avant tout d'ordre théorique. Que devient la théorie d'échelle de la localisation [1] en présence d'interaction, et en particulier peut-on toujours conclure à l'absence d'état métallique à deux dimensions, au sens strict de température nulle ? Les effets des interactions sur le gaz 2D peuvent-ils être décrits dans le cadre de la théorie du liquide de Fermi ? Les corrélations entre électrons renforcent-elles la localisation due au désordre ou au contraire, induisent-elles un effet de délocalisation en brouillant la cohérence de phase, à l'origine de la localisation d'Anderson ? Enfin, quel est le rôle des degrés de liberté internes de spin et de vallée ? C'est seulement après avoir répondu à ces questions que nous discuterons, au chapitre suivant, des implications de nos résultats quant à la compréhension des comportements métalliques observés dans les expériences à température finie (§2).

On introduit pour la suite la terminologie suivante. On parlera de systèmes à une composante (1-C) lorsque la dégénérescence M de pseudo-spin $\sigma = 1, \dots, M$ (§3) vaut 1. Les électrons sont alors tous polarisés en spin et ils ne peuvent peupler qu'une seule vallée, ce qui est le cas par exemple dans des hétérostructures GaAs/GaAlAs en présence d'un fort champ magnétique parallèle. De même, on parlera de systèmes à deux composantes (2-C) si $M = 2$ c'est-à-dire si les électrons sont non-polarisés dans une vallée (GaAs) ou polarisés dans deux vallées (Si-MOSFETs avec champ magnétique). Enfin, on parlera de systèmes à quatre composantes (4-C) lorsque $M = 4$. Les électrons sont alors non-polarisés dans deux vallées (Si-MOSFETs). La figure 6.1 illustre ces définitions. Dans la suite, on étudie l'effet des interactions coulombiennes sur la fonction d'échelle $\beta(g)$ et sur la longueur de localisation ξ pour ces trois types de systèmes. Sauf mention du contraire, la fonction guide utilisée est toujours la fonction guide « Hartree » (§5.1.3).

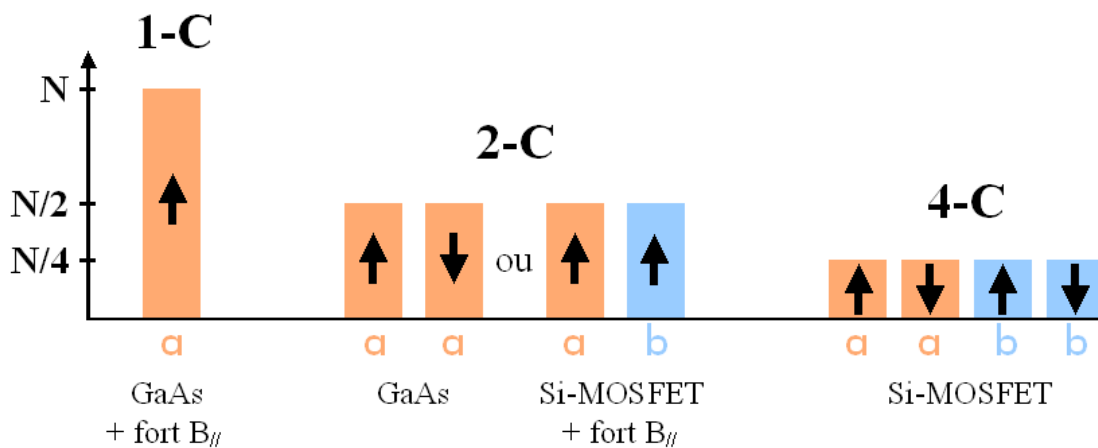


FIG. 6.1 – Représentation schématique des niveaux de Fermi des systèmes 1-C, 2-C et 4-C et de leur dégénérescence. Sur cette figure, chaque système contient le même nombre N de particules. Les électrons peuvent potentiellement occuper les vallées a et b et avoir un spin \uparrow ou \downarrow . Dans le système 1-C, les électrons sont à la fois polarisés en spin et en vallée. Dans le système 2-C, ils sont non-polarisés en spin et polarisés en vallée ou l'inverse. Dans le système 4-C, ils sont à la fois non-polarisés en spin et en vallée. La correspondance avec les systèmes expérimentaux est indiquée en bas de la figure.

6.1 Systèmes à une composante de pseudo-spin

On commence par étudier des systèmes à une composante de pseudo-spin (1-C) dans lesquels toutes les particules ont le même pseudo-spin σ . En pratique, cela signifie que l'on ne prend en compte ni le degré de liberté de spin, ni le degré de liberté de vallée des particules. Nous avons déjà étudié ces systèmes au chapitre précédent pour illustrer notre méthode numérique. A présent, nous nous intéressons non plus à la méthode mais aux résultats physiques. Nous revenons sur le fait que la fonction d'échelle $\beta(g)$ de la théorie d'échelle de la localisation sans interaction est inchangée par les interactions. Puis nous décrivons le comportement de la longueur de localisation ξ du système avec l'interaction et le désordre. Nous discutons en particulier de l'effet de localisation par les interactions.

6.1.1 Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction

Nous avons vu au §5.3.2, et en particulier sur la figure 5.7, que la théorie d'échelle de la localisation est préservée en présence d'interactions coulombiennes pour les systèmes 1-C, au moins jusqu'à $r_s = 6$. En effet, nous n'avons observé avec interaction aucune déviation à la fonction d'échelle $\beta(g)$, aux barres d'erreur près et pourvu que l'on prenne N assez grand pour s'affranchir des effets de taille finie. En particulier, comme $\beta(g)$ est inchangée, on a toujours $\beta < 0$ avec interaction. On peut donc affirmer que les électrons 1-C à deux dimensions restent dans un état isolant (à température nulle) en présence d'interactions faibles à modérées. Ce résultat est d'ailleurs cohérent avec les mesures expérimentales. En effet, ces systèmes 1-C correspondent expérimentalement aux gaz 2D formés dans des hétérostructures GaAs et polarisés par un fort champ magnétique parallèle. Or, nous avons vu au §2.4.1 que tous les comportements métalliques énigmatiques disparaissent en présence d'un tel champ. Il ne fait donc aucun doute pour la communauté que de tels systèmes soient isolants. Le fait que nous retrouvions ce résultat est un pas de plus dans la validation de notre méthode numérique.

Dans la suite, nous étudions les effets des interactions et du désordre sur la longueur de localisation ξ du système 1-C thermodynamique. Nous rappelons que celle-ci est extraite de la fonction d'échelle $\beta(g)$ par la méthode expliquée au §5.3.3.

6.1.2 Etude de la longueur de localisation ξ^{1C} : localisation par les interactions

Comportement de ξ^{1C} avec l'interaction et le désordre : formule pour $a/\xi^{1C}(k_F l, r_s)$

Nous avons vu au §5.3.3 (équation (5.23)) que sans interaction, le comportement de a/ξ^{1C} avec le désordre $1/k_F l$ est donné par $a/\xi^{1C} = (A^{1C}/k_F l) \exp(-B^{1C} k_F l)$ où A^{1C} et B^{1C} sont des paramètres numériques que nous avons trouvé égaux à 0.386 et 0.72 respectivement (et a est toujours la distance moyenne entre particules). Sur la figure 6.2, nous trouvons que cette formule reste valable en présence d'interaction ($0 \leq r_s \leq 8$) en renormalisant les coefficients $A^{1C}(r_s)$ et $B^{1C}(r_s)$. Plus précisément, on obtient un très bon fit de nos données $a/\xi^{1C}(k_F l)$ (figure (a)) avec la formule suivante :

$$\boxed{\frac{a}{\xi^{1C}}(k_F l, r_s) = \frac{A^{1C}(r_s)}{k_F l} \exp(-B^{1C}(r_s) k_F l)}, \quad (6.1)$$

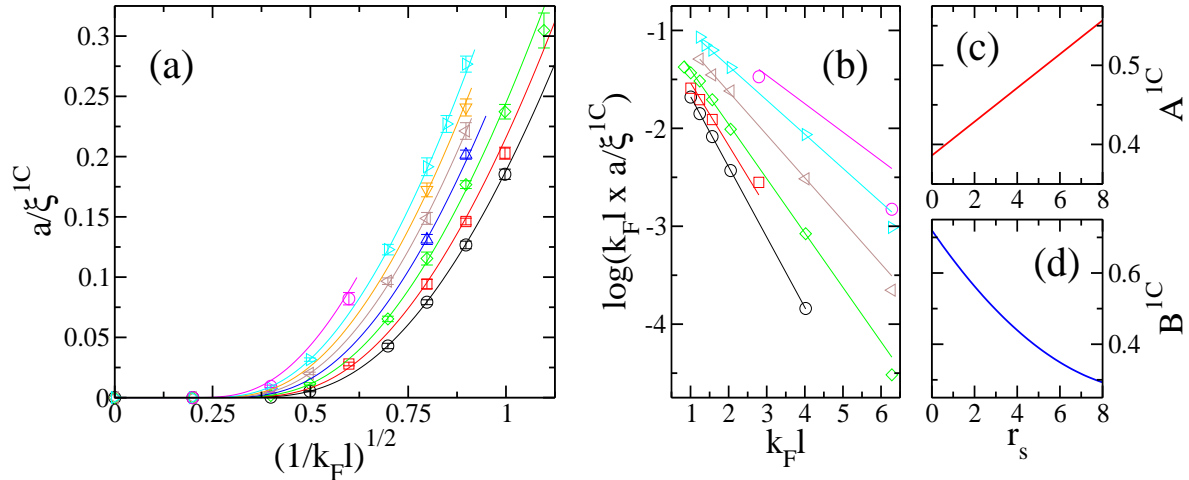


FIG. 6.2 – (a) a/ξ^{1C} en fonction de $1/\sqrt{k_F l}$ pour le système 1-C avec $N = 25$ dans 20×30 sites. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction : de droite à gauche, $r_s = 0$ (cercles noirs), $r_s = 1$ (carrés), $r_s = 2$ (diamants), $r_s = 3$ (triangles en haut), $r_s = 4$ (triangles à gauche), $r_s = 5$ (triangles en bas), $r_s = 6$ (triangles à droite) et $r_s = 8$ (cercles roses). (b) Vérification de l'équation (6.1) et détermination pratique des paramètres $A^{1C}(r_s)$ et $B^{1C}(r_s)$ en ajustant des droites sur $\log(k_F l a/\xi^{1C})$ en fonction de $k_F l$ (mêmes données que (a)). (c) et (d) Paramètres $A^{1C}(r_s)$ et $B^{1C}(r_s)$ extraits de (b). Tous les fits de cette figure sont ceux donnés par les équations (6.1) et (6.2).

où (pour $0 \leq r_s \leq 8$) :

$$\begin{cases} A^{1C}(r_s) &= 0.386 + 0.02135 r_s \\ B^{1C}(r_s) &= 0.72 - 0.087 r_s + 0.0042 r_s^2. \end{cases} \quad (6.2)$$

Comme la formule (6.1) est équivalente à $\log(k_F l a/\xi^{1C}) = \log A^{1C}(r_s) - B^{1C}(r_s) k_F l$, on a tracé sur la figure (b) nos données $\log(k_F l a/\xi^{1C})$ en fonction de $k_F l$ pour différents r_s . On a volontairement omis les points à très faibles désordres pour lesquels on estime que a/ξ^{1C} est plus petit que la précision que nous avons dessus. On vérifie que nos données ainsi tracées sont effectivement des droites ce qui valide le fit (6.1). L'ordonné à l'origine et la pente de chacune de ces droites nous fournissent respectivement les coefficients $\log A^{1C}(r_s)$ et $B^{1C}(r_s)$. Il se trouve que les valeurs de $A^{1C}(r_s)$ et $B^{1C}(r_s)$ directement extraites de la figure (b) par fits linéaires de nos données sont beaucoup trop « bruitées » pour être facilement fittées en fonction de r_s . Il est donc nécessaire de les ajuster de façon à ce que le comportement de A^{1C} et B^{1C} avec r_s soit régulier, tout en continuant à fitter correctement les données $\log(k_F l a/\xi^{1C})$. Cette opération est assez délicate et il est fort probable que plusieurs couples $(A^{1C}(r_s), B^{1C}(r_s))$ remplissent ces conditions, si bien qu'il ne faudra pas donner trop de sens physique quantitatif à ces paramètres pris individuellement. Sur les figures (c) et (d), nous avons tracé en fonction de r_s les coefficients A^{1C} et B^{1C} donnés par la formule (6.2) que nous avons retenue. Sans interaction ($r_s = 0$), on retrouve bien le résultat trouvé précédemment. Avec interaction, le coefficient B^{1C} qui domine a/ξ^{1C} (car dans l'exponentielle) décroît, donc a/ξ^{1C} augmente : ainsi les interactions localisent le système 1-C ; nous en reparlerons ci-après.

Il est important de noter par ailleurs que les formules (6.1) et (6.2) permettent de fitter correctement nos données obtenues à facteur de remplissage fixé $\nu = 1/24$. Or, nous avons vu au §5.3.3 (figure 5.9) qu'il existe un léger effet de ν -fini sur a/ξ^{1C} . Il serait bien sûr préférable de le prendre en compte pour donner une formule de $a/\xi^{1C}(k_F l, r_s)$ à la limite continue. Il

est néanmoins suffisamment faible pour que l'on puisse être assuré que nos formules donnent l'essentiel de l'information qualitative et quantitative sur le comportement de a/ξ^{1C} .

Discussion sur l'effet de localisation par les interactions dans le système 1-C

Sur la figure 6.3 (à gauche), nous avons tracé les mêmes données a/ξ^{1C} que celles de la figure 6.2 (a), en fonction de r_s pour différents désordres $0.8 < k_{Fl} < 6.3$. Nous avons rajouté quelques points pour un système de plus grande taille contenant $N = 36$ particules, toujours à $\nu = 1/24$, de façon à montrer à nouveau que ξ est bien la longueur de localisation du système thermodynamique (§5.3.3) et donc que l'effet observé des interactions sur la longueur de localisation ne dépend pas de la taille du système. Nous avons superposé à nos données les fits (6.1) et (6.2) qui s'avèrent être à l'oeil essentiellement linéaires en fonction de r_s . Il ressort de cette figure que les interactions localisent le système 1-C, ce que nous avons déjà remarqué auparavant (§5.3). Ce résultat est en accord avec les calculs perturbatifs réalisés par B. L. Altshuler et A. G. Aronov dans le régime diffusif $k_{Fl} \gg 1$ (§1.4.3, [7]). En vérifiant ainsi numériquement ces prédictions perturbatives, nous validons une fois de plus notre méthode. Nous apportons aussi un résultat supplémentaire puisque nous étendons la conclusion d'Altshuler et Aronov à une large gamme de désordre, incluant le régime localisé $k_{Fl} \approx 1$.

En guise de résumé, nous avons tracé a/ξ^{1C} en code couleur sur la figure 6.3 (à droite), en fonction du degré d'interaction r_s et du degré de désordre $1/\sqrt{k_{Fl}}$, en utilisant les fits (6.1) et (6.2). Il apparaît clairement que plus le désordre ou l'interaction augmente, plus le système 1-C se localise.

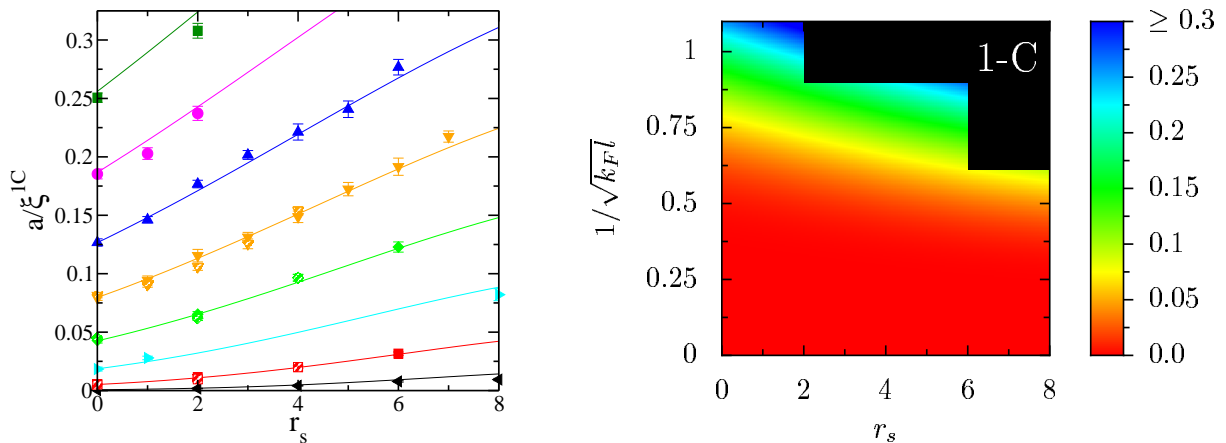


FIG. 6.3 — A gauche : a/ξ^{1C} en fonction de r_s pour les systèmes 1-C avec $N = 25$ dans 20×30 sites (symboles pleins) et $N = 36$ dans 24×36 sites (symboles rayés). Les formes des symboles correspondent à différents désordres : de bas en haut, $k_{Fl} = 6.28$ (triangles à gauche), $k_{Fl} = 4.05$ (carrés rouges), $k_{Fl} = 2.79$ (triangles à droite), $k_{Fl} = 2.06$ (diamants), $k_{Fl} = 1.57$ (triangles en bas), $k_{Fl} = 1.25$ (triangles en haut), $k_{Fl} = 1.00$ (cercles) et $k_{Fl} = 0.83$ (carrés verts). Les fits sont ceux donnés par les équations (6.1) et (6.2). A droite : a/ξ^{1C} en code couleur en fonction de r_s et $1/\sqrt{k_{Fl}}$ pour le système 1-C (d'après (6.1) et (6.2)). En augmentant l'interaction et/ou le désordre, le système se localise et passe du rouge au bleu. Les rectangles noirs cachent les zones où nous n'avons pas de données.

6.2 Systèmes à deux composantes de pseudo-spin

On étudie à présent des systèmes à deux composantes de pseudo-spin (2-C, voir la figure 6.1). Cela signifie que l'on ajoute un degré de liberté interne aux électrons, correspondant soit au degré de liberté de spin, soit au degré de liberté de vallée, ces deux degrés de liberté étant traités de manière équivalente dans notre modèle. En pratique, on considère des systèmes de N particules dont $N_1 = N/2$ ont un pseudo-spin $\sigma_1 = 1$ (disons qu'elles sont de spin up dans la vallée a , pour fixer les idées) et $N_2 = N/2$ ont un pseudo-spin $\sigma_2 = 2$ (de spin down dans la même vallée a). Ces systèmes non-polarisés en spin mais polarisés en vallée (ou polarisés en spin mais non-polarisés en vallée) sont sujets à polémiques depuis les expériences de Kravchenko en 1994 (§2). En effet, des comportements métalliques y ont été observés, en contradiction avec la théorie d'échelle, et la communauté n'est pas encore parvenue à trancher quant à l'origine de ces comportements métalliques et leur persistance à température nulle.

Nous commençons par montrer que la fonction d'échelle $\beta(g)$ des systèmes 2-C est inchangée en présence d'interaction et donc que ces systèmes ne peuvent être métalliques, au sens strict de température nulle. On montre ensuite que les interactions induisent néanmoins un effet de délocalisation, à faible $r_s \leq 2$. La fin de la section est consacrée à quelques contrôles, déjà faits sur les systèmes 1-C au chapitre 5 : on vérifie que a/ξ^{2C} ne dépend pas de N et que nos résultats sont indépendants du choix initial de la fonction guide.

6.2.1 Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction

Sur la figure 6.4, nous avons tracé la fonction d'échelle β d'un système 2-C pour différents degrés d'interaction ($0 \leq r_s \leq 6$), en suivant la méthode décrite au §5.3.2. Nous avons utilisé pour cela $N = 32$ particules afin de s'affranchir des effets de taille finie¹. On constate que les données avec interaction se superposent à la fonction d'échelle universelle sans interaction, aux barres d'erreur près². La théorie d'échelle de la localisation reste donc valable avec interaction pour ces systèmes 2-C. Par voie de conséquence, ceux-ci sont nécessairement isolants à la limite thermodynamique puisque $\beta < 0$. Or, d'un point de vue expérimental, les systèmes 2-C correspondent soit à des hétérostructures GaAs (1 vallée) en l'absence de champ magnétique (système non-polarisé en spin), soit à des Si-MOSFETs (2 vallées) en présence d'un fort champ magnétique parallèle (système polarisé en spin). Ces derniers systèmes ne montrent effectivement que des comportements isolants (§2.4.1). En revanche, des comportements métalliques ont été observés dans les premiers (§2.2). D'après nos résultats, ces comportements métalliques doivent disparaître dans la limite de température nulle : ils ne peuvent donc qu'être dûs à un effet de température finie.

Par ailleurs, il apparaît sur la figure 6.4 que lorsque l'on branche les interactions coulombiennes sur le système 2-C, g et β augmentent simultanément en suivant la courbe $\beta(g)$. Ces quantités atteignent un maximum à $r_s \approx 2$ puis elles se remettent à décroître à plus forte interaction, comme cela est représenté par la flèche noire. Nous insistons sur le fait que malgré

¹En effet, nous avons vu au §5.3.2 que $N = 16$ particules 1-C sont nécessaires à faible interaction pour retrouver la fonction d'échelle universelle. Ici, ce nombre N de particules doit être doublé puisqu'à faible interaction, on a deux mers de Fermi peuplées à $N/2$, l'une pour les électrons up, et l'autre pour les électrons down.

²Celles-ci peuvent paraître importantes mais il faut comprendre que nous sommes limités par le temps de calcul. Ainsi, par exemple, plus de 11000 heures ont été nécessaires pour calculer le point à $r_s = 4$ de plus fort désordre (carré du bas).

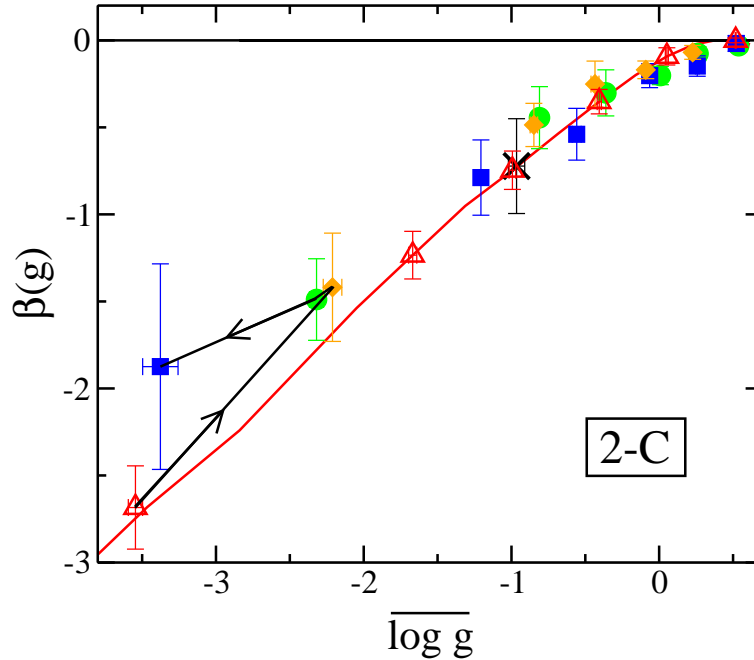


FIG. 6.4 – Fonction d'échelle $\beta(g)$ en fonction de $\overline{\log g}$ pour le système 2-C avec $N = 32$ dans 24×36 sites. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction ($r_s = 0$ (triangles), $r_s = 1$ (diamants), $r_s = 2$ (cercles), $r_s = 4$ (carrés) et $r_s = 6$ (croix)), pour différents désordres ($0.57 < k_{Fl} < 24.5$). La courbe rouge est la fonction d'échelle universelle sans interaction, calculée très précisément en 1-C avec $N = 16$ dans 24×36 sites. Lorsque l'on branche l'interaction sur un point de désordre k_{Fl} donné (un triangle), g augmente jusqu'à $r_s \approx 1 - 2$ puis rediminue, le tout en suivant la loi $\beta(g)$, comme indiqué par la flèche noire.

cette augmentation de β , maximale à $r_s \approx 2$, on a toujours $\beta < 0$ et donc un isolant à la limite thermodynamique. Nous pouvons d'ores et déjà remarquer que ce comportement de la « conductance » g est associé à un effet de délocalisation du système à faible interaction $r_s \leq 2$, suivi d'un effet de relocalisation à plus forte interaction. Dans la suite, nous étudions en détail le comportement de la longueur de localisation ξ^{2C} du système 2-C thermodynamique.

6.2.2 Etude de la longueur de localisation ξ^{2C} : délocalisation par les interactions

Comportement de ξ^{2C} avec l'interaction et le désordre : formule pour $a/\xi^{2C}(k_{Fl}, r_s)$

Sur la figure 6.5 (a), on a tracé a/ξ^{2C} en fonction du désordre $1/\sqrt{k_{Fl}l}$ pour différents r_s . Sans interaction, on s'attend à ce que nos données $a/\xi^{2C}(k_{Fl})$ soient bien fittées par une formule du type $a/\xi^{2C} = (A^{2C}/k_{Fl}) \exp(-B^{2C}k_{Fl})$, puisque c'est ce comportement que nous observons pour les systèmes 1-C (§5.3.3) et sans interaction, les systèmes 1-C et 2-C sont équivalents (voir la remarque ci-dessous). Nous vérifions effectivement une telle dépendance. De plus, comme pour les systèmes 1-C, nous constatons que cette formule sans interaction reste valable en présence d'interaction, en renormalisant les coefficients $A^{2C}(r_s)$ et $B^{2C}(r_s)$:

$$\boxed{\frac{a}{\xi^{2C}}(k_{Fl}, r_s) = \frac{A^{2C}(r_s)}{k_{Fl}} \exp(-B^{2C}(r_s)k_{Fl})}, \quad (6.3)$$

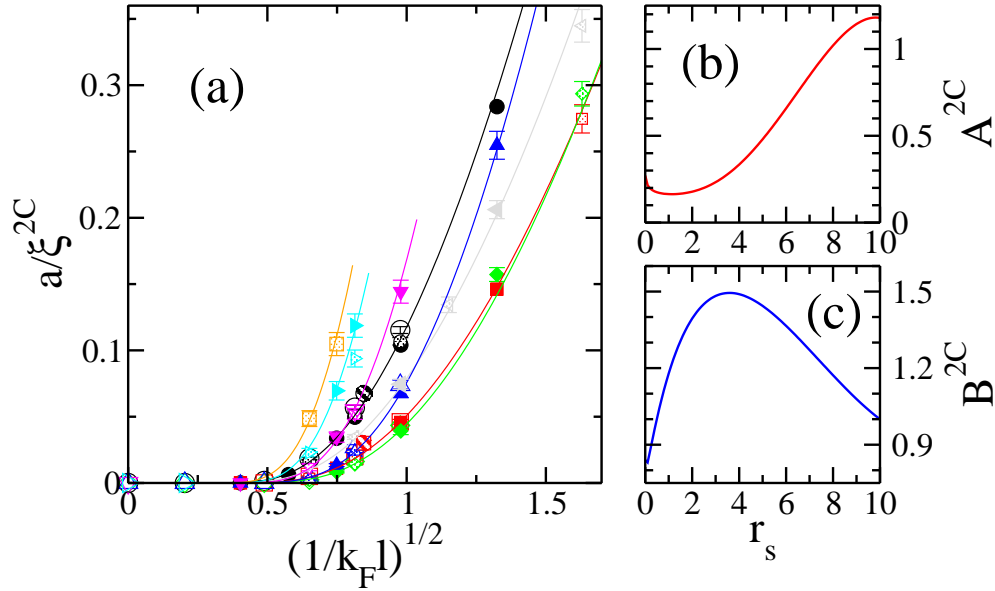


FIG. 6.5 – (a) a/ξ^{2C} en fonction de $1/\sqrt{k_F l}$ pour des systèmes 2-C de différentes tailles ($N = 32$ dans 24×36 sites (symboles vides), $N = 24$ dans 20×30 (symboles pleins), $N = 18$ dans 24×36 (symboles tachetés) et $N = 36$ dans 24×36 (symboles rayés)) et différents degrés d'interaction (de gauche à droite, $r_s = 0$ (cercles), $r_s = 0.25$ (triangles à gauche) et $r_s = 1$ (carrés rouges), puis de droite à gauche, $r_s = 2$ (diamants), $r_s = 4$ (triangles en haut), $r_s = 6$ (triangles en bas), $r_s = 8$ (triangles à droite) et $r_s = 10$ (carrés oranges)). Les fits sont ceux donnés par les équations (6.3) et (6.4). (b) et (c) Paramètres $A^{2C}(r_s)$ et $B^{2C}(r_s)$ selon (6.4).

avec (pour $0 \leq r_s \leq 10$) :

$$\begin{cases} A^{2C}(r_s) = 0.271 - 0.18186 \sqrt{r_s} - 0.06394 r_s + 0.36463 r_s \sqrt{r_s} \\ \quad - 0.35498 r_s^2 + 0.15098 r_s^2 \sqrt{r_s} - 0.021654 r_s^3 \\ B^{2C}(r_s) = 0.84 - 0.356 \sqrt{r_s} + 1.209 r_s - 0.5937 r_s \sqrt{r_s} + 0.0797 r_s^2. \end{cases} \quad (6.4)$$

Pour aboutir à ces formules, on a tracé $\log(k_F l a / \xi^{2C})$ en fonction de $k_F l$ (comme sur la figure 6.2(b)), vérifié que les courbes obtenues sont des droites $\log(k_F l a / \xi^{2C}) = \log A^{2C} - B^{2C} k_F l$ (comme l'exige l'équation (6.3)) puis extrait les coefficients $A^{2C}(r_s)$ et $B^{2C}(r_s)$ par fits linéaires (voir les figures 6.5 (b) et 6.5(c)). Cette dernière opération fut assez délicate ce qui explique pourquoi les formules (6.4) fittant $A^{2C}(r_s)$ et $B^{2C}(r_s)$ sont si complexes. A vrai dire, nous n'avons pas réussi à trouver une formule plus simple (bien que nous ayons essayé toutes sortes de polynômes et padés) permettant de rendre correctement compte de nos données $a/\xi(k_F l, r_s)$. Il est donc important de garder en tête que les formules (6.4) correspondent à un jeu de formules qui « marche » mais il y en a probablement d'autres et donc il ne faudra pas lui donner trop de sens physique. En particulier, il serait dangereux de tronquer ces formules à faible r_s pour avoir le comportement de a/ξ^{2C} à faible interaction.

Pour finir, nous précisons que les formules (6.3) et (6.4) fittent correctement nos données à $\nu \approx 1/24$ mais elles ne prennent pas en compte le léger effet de ν -fini dont nous avons parlé au §5.3.3 pour les systèmes 1-C et dont nous reparlerons à la fin de cette section dans le cas des systèmes 2-C.

Remarque : équivalence des systèmes 1-C, 2-C et 4-C dans le cas sans interaction ($r_s = 0$)
 Considérons un système 2-C de N particules sans interaction, à facteur de remplissage ν et désordre W . Ces N électrons se répartissent équitablement dans deux mers de Fermi dégénérées indépendantes, l'une pour les électrons de pseudo-spin $\sigma = 1$ (« up »), l'autre pour les électrons de pseudo-spin $\sigma = 2$ (« down »). Chacune de ces mers de Fermi est celle d'un système 1-C contenant $N/2$ électrons, à facteur de remplissage $\nu/2$ et désordre W . Les coefficients de diffusion g_x^{2C} et g_y^{2C} du système 2-C sans interaction peuvent donc se déduire des coefficients de diffusion g_x^{1C} et g_y^{1C} de ce système 1-C. On trouve analytiquement que :

$$g_{x[y]}^{2C}(N, \nu, W) = g_{x[y]}^{1C}(N/2, \nu/2, W), \text{ à } r_s = 0 \quad (6.5)$$

car les conductances de Thouless D_x et D_y sont proportionnelles à N , et g_x et g_y sont ensuite normalisées selon (5.15). On pourra d'ailleurs se convaincre immédiatement de ce résultat dans le cas particulier ($r_s = 0, W = 0$) discuté au §5.2.2. Nous l'avons également vérifié numériquement dans le cas général (*i.e.* avec désordre). D'un point de vue pratique, ce résultat est très important car il permet de calculer sans interaction les coefficients de diffusion (et donc les propriétés de localisation) d'un système 2-C de N particules, à partir du système 1-C correspondant, avec seulement $N/2$ particules. Il s'ensuit un gain considérable en temps de calcul.

D'après la définition (5.21), l'équation (6.5) se traduit en terme de longueur de localisation en disant que sans interaction, la longueur de localisation ξ^{2C} d'un système 2-C est égale à la longueur de localisation ξ^{1C} du système 1-C correspondant, avec deux fois moins de particules, c'est-à-dire : $\xi^{2C}(N, \nu, W) = \xi^{1C}(N/2, \nu/2, W)$. Comme ξ^{1C} et ξ^{2C} sont données respectivement par les formules (6.1) et (6.3), que k_{Fl} est donné par (3.10) et que $a(\nu) = 1/\sqrt{\pi\nu}$, on déduit les relations suivantes :

$$A^{4C}(r_s = 0) = \frac{A^{2C}(r_s = 0)}{\sqrt{2}} = \frac{A^{1C}(r_s = 0)}{2} \text{ et } B^{4C}(r_s = 0) = B^{2C}(r_s = 0) = B^{1C}(r_s = 0), \quad (6.6)$$

où nous avons rajouté le cas du système 4-C, qui se déduit de la même manière (voir §6.3.2).

Discussion sur l'effet de délocalisation par les interactions dans le système 2-C

Les interactions coulombiennes ont pour effet de délocaliser le système 2-C à faible $r_s \lesssim 2$, puis de le relocaliser à plus fort r_s , comme le montre clairement la figure 6.6 où nous avons tracé, à gauche, a/ξ^{2C} en fonction de r_s pour différents désordres $0.38 < k_{Fl} < 6.15$. La superposition des symboles correspondant à différentes tailles de système montre que ce comportement persiste à toute taille et n'est donc pas dû à un effet de taille finie. Nous reviendrons sur ce point essentiel au paragraphe suivant. On montrera également au §6.2.3 que cet effet de délocalisation ne dépend pas de la fonction guide choisie et donc de l'approximation Fixed Node. Par ailleurs, le lecteur pourra trouver sur la figure 6.6 de droite un plot 2D couleur de a/ξ^{2C} en fonction de r_s et $1/\sqrt{k_{Fl}}$, obtenu à partir des fits (6.3) et (6.4). L'avancée de la zone rouge $a/\xi^{2C} \approx 0$ à $r_s \approx 2$ est la signature de la délocalisation du système 2-C par les interactions.

Ainsi, nous avons montré numériquement de manière (quasi-)exacte que lorsque l'on branche les interactions coulombiennes sur le système 2-C, celui-ci se délocalise, dans le sens où sa longueur de localisation augmente en restant néanmoins finie. Le résultat trouvé en 2-C est donc contraire à celui trouvé en 1-C (§6.1). Le fait que la dégénérescence de spin (ou la dégénérescence de vallée) puisse jouer un rôle positif sur les propriétés de transport du gaz 2D a déjà été formulé par B. L. Altshuler [6], A. M. Finkelstein [84] et C. Castellani *et al* [47], au début des années 80, comme nous l'avons préalablement mentionné au §2.6.1. Cependant, leurs résultats perturbatifs sont strictement limités au régime de faible désordre et faible interaction ($k_{Fl} \gg 1, r_s \ll 1$) tandis que nos calculs sont valables pour une large gamme de désordre allant du régime diffusif au régime localisé ($0.38 < k_{Fl} < 6.15$) et une

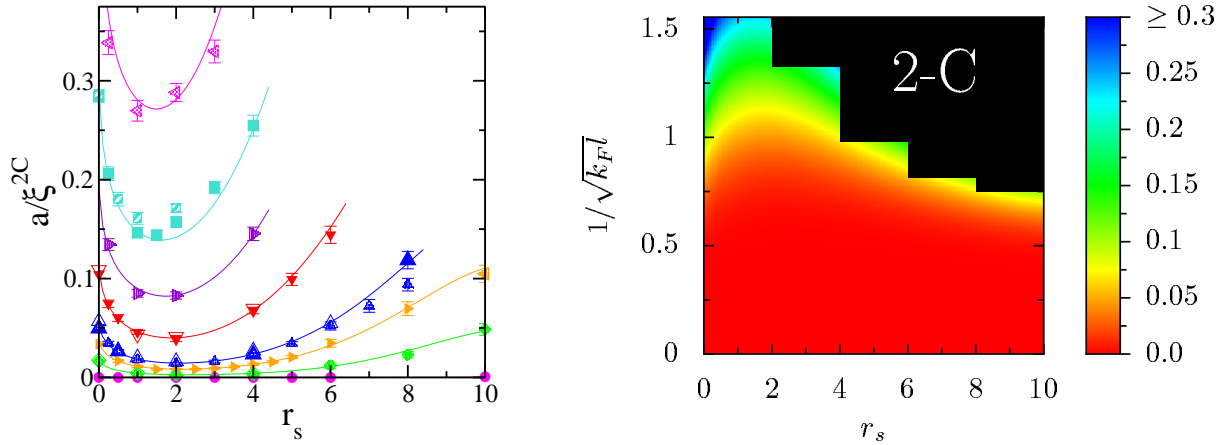


FIG. 6.6 – A gauche : a/ξ^{2C} en fonction de r_s pour des systèmes 2-C de différentes tailles ($N = 32$ dans 24×36 sites (symboles vides), $N = 24$ dans 20×30 (symboles pleins), $N = 18$ dans 24×36 (symboles tachetés) et $N = 36$ dans 24×36 (symboles rayés)). Les formes des symboles correspondent à différents désordres : de bas en haut, $k_{Fl} = 6.15$ (cercles), $k_{Fl} = 2.36$ (diamants), $k_{Fl} = 1.78$ (triangles à droite), $k_{Fl} = 1.51$ (triangles en haut), $k_{Fl} = 1.04$ (triangles en bas), $k_{Fl} = 0.75$ (triangles à droite), $k_{Fl} = 0.57$ (carrés) et $k_{Fl} = 0.38$ (triangles à gauche). Les fits sont ceux donnés par les équations (6.1) et (6.2). A droite : a/ξ^{2C} en code couleur en fonction de r_s et $1/\sqrt{k_{Fl}}$ pour le système 2-C (d'après (6.3) et (6.4)). Le front de la zone rouge « délocalisée » montre l'effet de délocalisation puis de relocalisation par les interactions. Les rectangles noirs cachent les zones où nous n'avons pas de données.

large gamme d'interaction ($0 \leq r_s \leq 10$). De plus, ces travaux prédisent une déviation à la théorie d'échelle à un paramètre que nous n'avons pas observée (§6.2.1). Remarquons par ailleurs que de précédentes études numériques, discutées au §2.7, ont également montré un effet de délocalisation par les interactions mais elles étaient le plus souvent limitées à de trop petits systèmes pour pouvoir conclure quant à la limite thermodynamique. Ici, nous pouvons assurer que nos résultats extrapolent bien la limite thermodynamique.

A présent, la question qu'il est légitime de se poser est de savoir comment expliquer physiquement cet effet de délocalisation par les interactions sur le système 2-C. Sans prétendre y répondre entièrement, nous proposons dans ce paragraphe quelques pistes de réflexions. De façon générale, on conçoit que les interactions électron-électron puissent casser la cohérence de phase, nécessaire au phénomène de localisation d'Anderson, et ainsi induire une délocalisation du système. Cela dit, cette explication reste très vague et ne permet pas *a priori* de différencier les comportements des systèmes 1-C et 2-C. Le point de vue que nous privilégions (du moins dans un but pédagogique) pour expliquer les phénomènes de localisation/délocalisation observés, est basé sur une vision effective à un corps du type Hartree-Fock. L'idée est de reprendre l'argumentation développée par Altshuler, Aronov, Castellani et Finkelstein à partir de leurs calculs perturbatifs (voir §1.4.3 et §2.6.1). Celle-ci met en compétition les termes de Hartree et de Fock. D'une part, le terme de Hartree délocalise le système, en lissant le potentiel de désordre, comme nous l'avons montré au §5.1.3 (voir aussi [111]). Plus la dégénérescence M de pseudo-spin est importante, plus on peut mettre d'électrons dans les puits de potentiel par le principe de Pauli et donc meilleur est l'écrantage du désordre. Dans ce processus, c'est surtout la partie à courte portée de l'interaction qui intervient. D'autre part, le terme de Fock nécessaire à l'antisymétrisation de la fonction d'onde électronique, localise le système. Ce terme est de plus indépendant de M puisque la fonction d'onde n'a pas de symétrie parti-

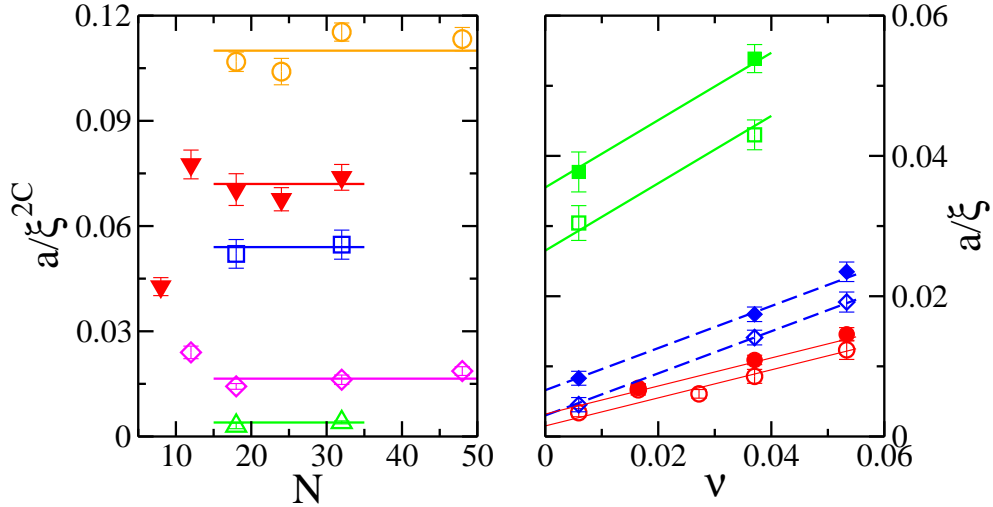


FIG. 6.7 – A gauche : a/ξ^{2C} en fonction du nombre N d'électrons pour des systèmes 2-C à $\nu \approx 1/24$. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction et de désordre ($k_{Fl} = 1.05$ et $r_s = 0$ (\circ), $k_{Fl} = 1.05$ et $r_s = 4$ (\blacktriangledown), $k_{Fl} = 1.51$ et $r_s = 2$ (\diamond), $k_{Fl} = 1.51$ et $r_s = 6$ (\square), et $k_{Fl} = 2.36$ et $r_s = 4$ (\triangle)). $N = 18$ particules suffisent pour atteindre la limite thermodynamique comme le montrent les droites horizontales. A droite : a/ξ en fonction du facteur de remplissage ν , avec $N = 32$ fixé, pour les systèmes 1-C (symboles pleins) et 2-C (symboles vides). Les formes des symboles correspondent à différents degrés d'interaction et de désordre ($k_{Fl} = 1.78$ et $r_s = 2$ (\diamond), $k_{Fl} = 1.78$ et $r_s = 4$ (\circ), et $k_{Fl} = 1.04$ et $r_s = 2$ (\square)). Les droites sont des fits linéaires. A r_s et k_{Fl} fixés, les effets de réseau en ν sont les mêmes pour les systèmes 1-C et 2-C (couples de droites parallèles entre elles).

culière vis-à-vis de l'échange entre deux particules de pseudo-spin différents, discernables. Nos résultats s'interprètent alors de la manière suivante : quand $M = 1$ (1-C), le terme de Fock l'emporte et l'on observe un effet de localisation par les interactions, tandis que quand $M = 2$ (2-C), c'est le terme de Hartree qui domine et l'on observe un effet de délocalisation. Précisons toutefois que cette interprétation, pratique pour se faire une intuition sur la physique du problème, reste hypothétique. En effet, nos résultats numériques balaient une large gamme d'interaction allant jusqu'à $r_s = 10$ et dans ce régime assez fortement corrélé, il n'est pas évident qu'une vision effective à un corps du problème fonctionne. En contrepartie, on verra au §6.4 que la théorie du liquide de Fermi semble s'appliquer dans notre cas, ce qui pourrait expliquer qu'une approche Hartree-Fock suffise. Pour le savoir, il serait très intéressant de comparer quantitativement nos résultats Monte Carlo Quantiques exacts à d'autres résultats obtenus dans l'approximation Hartree-Fock.

Contrôle des effets de taille et de réseau sur la longueur de localisation ξ^{2C}

Pour pouvoir interpréter légitimement nos résultats numériques, il est essentiel de vérifier que les longueurs de localisation que nous calculons correspondent bien à celles du système thermodynamique, à la limite continue. Nous avons déjà effectué cette vérification dans le cas des systèmes 1-C au §5.3.3. A présent, nous la reproduisons pour les systèmes 2-C. Sur la figure 6.7 (à gauche), nous avons tracé a/ξ^{2C} en fonction de N pour différents degrés d'interaction et de désordre. A partir de seulement $N = 18$ particules, a/ξ^{2C} devient indépendant de N ce qui signifie que $N = 18$ particules suffisent pour atteindre la limite thermodynamique. A plus petits N , des effets de taille finie sont visibles sur a/ξ^{2C} mais nous n'avons pas étudié

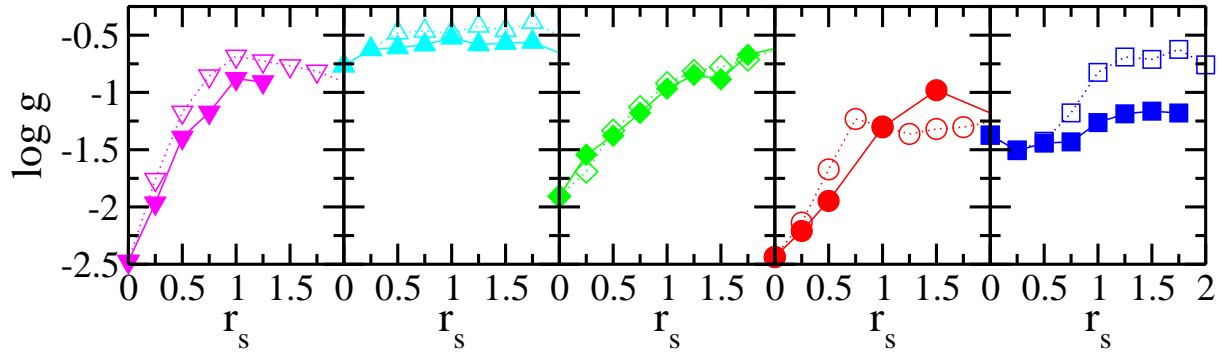


FIG. 6.8 – $\log g$ en fonction de r_s calculées à partir de la fonction guide « Liquide » (symboles pleins) et de la fonction guide « Hartree » (symboles vides), pour le système 2-C contenant $N = 18$ particules dans 24×24 sites, avec $k_{Fl} = 0.77$. Chaque figure correspond à un échantillon i.e. une configuration du potentiel aléatoire. Les cinq couples de résultats sont en très bon accord : l'effet de délocalisation à faible interaction ne dépend pas (peu) de la fonction guide choisie.

précédemment des systèmes aussi petits. Ainsi le comportement de a/ξ^{2C} avec l'interaction et le désordre, décrit en amont, est bien celui du système thermodynamique.

Sur la figure 6.7 de droite, on compare les effets de réseau en ν sur a/ξ^{2C} et a/ξ^{1C} . On constate que les effets de ν -fini sont les mêmes pour les systèmes 1-C et 2-C, au moins pour $\nu \leq 0.06$ (les fits linéaires en ν sur les deux $a/\xi(\nu)$ sont parallèles, à désordre et interaction fixés), ce qui implique en particulier que la différence $a/\xi^{2C} - a/\xi^{1C}$ ne dépend pas de ν . Ce point est essentiel car au chapitre 7, cette différence sera la quantité que nous étudierons pour expliquer les comportements métalliques observés dans les expériences. Pour l'heure, on retiendra que l'erreur faite précédemment sur a/ξ^{2C} en prenant $\nu = 1/48 - 1/24 \approx 0.02 - 0.04$ au lieu de $\nu \rightarrow 0$, est négligeable devant la variation de a/ξ^{2C} avec l'interaction et le désordre, comme pour les systèmes 1-C.

6.2.3 Test de l'approximation Fixed Node

Nous rappelons que tous nos calculs numériques sont effectués dans le cadre de l'approximation Fixed Node (§4.3.3). Du fait de cette approximation, ce ne sont pas exactement les propriétés de localisation de l'état fondamental que nous explorons, mais celles de l'état de plus basse énergie ayant la même structure nodale que notre fonction guide de départ. Il est donc essentiel de vérifier que nos résultats ne dépendent pas du choix de cette fonction guide et par voie de conséquence, de l'approximation Fixed Node. Nous l'avons déjà vérifié dans le cas des systèmes 1-C au §5.3.3 (figure 5.11) et proposons maintenant de le faire pour des systèmes 2-C. Ainsi, sur la figure 6.8, nous avons tracé en fonction du degré d'interaction r_s le coefficient de diffusion g d'un système 2-C donné, calculé en GFMC soit à partir de la fonction guide « Liquide » (§5.1.2, symboles pleins), soit à partir de la fonction guide « Hartree » (§5.1.3, symboles vides). Nous n'avons pas moyenné g sur le désordre mais étudié séparément sur les cinq cadrans, cinq différentes configurations du potentiel de désordre à k_{Fl} fixé (notamment pour ne pas perdre trop de temps de calcul). Pour tous les échantillons, g augmente avec r_s , de façon plus ou moins importante, traduisant un effet de délocalisation du système. Le point important est que toutes les données calculées à partir des deux fonctions guides sont en très bon accord : l'effet de délocalisation par les interactions sur le système

2-C n'est donc pas un artefact dû à l'approximation Fixed Node³.

6.3 Systèmes à quatre composantes de pseudo-spin

Dans cette dernière partie, on ajoute à nouveau un degré de liberté interne supplémentaire aux électrons. On étudie ainsi des systèmes à quatre composantes de pseudo-spin (4-C) dans lesquels les électrons ont à la fois une double dégénérescence de spin et une double dégénérescence de vallées (voir la figure 6.1). Ces systèmes non-polarisés en spin et non-polarisés en vallée correspondent expérimentalement aux Si-MOSFETs dans lesquels des comportements métalliques, toujours inexplicables, ont été observés (voir le chapitre 2).

On commence par étudier l'effet des interactions sur la fonction d'échelle $\beta(g)$. Il semble que la théorie d'échelle résiste encore aux interactions mais il apparaît un très fort effet de délocalisation qui annule presque β à désordre $k_{Fl} \gtrsim 1$. Dans ce régime, on trouve donc que le système 4-C est métallique pour toute considération pratique, même si, strictement parlant, il reste très probablement isolant à la limite thermodynamique. Dans la suite de la section, on propose une étude détaillée du comportement de la longueur de localisation ξ^{4C} avec l'interaction et le désordre.

6.3.1 Conservation de la fonction d'échelle $\beta(g)$ avec interaction

Sur la figure 6.9, nous étudions l'effet des interactions sur la fonction d'échelle β du système 4-C. Nous rappelons qu'à aucun moment, nous supposons que β est une fonction de g uniquement. Au contraire, nous calculons β et $\overline{\log g}$ séparément pour différents valeurs de k_{Fl} et r_s , les traçons simultanément et testons ainsi la théorie d'échelle (§5.3.2). Sur la figure 6.9, nous avons tracé β vs $\overline{\log g}$ pour cinq valeurs du désordre k_{Fl} à $r_s = 0$, $r_s = 2$ et $r_s = 4$. Nous avons utilisé un système de taille fixée contenant $N = 64$ particules (deux fois plus qu'en 2-C et quatre fois plus qu'en 1-C) pour s'affranchir des effets de taille finie.

Sans interaction (triangles), les points sont étalés sur un large domaine de $\overline{\log g}$ et β . Dès que l'on branche l'interaction, on constate qu'ils migrent tous vers $\beta \approx 0$, excepté le point à plus fort désordre ($k_{Fl} = 1.05$). Cette brutale augmentation de g et β avec l'interaction est la signature d'un très fort effet de délocalisation. Plus précisément, le fait que β s'annule (aux barres d'erreur près) signifie que le système 4-C devient métallique pour toute considération pratique : la longueur de localisation ξ^{4C} devient beaucoup plus grande que la taille de l'échantillon du laboratoire et donc les électrons peuvent conduire le courant. Nous reviendrons sur cet effet de délocalisation au §6.3.2.

D'un point de vue théorique, il est intéressant de se demander si l'état obtenu correspond

³Si l'on rentre un peu plus dans les détails, on peut remarquer que la « conductance » g calculée à partir de la fonction guide « Hartree » est (presque) toujours plus élevée que celle calculée à partir de la fonction guide « Liquide ». Ceci peut se comprendre par le fait que la fonction guide « Hartree » est plus délocalisée que la fonction guide « Liquide ». Or l'algorithme GFMC (ou RQMC) explore préférentiellement les zones de l'espace de Hilbert où la fonction guide est importante, via le procédé d'Importance Sampling (§4.3.1). Si la fonction guide utilisée est la « Liquide », toute une zone de l'espace de Hilbert sera moins explorée par rapport au cas où c'est la « Hartree » que l'on prend comme point de départ (toute la couronne où la fonction guide « Hartree » est délocalisée mais pas la « Liquide »). Ainsi, le choix de la fonction guide de départ laisse une trace sur le résultat Monte Carlo final (même sans Fixed Node), qui doit s'effacer progressivement lorsque la statistique (nombre de marcheurs en GFMC ou nombre de chemins en RQMC) augmente. Ce simple argument permet de comprendre pourquoi g est plus grand en partant de la fonction guide « Hartree ».

à un vrai métal à la limite thermodynamique. Autrement dit, a-t-on rigoureusement $\beta = 0$ avec interaction (ou même $\beta > 0$) ou est-ce que β devient seulement très proche de zéro, en restant strictement négatif? Nos données numériques, nécessairement accompagnées de barres d'erreur, ne peuvent permettre de trancher avec une certitude absolue. Pour donner un ordre d'idée, les points à $r_s = 4$ aux deux plus forts désordres ont coûté plus de 20000 heures de calcul chacun et donc on comprend qu'on ne puisse amoindrir à souhait nos barres d'erreur. Cependant, nos données semblent indiquer que la théorie d'échelle sans interaction est préservée en présence d'interaction. En effet, les points à $r_s \neq 0$ (cercles et carrés) restent sur la courbe rouge $\beta(g)$ sans interaction, aux barres d'erreur près⁴. La position du point à $r_s = 4$ et à plus fort désordre (carré du bas) en est la plus nette manifestation. Nous pensons donc que la théorie d'échelle de la localisation reste valable en présence d'interaction coulombienne pour les systèmes 4-C et donc que ces systèmes sont en fait toujours isolants à la limite thermodynamique (ce qui implique en particulier que les comportements métalliques observés dans les Si-MOSFETs sont dûs un effet de température finie).

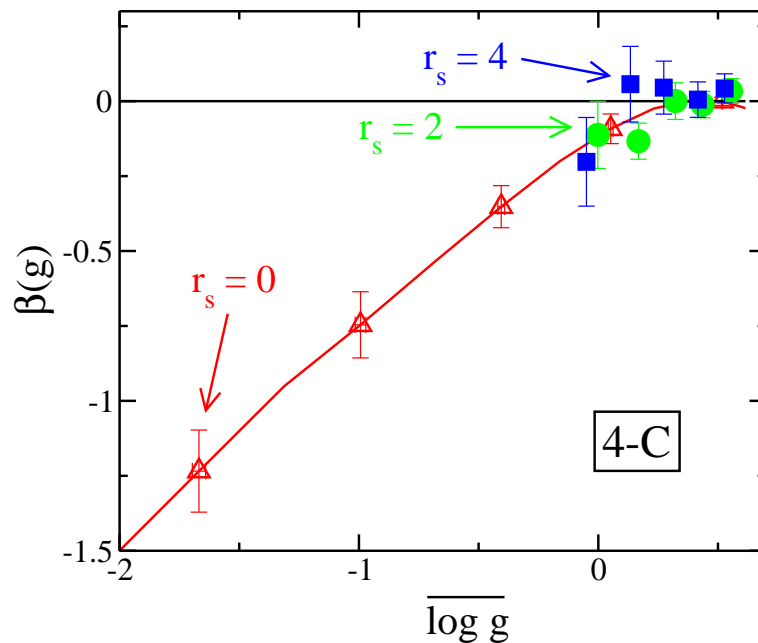


FIG. 6.9 – Fonction d'échelle $\beta(g)$ en fonction de $\overline{\log g}$ pour le système 4-C avec $N = 64$ dans 24×36 sites. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction ($r_s = 0$ (triangles), $r_s = 2$ (cercles) et $r_s = 4$ (carrés)), pour différents désordres ($1.05 < k_{Fl} < 24$). La courbe rouge est la fonction d'échelle universelle sans interaction, calculée très précisément en 1-C avec $N = 16$ dans 24×36 sites. Lorsque l'on branche l'interaction sur un point de désordre k_{Fl} donné (un triangle), g augmente très brutalement en suivant la loi $\beta(g)$.

⁴Rappelons qu'ici, comme dans le reste du manuscrit, les barres d'erreur indiquées sont des barres d'erreur à un sigma sur les moyennes liées à la statistique des échantillons. Dans toutes nos simulations, nous avons utilisé suffisamment de marcheurs pour que l'erreur Monte Carlo faite sur une quantité d'un échantillon donné soit plus petite que l'erreur statistique faite sur la moyenne de cette quantité sur le désordre.

6.3.2 Etude de la longueur de localisation ξ^{4C} : délocalisation drastique par les interactions

Nous venons de voir que la fonction d'échelle $\beta(g)$ est inchangée en présence d'interaction pour les systèmes 4-C (du moins, s'il existe des déviations, elles sont petites). Nous pouvons donc extraire la longueur de localisation ξ^{4C} du système thermodynamique, pour différents degrés d'interaction et de désordre, en utilisant la définition (5.21).

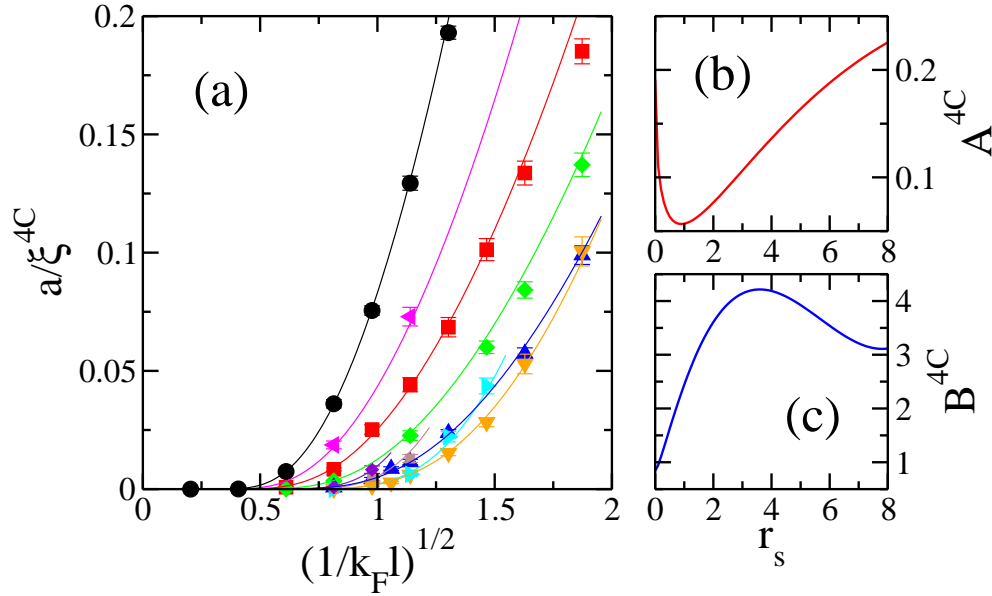


FIG. 6.10 – (a) a/ξ^{4C} en fonction de $1/\sqrt{k_F l}$ pour le système 4-C avec $N = 36$ dans 24×36 sites. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction : de gauche à droite, $r_s = 0$ (cercles), $r_s = 0.1$ (triangles à gauche), $r_s = 0.25$ (carrés rouges), $r_s = 0.5$ (diamants verts) et $r_s = 1$ (triangles en haut), puis de droite à gauche, $r_s = 2$ (triangles en bas), $r_s = 4$ (triangles à droite), $r_s = 6$ (carrés bruns) et $r_s = 10$ (diamants violets). Les fits sont ceux donnés par les équations (6.7) et (6.8). (b) et (c) Paramètres $A^{4C}(r_s)$ et $B^{4C}(r_s)$ selon (6.8).

Comportement de ξ^{4C} avec l'interaction et le désordre : formule pour $a/\xi^{4C}(k_F l, r_s)$

Sur la figure 6.10 (a), on a tracé a/ξ^{4C} en fonction du désordre $1/\sqrt{k_F l}$, pour différents r_s . On a pris $N = 36$ car nous verrons à la fin de ce chapitre (figure 6.12) que ce nombre de particules est suffisant pour atteindre la limite thermodynamique. On trouve que nos données sont bien fittées par la formule suivante :

$$\boxed{\frac{a}{\xi^{4C}}(k_F l, r_s) = \frac{A^{4C}(r_s)}{k_F l} \exp(-B^{4C}(r_s)k_F l)}, \quad (6.7)$$

avec (pour $0 \leq r_s \leq 8$) :

$$\begin{cases} A^{4C}(r_s) = 0.191 - 0.325 \sqrt{r_s} + 0.24 r_s - 0.0526 r_s \sqrt{r_s} + 0.0035 r_s^2 \\ B^{4C}(r_s) = 0.84 - 0.177 \sqrt{r_s} + 1.094 r_s + 2.0616 r_s \sqrt{r_s} \\ \quad - 1.6784 r_s^2 + 0.3027 r_s^2 \sqrt{r_s}. \end{cases} \quad (6.8)$$

La formule (6.7) est manifestement de la même forme que les formules (6.1) et (6.3) pour les systèmes 1-C et 2-C. Elle généralise à $r_s \neq 0$ la formule connue sans interaction (voir §5.3.3),

via la renormalisation des paramètres $A^{4C}(r_s)$ et $B^{4C}(r_s)$. Nous l'avons vérifiée en constatant que $\log(k_F l a / \xi^{4C})$ est bien linéaire en $k_F l$ et c'est d'ailleurs en traçant ces courbes $\log(k_F l a / \xi^{4C})$ vs $k_F l$ que nous avons pu extraire les coefficients $A^{4C}(r_s)$ et $B^{4C}(r_s)$, puis les fitter (figure 6.10 (b) et (c)). Rappelons deux remarques que nous avons déjà faites pour les systèmes 1-C et 2-C. D'une part, les fits (6.8) de $A^{4C}(r_s)$ et $B^{4C}(r_s)$, en polynômes de $\sqrt{r_s}$, ne sont probablement pas uniques et donc il ne faudra pas leur donner trop de sens physique. D'autre part, ces formules ont été obtenues en fittant nos données à $\nu = 1/24$. Une légère correction de ν -fini devrait être prise en compte pour donner $a/\xi^{4C}(k_F l, r_s)$ à la limite continue.

Discussion sur l'effet drastique de délocalisation par les interactions dans le système 4-C

On a tracé sur la figure 6.11 (à gauche) les mêmes données a/ξ^{4C} que celles de la figure 6.10 (a), cette fois-ci en fonction de r_s pour différents $k_F l$. On a rajouté quelques points aux mêmes désordres pour un système de plus grande taille ($N = 64$) de façon à montrer que l'effet de délocalisation observé est indépendant de la taille du système (voir aussi la figure 6.12). On constate que la longueur de localisation ξ^{4C} augmente brutalement lorsque l'on branche l'interaction r_s (a/ξ^{4C} diminue). Cet effet de délocalisation est bien plus important que dans les systèmes 2-C. En effet, si on considère par exemple les diamants rouges dans la figure 6.11 (4-C, $k_F l = 0.59$) et les triangles violets dans la figure 6.6 (2-C, $k_F l = 0.75$), partant tous les deux de $a/\xi^{2C[4C]} \approx 0.2$ à $r_s = 0$, on voit qu'au plus fort de la délocalisation ($r_s = 2$), $a/\xi^{2C} \approx 0.08$ tandis que $a/\xi^{4C} \approx 0.015$. Autrement dit, la longueur de localisation ξ^{2C} du système 2-C a été un peu plus que doublée alors que la longueur de localisation ξ^{4C} du système 4-C a été multipliée par 13! La comparaison des plots 2D couleur de a/ξ^{2C} et a/ξ^{4C} sur les figures 6.6 et 6.11 de droite, traduit également de manière très visuelle l'importance relative des effets de délocalisation dans les systèmes 2-C et 4-C. Finalement, on trouve que dans le système 4-C corrélé, $a/\xi^{4C} \approx 0$ à nos barres d'erreur près, pour $k_F l \gtrsim 1$. Dans ce régime, ξ^{4C} est beaucoup plus grande que la taille du système et donc pour toute considération pratique, le système est métallique. Ce résultat est le premier pas vers la compréhension des comportements métalliques observés dans des Si-MOSFETs (§2), modélisés ici par les systèmes 4-C. Nous y reviendrons en détail au chapitre suivant.

La question de savoir si l'effet de délocalisation par les interactions induit une divergence de ξ^{4C} ou simplement une très forte augmentation de celle-ci, rejoint la question de l'existence ou non d'un vrai métal à la limite thermodynamique. Nous en avons déjà discuté au §6.3.1, en terme d'annulation ou non de la fonction β , et apparemment la réponse est négative : il n'existe pas de vrai métal à la limite thermodynamique, $\beta < 0$ et ξ^{4C} bien qu'énorme, reste toujours finie avec interaction. Plus précisément, nos données numériques indiquent que l'effet de délocalisation observé dans les systèmes 4-C est le même que celui observé dans les systèmes 2-C, mais amplifié. Cette idée est soutenue par le fait qu'aux plus forts désordres ($k_F l < 1$), nous observons une forte délocalisation sans pour autant que a/ξ^{4C} s'annule. De plus, nos données à plus forts $r_s \geq 4$ semblent montrer un retour vers la localisation (certes léger), également observé dans les systèmes 2-C.

Pour finir, il est important de souligner que tous nos résultats sont en bon accord qualitatif avec les prédictions perturbatives de type Hartree-Fock de B. L. Althsuler [6], A. M. Finkelstein [84] et C. Castellani *et al* [47]. Comme eux, nous trouvons que les interactions délocalisent le système non-polarisé en spin (2-C) et que cet effet de délocalisation est ac-

cru en présence de double dégénérescence de vallées (4-C). Nos résultats, comme les leurs, mettent ainsi en exergue le rôle essentiel des degrés de liberté internes de spin et de vallée dans l'étude de l'effet des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson. De plus, ils peuvent se comprendre facilement dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock : avec vallées, la délocalisation par le terme de Hartree est beaucoup plus important que sans vallée alors que la localisation par le terme de Fock est inchangée⁵. Nous précisons cependant que nos résultats sont valables pour une large gamme de désordre, incluant le régime localisé, alors que les résultats d'Altshuler, Castellani et Finkelstein sont limités au régime diffusif de faible désordre. En outre, leurs travaux prédisent une rupture à la théorie d'échelle que nous contestons. Terminons par un court commentaire concernant le papier plus récent de A. Punnoose et A. M. Finkelstein [220] dans lequel les auteurs défendent l'existence d'un état métallique dans le régime diffusif pour un nombre infini de vallées (voir §2.6.1). A la lumière de nos résultats, on conçoit que plus on augmente la dégénérescence de vallées, plus l'effet de délocalisation par les interactions est important et donc que l'on puisse atteindre $\beta = 0$ (*i.e.* un métal) quand cette dégénérescence est infinie. Cela dit, en pratique, dans les expériences, cette théorie ne s'applique pas et il faut s'en remettre à nos résultats : les interactions délocalisent le système sans modifier la théorie d'échelle et donc l'on a toujours un isolant.

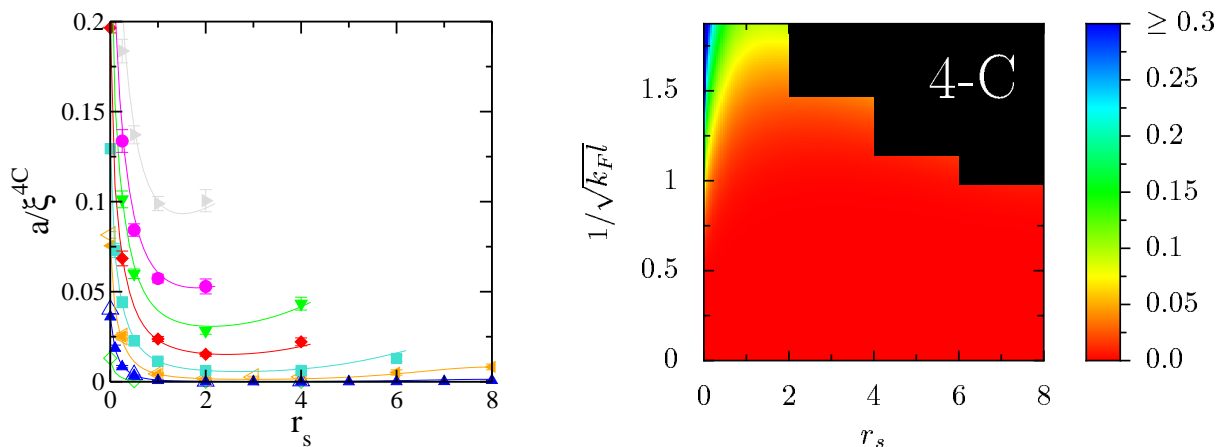


FIG. 6.11 – A gauche : a/ξ^{4C} en fonction de r_s pour des systèmes 4-C de deux tailles différentes ($N = 36$ dans 24×36 sites (symboles pleins) et $N = 64$ dans 24×36 (symboles vides)). Les formes des symboles correspondent à différents désordres : de bas en haut, $k_{Fl} = 2.36$ (diamants verts), $k_{Fl} = 1.51$ (triangles en haut), $k_{Fl} = 1.05$ (triangles à gauche), $k_{Fl} = 0.77$ (carrés), $k_{Fl} = 0.59$ (diamants rouges), $k_{Fl} = 0.47$ (triangles en bas), $k_{Fl} = 0.38$ (cercles) et $k_{Fl} = 0.29$ (triangles à droite). Les fits sont ceux donnés par les équations (6.7) et (6.8). A droite : a/ξ^{4C} en code couleur en fonction de r_s et $1/\sqrt{k_{Fl}}$ pour le système 4-C (d'après (6.7) et (6.8)). Dès que les interactions sont branchées, la zone rouge « délocalisée » envahit le diagramme. Les rectangles noirs cachent les zones où nous n'avons pas de données.

Contrôle des effets de taille sur la longueur de localisation ξ^{4C}

Nous finissons cette section sur les systèmes 4-C en vérifiant que les longueurs de localisation ξ^{4C} calculées jusqu'à présent correspondent bien à celles du système thermodynamique. Ainsi, on a tracé sur la figure 6.12, a/ξ^{4C} en fonction de N , à désordre k_{Fl} fixé, pour trois valeurs de r_s . On constate que $N = 36$ particules suffisent toujours pour atteindre la limite

⁵Le lecteur, s'il est perdu, est invité à lire ou relire notre discussion sur l'effet de délocalisation dans les systèmes 2-C au §6.2.2, où nous développons les mêmes arguments.

thermodynamique. C'est quatre fois plus qu'en 1-C (figure 5.9) et deux fois plus qu'en 2-C (figure 6.7) ce qui paraît cohérent puisqu'en 4-C, les N particules sont réparties dans quatre mers de Fermi dégénérées peuplées à $N/4$. Si $N < 36$, des effets de taille finie peuvent apparaître sur la longueur de localisation, comme le montrent les symboles triangulaires. Nous insistons sur le fait que le fort effet de délocalisation observé (cercles à $r_s = 0$ vs diamants à $r_s = 2$) est robuste face à l'augmentation de N : il ne s'agit donc pas d'un effet de taille finie.

Par manque de temps (et parce que cela ne nous a pas paru essentiel), nous n'avons pas étudié les effets de réseau en ν sur a/ξ^{4C} . Nous rappelons tout-de-même que nous avons montré au §6.2.2 (figure 6.7) que les effets de ν -fini sont les mêmes pour a/ξ^{1C} et a/ξ^{2C} . Ils sont donc aussi probablement les mêmes pour a/ξ^{4C} , c'est-à-dire négligeables devant l'effet drastique de délocalisation par les interactions.

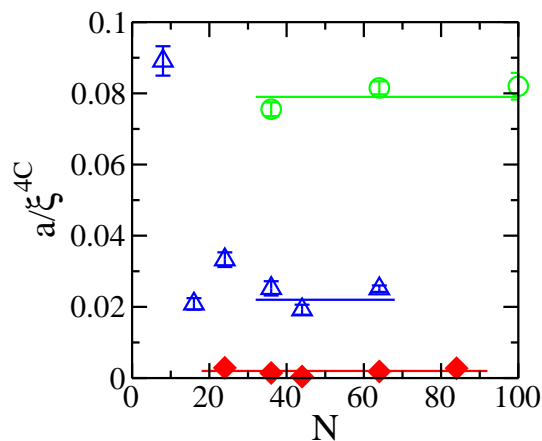


FIG. 6.12 – a/ξ^{4C} en fonction du nombre N d'électrons pour des systèmes 4-C. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction ($r_s = 0$ (cercles), $r_s = 0.25$ (triangles) et $r_s = 2$ (diamants)) à $k_F l = 1.05$. $N = 36$ particules suffisent pour atteindre la limite thermodynamique comme le montrent les droites horizontales.

6.4 Conclusion : description du gaz 2D par la théorie du liquide de Fermi

Une question courante en physique de la matière condensée, dès que l'on traite d'un problème d'électrons corrélés, est de savoir si la théorie de Landau du liquide de Fermi s'applique (§1.4.1). Autrement dit, les interactions peuvent-elles simplement être traitées en remplaçant les électrons par des « quasi-particules » indépendantes, dont les paramètres (comme la masse) sont renormalisés ? A une dimension, il est connu qu'une telle approche n'est pas valable : dès que l'on branche les interactions entre les électrons, le système passe dans un état dit de liquide de Luttinger. De même, dans le gaz bidimensionnel non désordonné, de fortes interactions conduisent à la formation d'un cristal de Wigner, qui échappe à une description dans le cadre de la théorie de Landau. Il ne fait également aucun doute qu'en présence de désordre, le gaz 2D très fortement corrélé n'est pas un bon liquide de Fermi. En revanche, le cas du gaz bidimensionnel désordonné, faiblement ou moyennement corrélé, est encore débattu. D'après A. Punnoose et A. M. Finkelstein, les interactions (aussi petites soient-elles) induiraient dans ce cas une instabilité du liquide de Fermi [220] mais leurs prédictions ont uniquement été établies dans la limite théorique d'un nombre infini de vallées.

Il ressort des résultats présentés dans ce chapitre, deux principales conclusions communes aux systèmes 1-C, 2-C et 4-C, favorisant l'idée selon laquelle le gaz 2D désordonné est bien décrit par la théorie du liquide de Fermi à interactions modérées :

- d'une part, la fonction d'échelle $\beta(g)$ est inchangée en présence d'interactions, au moins pour $r_s \leq 4$ (et jusqu'à $r_s \leq 6$ dans le cas 1-C).
- d'autre part, la formule connue sans interaction $a/\xi = (A/k_F l) \exp(-Bk_F l)$, reste valable avec interaction au moins jusqu'à $r_s = 8$, pour peu de renormaliser les coefficients A et B en $A(r_s)$ et $B(r_s)$.

Ces résultats peuvent s'interpréter comme des arguments défendant la pertinence de la théorie du liquide de Fermi, en ce qui concerne la description des propriétés de localisation du système bidimensionnel moyennement corrélé. En effet, d'après cette théorie, l'étude d'un système corrélé se ramène essentiellement à celle du système décorrélé équivalent, au prix de la renormalisation de certains paramètres et c'est exactement ce que nous observons ici. Si cette conclusion se confirme, on pourrait alors facilement concevoir qu'une approche effective à un corps (du type Hartree-Fock) suffise pour traiter les interactions dans le gaz 2D désordonné. On montrera toutefois au chapitre suivant que les comportements métalliques dans les gaz bidimensionnels de basse densité sont dûs à un effet non-perturbatif des interactions. Ainsi, même si la théorie du liquide de Fermi s'applique à ces systèmes, les interactions n'en sont pas moins responsables d'effets spectaculaires.

Au terme de chapitre, nous avons montré que le gaz 2D est toujours isolant avec interaction, au sens théorique de température nulle (*i.e.* à la limite thermodynamique). D'après ce résultat, les comportements métalliques observés dans les expériences (§2) doivent donc nécessairement disparaître à très basse température et laisser la place à un comportement isolant. Dans le chapitre suivant, nous proposons un mécanisme permettant d'expliquer les comportements métalliques observés à température finie.

Chapitre 7

Mécanisme à l'origine des comportements métalliques observés à basse densité

Sommaire

| | |
|--|------------|
| Résumé du chapitre 7 | 166 |
| 7.1 Calcul de l'énergie de polarisation E_p en Monte Carlo Quantique | 167 |
| 7.1.1 Définition de l'énergie de polarisation | 167 |
| 7.1.2 Validation technique : effets de taille finie en N sur E_p | 169 |
| 7.1.3 Validation technique : effets de réseau en ν sur E_p | 170 |
| 7.1.4 Effets des interactions et du désordre sur E_p | 172 |
| 7.2 Energie caractéristique des comportements métalliques : l'énergie de polarisation | 175 |
| 7.2.1 Cas des Si-MOSFETs | 176 |
| 7.2.2 Cas des hétérostructures GaAs | 179 |
| 7.2.3 Conclusion partielle : contraintes sur les possibles mécanismes responsables des comportements métalliques | 181 |
| 7.3 Mécanisme proposé : délocalisation par les interactions et dépendance en polarisation | 182 |
| 7.3.1 Origine du mécanisme | 183 |
| 7.3.2 Diagramme de phase numérique désordre/interaction et comparaison au diagramme expérimental | 187 |
| 7.3.3 Points d'accord semi-quantitatifs entre notre scénario et les données expérimentales | 190 |
| 7.3.4 Positionnement de notre scénario par rapport aux autres théories proposées | 190 |

Résumé du chapitre 7

On propose dans ce chapitre un mécanisme expliquant les comportements métalliques observés dans les expériences à température finie (§2). Il s'agit à la fois de rendre compte de l'augmentation de la résistance avec la température dans la « phase métallique » et de la positivité de la magnétorésistance parallèle. Notre démarche consiste à partir de notre modèle minimal (§3) puis à calculer en Monte Carlo Quantique (§4) l'énergie et la longueur de localisation du système, pour comprendre respectivement les échelles d'énergie (axe x des courbes $\rho(T)$ ou $\rho(B_{\parallel})$) et les variations de résistance (axe y) associées aux comportements métalliques.

Dans un premier temps, on identifie l'énergie caractéristique contrôlant les comportements métalliques, comme l'énergie de polarisation du système, c'est-à-dire l'énergie qu'il faut apporter au système pour polariser tous les spins des porteurs (§7.2). Ce résultat est solidement établi en analysant une dizaine de jeux de données expérimentales brutes et en montrant à chaque fois un très bon accord entre l'énergie de polarisation calculée *ab initio* en Monte Carlo Quantique et l'énergie thermique ou Zeeman associée à l'augmentation de la résistance dans la « phase métallique » (figure 7.5). Il s'ensuit que les comportements métalliques se traduisent simplement en disant que les états non-polarisés conduisent beaucoup mieux le courant que les états polarisés, peuplés par la température ou un champ parallèle.

Dans un second temps, nous montrons que notre modèle rend compte de cette propriété. En effet, nous avons vu au §6 que les interactions délocalisent beaucoup plus le système non-polarisé que le système polarisé, si bien que l'on trouve qu'avec interaction, le système polarisé est beaucoup plus localisé que le non-polarisé. Ainsi lorsque l'on peuple les états polarisés en augmentant la température ou en appliquant un champ Zeeman, le système se localise et sa résistance augmente, d'où l'observation d'un comportement métallique. Cette propriété n'a rien d'évidente car sans interaction, c'est l'inverse qui se produit (figures 7.8 et 7.9). Elle est une conséquence de l'effet conjoint répulsion coulombienne/localisation d'Anderson.

Il s'avère que notre scénario rend compte, à un niveau semi-quantitatif et sans paramètre ajustable, des principales caractéristiques expérimentales (§7.3.2 et §7.3.3) : (i) l'augmentation de la résistance avec la température ou un champ parallèle, à désordre et interaction intermédiaires, (ii) la suppression des comportements métalliques par un champ magnétique parallèle, (iii) la forte amplitude des comportements métalliques dans les Si-MOSFETs, possédant deux vallées dégénérées, par comparaison à celle observée dans les autres matériaux et (iv) les températures et champs magnétiques typiques auxquels la résistance augmente dans la « phase métallique ». Ainsi, nous pensons avoir considérablement avancé quant à la compréhension des comportements métalliques, même si certaines questions restent à résoudre, en particulier dans les hétérostructures. Selon nous, les comportements métalliques sont dus à un effet de température finie impliquant les états excités polarisés et disparaissant à température nulle. Ils s'expliquent par un effet intrinsèque des interactions, sans avoir besoin de faire appel à des ingrédients extrinsèques au modèle.

Nous revenons dans ce chapitre sur les expériences discutées au chapitre 2. Rappelons que dans ces expériences, réalisées dans des gaz bidimensionnels à basse densité et haute mobilité c'est-à-dire au « centre » du diagramme de phase désordre/interaction, des comportements métalliques inattendus ont été observés. D'après nos résultats présentés au chapitre précédent, ces comportements métalliques ne correspondent pas à un vrai métal dans le diagramme de phase du gaz bidimensionnel et ils doivent en fait disparaître dans la limite de température nulle. La question qu'il nous reste à résoudre est naturellement celle de l'origine de ces comportements métalliques, observés à température finie. Les principales caractéristiques expérimentales à comprendre sont (i) l'augmentation de la résistivité ρ avec la température T dans un domaine précis de densité (le comportement métallique à proprement parler) et (ii), l'augmentation similaire de la résistivité ρ , jusqu'à saturation, lorsqu'un champ magnétique parallèle au gaz 2D est appliqué dans ce même domaine de densité. Nous avons vu au §2.6 que plusieurs propositions théoriques ont été avancées, certaines cherchant des ingrédients extrinsèques au problème pour expliquer ces propriétés [11, 124], d'autres cherchant la clé dans les interactions électron-électron au prix d'approximations non contrôlées ou non physiques [47, 85, 220]. Dans ce chapitre, nous proposons un mécanisme très simple pour expliquer les comportements métalliques et leurs propriétés.

Nous commençons par analyser nos données Monte Carlo Quantique d'énergie de polarisation $E_p(k_{Fl}, r_s)$ du gaz bidimensionnel désordonné et corrélé puis nous montrons que cette énergie est l'énergie caractéristique des comportements métalliques (i) et (ii) [90]. Nous découvrons ensuite, à la lumière des résultats du chapitre 6, que ces comportements métalliques sont dûs au fait qu'au « centre » du diagramme de phase désordre/interaction, le système polarisé est plus localisé que le système non-polarisé et donc conduit moins bien. Nous montrons enfin que ce scénario rend compte des principales caractéristiques expérimentales. Précisons par ailleurs que nous continuerons à utiliser tout au long de ce chapitre la terminologie de « systèmes 2-C » et « systèmes 4-C », introduite au chapitre précédent, et cela même pour des systèmes partiellement ou totalement polarisés en spin.

7.1 Calcul de l'énergie de polarisation E_p en Monte Carlo Quantique

Nous commençons ce chapitre par des calculs Monte Carlo Quantique d'énergie de polarisation. Nous nous intéressons à cette quantité car nous avons vu au chapitre 2 que les comportements métalliques sont supprimés par un champ Zeeman polarisant tous les spins et donc que l'énergie de polarisation doit avoir son rôle à jouer. Cette présente section est organisée de la manière suivante : on définit proprement l'énergie de polarisation puis on étudie les effets de taille finie sur cette quantité, avant de finalement s'intéresser à la dépendance en désordre et en interaction de cette énergie, à la limite thermodynamique continue.

7.1.1 Définition de l'énergie de polarisation

On note N_\uparrow le nombre de particules de spin up, qu'elles soient regroupées dans une seule vallée (2-C) ou réparties équitablement dans deux vallées dégénérées (4-C). De même, on note N_\downarrow le nombre de particules de spin down. N désigne toujours le nombre total de particules. La configuration de spin définit la polarisation du système $p = (N_\uparrow - N_\downarrow)/N$. Sans interaction

($r_s = 0$) et sans désordre ($1/k_{Fl} = 0$), il est facile de montrer¹ que l'énergie E du système (par particule) dépend de manière quadratique de la polarisation p selon : $E_0(p) = E_F(1+p^2)/2$. Ici, E_F est l'énergie de Fermi du système, donnée par $E_F = 4\pi\nu t/M$ (formule (3.9)), avec $M = 2$ pour un système 2-C et $M = 4$ pour un système 4-C. Sur la figure 7.1, nous montrons qu'une telle dépendance quadratique reste vraie avec interaction et désordre, au moins pour $0 \leq r_s \leq 10$ et $k_{Fl} > 1$ (c'est-à-dire notamment dans le régime de paramètres des expériences que l'on peut visualiser sur le diagramme 2.5). Signalons tout-de-même qu'au plus fort désordre étudié (triangles), dans le régime localisé, nous observons une petite déviation à ce comportement quadratique. Finalement, on peut écrire :

$$E(p) = E(0) + E_p p^2, \quad (7.1)$$

où $E_p \equiv E(p=1) - E(p=0)$ est par définition l'énergie de polarisation du système. Pour la calculer, on calcule séparément en Monte Carlo Quantique (§4.3.2) l'énergie des systèmes polarisés en spin et non-polarisés en spin, tous paramètres égaux par ailleurs, puis l'on fait la différence. Ainsi, l'énergie de polarisation s'interprète comme l'énergie (par particule) qu'il faut apporter au système non-polarisé pour polariser tous ses spins électroniques.

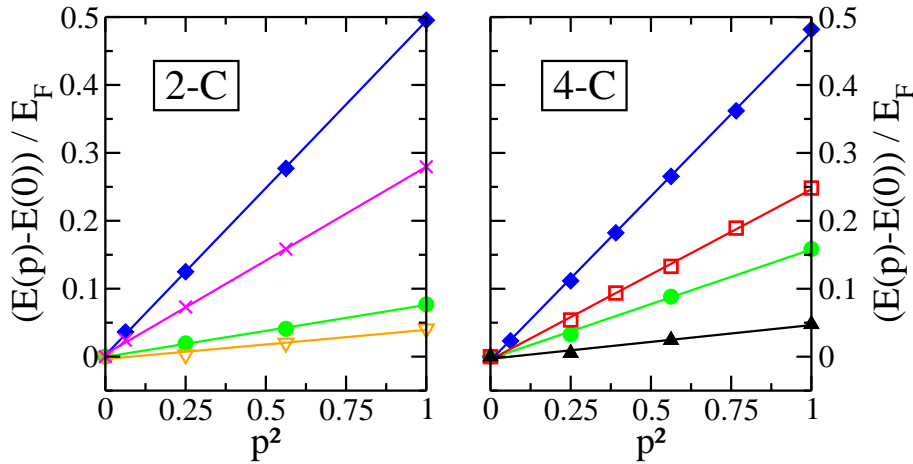


FIG. 7.1 – Energie $E(p) - E(0)$ en unité de E_F , en fonction de p^2 , pour le système 2-C (à gauche) et le système 4-C (à droite), avec $N = 96$ particules dans 42×84 sites. Les symboles correspondent à différents degrés d'interaction et de désordre : en 2-C, $1/k_{Fl} = 0$, $r_s = 0$ (diamants), $1/k_{Fl} = 0$, $r_s = 2$ (croix), $1/k_{Fl} = 0$, $r_s = 10$ (cercles), $1/k_{Fl} = 1.33$, $r_s = 6$ (triangles) et en 4-C, $1/k_{Fl} = 0$, $r_s = 0$ (diamants), $1/k_{Fl} = 0$, $r_s = 10$ (cercles), $1/k_{Fl} = 0.66$, $r_s = 2$ (carrés) et $1/k_{Fl} = 2.65$, $r_s = 6$ (triangles). Les droites sont des fits linéaires.

Une conséquence importante de l'équation (7.1) est que E_p est directement proportionnelle à l'inverse de la susceptibilité de spin, $\chi = n_s/2(dp/dB_{||})_{B_{||}=0}$ (équation (2.3)) :

$$\frac{E_F}{E_p} = 2 \frac{\chi}{\chi_0}. \quad (7.2)$$

¹Sans interaction, toutes les particules sont indépendantes, notamment les up des down, donc on peut sommer l'énergie des particules up et l'énergie des particules down, calculées séparément en sachant que sans désordre, la densité d'état est donnée par (3.8).

où χ_0 est la susceptibilité de spin sans interaction et sans désordre². Ce résultat valide la mesure expérimentale de la susceptibilité de spin par le champ magnétique de polarisation B_p , dans la limite de basse température (voir §2.4.2).

Dans la suite, on étudie en détail les effets de taille finie en N et ν sur E_p . En première lecture, on pourra directement poursuivre au §7.1.4 où l'on s'intéresse à la dépendance en r_s et $k_F l$ de l'énergie de polarisation aux limites continue et thermodynamique.

7.1.2 Validation technique : effets de taille finie en N sur E_p

Sur la figure 7.2 (a), nous montrons les effets de taille finie en N sur l'énergie de polarisation E_p^{4C} d'un système 4-C, sans interaction. On trouve que ceux-ci diminuent quand le désordre augmente, comme nous l'avons déjà remarqué au §5.3.2 pour la fonction d'échelle β (§3.4.2). Pour $k_F l < 1.5$, on peut considérer que les effets de taille finie sont entièrement supprimés à partir de $N = 36$, compte-tenu de nos barres d'erreur statistiques typiques sur le désordre. En présence d'interaction, ils sont légèrement plus importants, comme le montre la figure 7.2 (b). Cela dit, dans le cas sans désordre le plus défavorable, ces effets augmentent au maximum de $0.01 E_F$ avec $N = 36$, si bien que dans la suite, on négligera le rôle de l'interaction sur ces effets de taille finie, en gardant en tête cet ordre de grandeur de barre d'erreur.

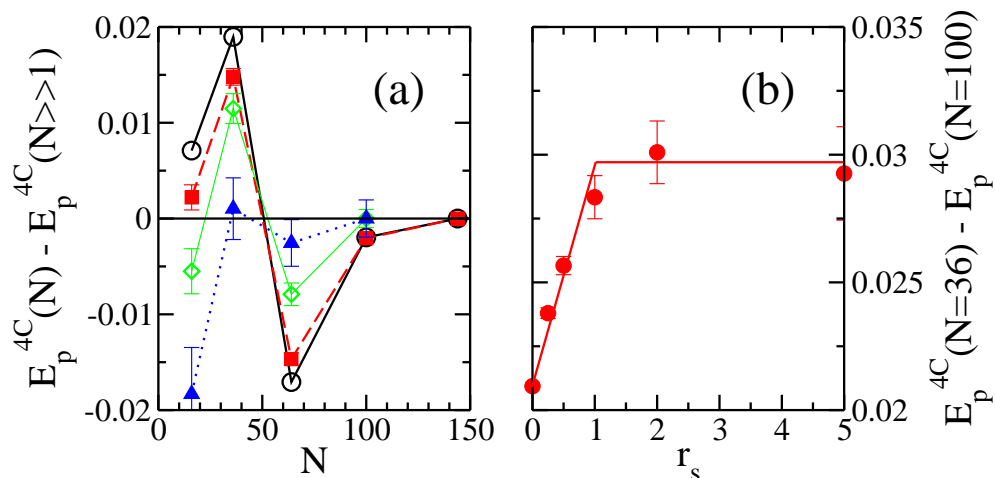


FIG. 7.2 – Effet de taille finie sur l'énergie de polarisation E_p^{4C} d'un système 4-C, à $\nu = 1/24$ fixé. (a) $E_p^{4C}(N) - E_p^{4C}(N \gg 1)$, en unité de E_F^{4C} , en fonction du nombre N de particules, pour un système sans interaction ($r_s = 0$), à différents désordres ($1/k_{Fl} = 0$ (cercles), $1/k_{Fl} = 0.03$ (carrés), $1/k_{Fl} = 0.17$ (diamants) et $1/k_{Fl} = 0.66$ (triangles)). $E_p^{4C}(N \gg 1)$ correspond ici à la valeur de E_p^{4C} au plus grand N calculé. Les effets de taille finie diminuent avec le désordre. (b) $E_p^{4C}(N=36) - E_p^{4C}(N=100)$, en unité de E_F^{4C} , en fonction du degré d'interaction r_s , dans le cas sans désordre ($1/k_{Fl} = 0$). Les droites ont été rajoutées pour guider l'oeil. Les effets de taille finie varient peu avec l'interaction.

Nous n'avons pas directement étudié les effets de taille finie en N sur l'énergie de polarisation E_p d'un système 2-C. Cependant, la situation ne peut qu'être plus favorable en 2-C qu'en 4-C puisqu'à N fixé, les deux surfaces de Fermi dégénérées (à $r_s = 0$) du système 2-C

²En effet, si l'on applique un champ magnétique B_{\parallel} dans le plan du gaz 2D alors l'expression (7.1) devient $E(p) = E(0) + E_p p^2 - g\mu_B B_{\parallel} p/2$, où g est le facteur de Landé et μ_B est le magnéton de Bohr. A température nulle, l'état d'équilibre a la polarisation $p = g\mu_B B_{\parallel}/4E_p$ ce qui donne $\chi = n_s g\mu_B/8E_p$. Sans interaction et sans désordre, $E_p = E_F/2$ donc $\chi_0 = n_s g\mu_B/4E_F$, d'où (7.2).

sont deux fois plus peuplées que les quatre surfaces de Fermi dégénérées du système 4-C. En particulier, à $r_s = 0$, on a $E_p^{4C}(N, k_F l) = 2E_p^{2C}(N/2, k_F l)$ et donc étudier E_p^{4C} ou E_p^{2C} revient au même. Ainsi, si $N = 36$ particules suffisent pour atteindre l'énergie de polarisation du système thermodynamique en 4-C, avec une précision donnée, elles suffisent aussi pour l'atteindre en 2-C, avec une précision qui ne peut qu'être meilleure.

7.1.3 Validation technique : effets de réseau en ν sur E_p

Sans interaction : fort effet de ν -fini

On étudie sur la figure 7.3 (a) la dépendance en ν de l'énergie de polarisation E_p^{4C} d'un système 4-C, sans interaction (cette étude étant équivalente dans ce cas à celle d'un système 2-C, rappelons-le). On constate qu'il existe un effet de ν -fini qui augmente avec le désordre. Dans la remarque ci-dessous, nous attribuons cet effet de réseau à l'existence d'une longueur de corrélation du désordre (essentiellement le pas du réseau) qui dépend du niveau de discrétisation du système par l'intermédiaire de ν . Si on extrapole nos données $E_p^{4C}(\nu)$ à la limite continue $\nu \rightarrow 0$ (symboles pleins), il apparaît que la dépendance en désordre des valeurs obtenues est très bien décrite par la formule perturbative suivante (voir l'insert de la figure 7.3 (a)), dérivée analytiquement à la limite continue, au second ordre en $1/\sqrt{k_F l}$:

$$\boxed{\frac{E_p(r_s = 0)}{E_F} = \frac{1}{2} + \frac{\log 2}{\pi k_F l}}. \quad (7.3)$$

Cette formule s'écrit de la même manière pour les systèmes 2-C et 4-C et l'on pourra trouver les grandes lignes de sa démonstration dans la remarque ci-contre. Précisons que nous avons pris soin d'utiliser un grand nombre de particules dans l'insert de la figure 7.3 (a) ($N = 64$ et même $N = 100$ pour le point sans désordre) de façon à s'assurer que la limite thermodynamique a bien été atteinte (voir §7.1.2).

Avec interaction : suppression des effets de ν -fini

Sur la figure 7.3 (b), on étudie les effets de ν -fini sur E_p^{4C} en présence d'interaction, pour trois valeurs du désordre de la figure 7.3 (a) ($1/k_F l = 0$ (cercles), $1/k_F l = 0.66$ (triangles haut) et $1/k_F l = 2.65$ (diamants)). Alors que sans interaction, nous avons vu que E_p^{4C} dépend fortement de ν , surtout à fort désordre, nous constatons ici que ces effets de réseau en ν disparaissent dès que l'on branche les interactions (même à $r_s = 0.5$ seulement). On pourrait expliquer ce résultat en disant que les électrons ne sont plus sensibles à la corrélation du désordre (de courte portée car ν petit) en présence d'interaction car la répulsion coulombienne délocalise le système 4-C (§6.3.2). Mais alors l'énergie E^{4C} du système ne devrait pas non plus dépendre de ν avec interaction, ce qui est contradictoire avec nos données $E^{4C}(\nu)$ (non présentées ici) qui montrent une dépendance en $\log \nu$. Finalement, on retiendra de ce paragraphe qu'en se plaçant à $\nu = 1/24 \approx 0.04$, comme on le fera dans la suite, on calcule bien l'énergie de polarisation du système à la limite continue, dès que $r_s \neq 0$. Nous l'avons ici explicitement vérifié pour des systèmes 4-C et nous supposons que cela reste vrai pour des systèmes 2-C.

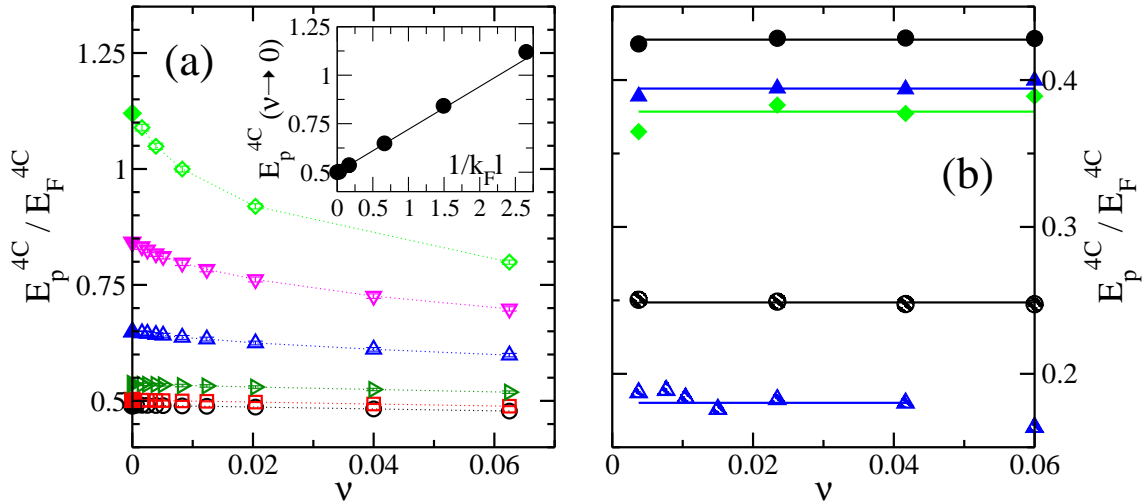


FIG. 7.3 – Effet de réseau en ν sur l'énergie de polarisation E_p^{4C} d'un système 4-C avec $N = 64$ particules. (a) Sans interaction, pour différents désordres ($1/k_{Fl} = 0$ (cercles), $1/k_{Fl} = 0.03$ (carrés), $1/k_{Fl} = 0.17$ (triangles droite), $1/k_{Fl} = 0.66$ (triangles haut), $1/k_{Fl} = 1.49$ (triangles bas) et $1/k_{Fl} = 2.65$ (diamants)). Les symboles pleins correspondent aux valeurs extrapolées à $\nu \rightarrow 0$ de E_p^{4C} . Ces valeurs sont tracées en fonction du désordre $1/k_{Fl}$ dans l'insert (le point à $1/k_{Fl} = 0$ a été calculée avec $N = 100$). La droite noire est donnée par la formule théorique (7.3) et est en parfait accord avec nos données. (b) Idem avec interaction ($r_s = 0.5$ pour les symboles pleins et $r_s = 5$ pour les symboles rayés) pour trois valeurs du désordre de la figure (a) ($1/k_{Fl} = 0$ (cercles), $1/k_{Fl} = 0.66$ (triangles haut) et $1/k_{Fl} = 2.65$ (diamants)). Les barres d'erreur sont omises pour plus de visibilité. On constate que dès que l'interaction est branchée, les effets de réseau en ν disparaissent.

Remarque : grandes lignes de la démonstration de l'équation (7.3) et discussion sur l'origine des effets de réseau en ν sur l'énergie et l'énergie de polarisation

On se place à $r_s = 0$ et on cherche à calculer perturbativement en désordre l'énergie E^{1C} de notre modèle (3.2), sans spin et sans vallée pour l'instant (système 1-C). On rappelle que v_i désigne le potentiel aléatoire au site i . Par développement limité à l'ordre 2 en $\{v_i\}$, on trouve que :

$$E^{1C} = E_0^{1C} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \chi_{ij} \overline{v_i v_j}, \quad (7.4)$$

où E_0^{1C} est l'énergie du système sans désordre, $\bar{\cdot}$ est la moyenne sur le potentiel aléatoire et $\chi_{ij} \equiv \partial n_i / \partial v_j|_0 = \partial^2 E / \partial v_i \partial v_j|_0$ avec n_i la densité au site i , est la fonction de réponse densité-densité du système discret sans désordre. On réécrit cette formule dans le continu car on est capable de calculer analytiquement dans cette limite la fonction de réponse densité-densité :

$$E^{1C} = E_0^{1C} + \frac{1}{2} \int_S d\vec{r} \int_S d\vec{r}' \chi(\vec{r}, \vec{r}') \overline{v(\vec{r})v(\vec{r}')}. \quad (7.5)$$

Ici, S désigne la surface du gaz 2D et $\chi(\vec{r}, \vec{r}')$ est donnée par [19, 95] :

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}') = \chi(u = |\vec{r} - \vec{r}'|) = \frac{mk_F^2}{4\pi} [J_0 Y_0 + J_1 Y_1](k_F u), \quad (7.6)$$

où k_F est le vecteur d'onde de Fermi et J_0 , J_1 , Y_0 et Y_1 sont les fonctions de Bessel de première et seconde espèce d'ordres 0 et 1 ($\hbar = 1$). La question est maintenant de savoir ce que vaut la version continue du produit de corrélation, $\overline{v(\vec{r})v(\vec{r}')}$. Dans le modèle discret, $\overline{v_i v_j} = (W^2/12)\delta_{ij}$ si bien que l'on serait spontanément tenté de prendre un delta de Dirac pour $\overline{v(\vec{r})v(\vec{r}')}$. En fait, cette proposition doit être rejetée car elle entraîne une divergence de l'énergie E d'après (7.5). Pour établir correctement la correspondance discret/continu, il faut remarquer que dans le modèle discret, le gaz 2D continu est

discretisé en petits carrés de surface b^2 et donc que le désordre est en fait corrélé sur une longueur caractéristique de l'ordre du pas du réseau b . C'est pourquoi on prend :

$$\overline{v(\vec{r})v(\vec{r}')}) = \begin{cases} \alpha & \text{si } |\vec{r} - \vec{r}'| \leq \lambda \\ 0 & \text{si } |\vec{r} - \vec{r}'| > \lambda, \end{cases} \quad (7.7)$$

où λ est la longueur de corrélation du potentiel de désordre ($\lambda \sim b$) et α est une constante que l'on détermine en écrivant $\sum_i \overline{v_i v_j} = (1/b^2) \int d\vec{r} \overline{v(\vec{r})v(\vec{r}')})$. On trouve : $\alpha = b^2 W^2 / 12\pi\lambda^2$. L'intégration (7.5) s'effectue ensuite facilement en développant la fonction de réponse $\chi(\vec{r}, \vec{r}') = \chi(u = |\vec{r} - \vec{r}'|)$ au premier ordre en $u = 0$:

$$\chi(u) = (mk_F^2 / 4\pi^2)(c + 2 \log u) + O(u^2), \quad (7.8)$$

où c est une constante numérique. Après calculs et retour dans le discret (voir §3.3), on obtient pour l'énergie des N particules à petit ν :

$$E^{1C} = 2N\pi\nu t \left[1 + \frac{W^2}{96\pi^2\nu t} (\log \nu + k) \right], \quad (7.9)$$

k étant une constante numérique. On a vérifié numériquement que E^{1C} dépend logarithmiquement de ν , sans interaction mais aussi avec (au moins pour $\nu \leq 0.03$ et $r_s \leq 5$). Finalement, on déduit la formule (7.3) de l'expression (7.9) en écrivant $E_p^{2C} = (E^{1C}(N, \nu) - 2E^{1C}(\frac{N}{2}, \frac{\nu}{2}))/N$ et $E_p^{4C} = (2E^{1C}(\frac{N}{2}, \frac{\nu}{2}) - 4E^{1C}(\frac{N}{4}, \frac{\nu}{4}))/N$. On retiendra de cette démonstration que la dépendance en ν à $r_s = 0$ de l'énergie et de l'énergie de polarisation (visible sur la figure 7.3 (a)) est due à la corrélation spatiale du désordre. Plus ν est petit c'est-à-dire plus la discrétisation du gaz 2D est fine, plus la longueur de corrélation du désordre est petite et donc plus le désordre varie rapidement dans l'espace ce qui se ressent sur l'énergie du système. A cela peuvent bien sûr s'ajouter d'autres effets de réseau dus par exemple au fait que la relation de dispersion n'est pas parfaitement quadratique à faible remplissage, mais en cosinus (§3.4.1).

7.1.4 Effets des interactions et du désordre sur E_p

Sur la figure 7.4, on a tracé l'énergie de polarisation E_p en fonction de l'interaction r_s ((a) et (d)) et en fonction du désordre $1/\sqrt{k_F l}$ ((b) et (e)), pour le système 2-C (en haut) et le système 4-C (en bas). A $r_s \neq 0$, toutes nos données ont été calculées à $\nu = 1/24$, ce qui est une valeur de remplissage suffisamment faible pour atteindre la limite continue d'après ce que nous avons vu au §7.1.3. A $r_s = 0$, elles ont été extrapolées à $\nu \rightarrow 0$ en traçant $E_p(\nu)$ (voir la figure 7.3 (a)). De plus, nous avons systématiquement utilisé $N = 36$ particules dans ces calculs. En 2-C, ce nombre N est suffisant pour atteindre la limite thermodynamique avec une précision que nous estimons inférieure à $0.01 E_F^{2C}$. En 4-C, des effets de taille finie persistent à faible désordre, si bien que nous avons corrigé nos données pour $k_F l \geq 5$ en utilisant les corrections de N -fini trouvées sur la figure 7.2 (a) sans interaction et en supposant qu'elles restent strictement les mêmes à toute interaction $0 \leq r_s \leq 8$ (ce que nous avons vérifié à $0.01 E_F^{4C}$ près sur la figure 7.2 (b)). Ainsi, nous pouvons affirmer que les énergies de polarisation présentées sur les figures 7.4 (a), (b), (d) et (e) correspondent à celles des systèmes 2-C et 4-C thermodynamiques, à la limite continue, avec une très bonne précision de l'ordre de $0.01 E_F$. Sur ces figures, nous avons omis les barres d'erreur sur les points pour plus de visibilité. Elles sont dominées par l'erreur statistique liée au moyennage sur les différentes configurations du potentiel aléatoire, sauf à très faible désordre où ce sont les effets de taille finie qui prévalent. Globalement, on estime l'erreur sur les points 2-C à $\pm 0.02 E_F^{2C}$ pour $k_F l \geq 3$ et $\pm 0.03 E_F^{2C}$ pour $0.3 < k_F l < 3$, et l'erreur sur les points 4-C à $\pm 0.02 E_F^{4C}$ pour $k_F l \geq 1.5$ et $\pm 0.04 E_F^{4C}$ pour $0.2 < k_F l < 1.5$.

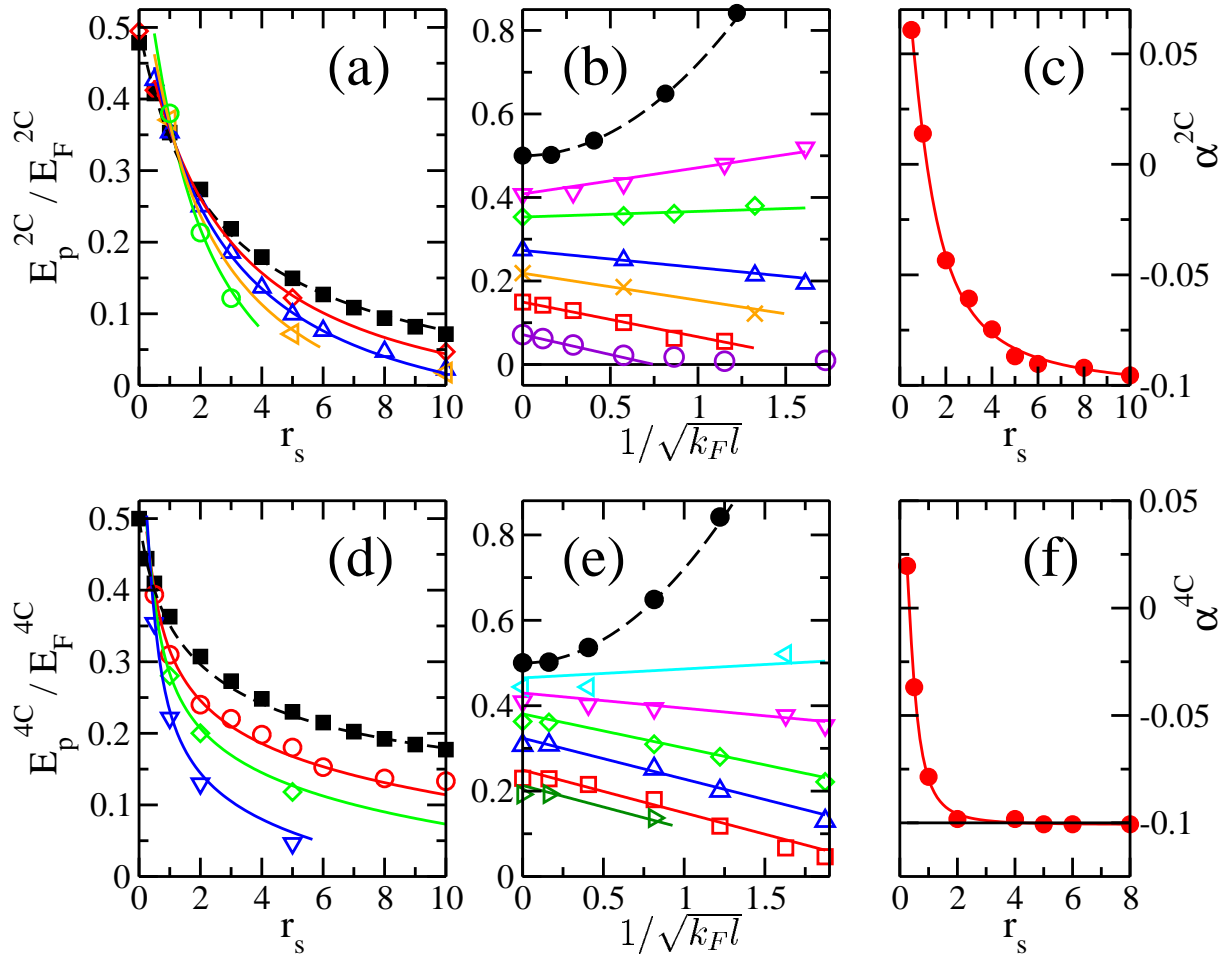


FIG. 7.4 – Energie de polarisation E_p/E_F des systèmes 2-C (en haut) et 4-C (en bas) à la limite thermodynamique continue. (a) et (d) E_p/E_F en fonction de l'interaction r_s pour différents désordres (en 2-C, $1/k_{Fl} = 0$ (carrés), $1/k_{Fl} = 0.08$ (diamants), $1/k_{Fl} = 0.33$ (triangles haut), $1/k_{Fl} = 0.75$ (triangles gauche), $1/k_{Fl} = 1.75$ (cercles) et en 4-C, $1/k_{Fl} = 0$ (carrés), $1/k_{Fl} = 0.66$ (cercles), $1/k_{Fl} = 1.49$ (diamants) et $1/k_{Fl} = 3.51$ (triangles)). Les deux lignes en pointillés correspondent aux résultats Monte Carlo de [21] (2-C) et [157] (4-C) sans désordre. (b) et (e) E_p/E_F en fonction du désordre $1/\sqrt{k_{Fl}}$ pour différents r_s ($r_s = 0$ (cercles pleins), $r_s = 0.25$ (triangles gauche), $r_s = 0.5$ (triangles bas), $r_s = 1$ (diamants), $r_s = 2$ (triangles haut), $r_s = 3$ (croix), $r_s = 5$ (carrés), $r_s = 8$ (triangles droite) et $r_s = 10$ (cercles)). Dans chaque figure, la ligne en pointillés correspond à la formule théorique perturbative (7.3) à $r_s = 0$. Les lignes pleines de (a), (b), (d) et (e) sont données par les fits (7.11), (7.10) et (7.12). (c) et (f) Paramètre α de la formule (7.11) en fonction de r_s . Les deux lignes rouges sont données par le fit (7.12).

Sans désordre : comparaison de nos données $E_p(r_s)$ à celles de [21] et [157]

Le problème sans désordre a déjà été étudié en Monte Carlo Quantique par D. M. Cerperley [263] puis S. Moroni [21], G. Senatore [157, 221] et leurs collaborateurs. Dans ces travaux, les auteurs utilisent la méthode Diffusion Monte Carlo qui est l'analogie en espace continu et temps discrétisé de notre méthode GFMC (qui elle, travaille en espace discrétisé et temps continu). Sur les figures 7.4(a) et (d), on compare nos données $E_p(r_s)$ sans désordre (carrés) aux résultats obtenus par cette méthode (courbes en pointillés) dans [21] (pour le cas 2-C) et dans [157] (pour le cas 4-C). Manifestement, nos résultats sont en très bon accord avec les leurs. L'énergie de polarisation E_p décroît avec l'interaction r_s , ce qui se comprend facilement en remarquant que les spins électroniques ont tendance à s'aligner

spontanément, pour empêcher deux électrons de trop s'approcher (principe de Pauli) et ainsi minimiser l'énergie coulombienne dont l'importance augmente avec r_s . Par ailleurs, on trouve qu'en 2-C, l'énergie de polarisation sans désordre devient extrêmement petite à forte interaction ($E_p^{2C} = (0.023 \pm 0.01)E_F^{2C}$ à $r_s = 20$). Dans [221], F. Rapisarda et G. Senatore ont même trouvé que cette énergie s'annule à $r_s \approx 20$ puis devient négative, prédisant ainsi l'existence d'une instabilité ferromagnétique. En revanche, en 4-C, nos résultats montrent que cette énergie de polarisation reste toujours clairement positive, au moins jusqu'à $r_s = 20$ où $E_p^{4C} = (0.13 \pm 0.01)E_F^{4C}$. Il n'y a donc aucun doute qu'avec vallées (toujours sans désordre), le système non-polarisé en spin soit le système stable, même à forte interaction.

Finissons ce paragraphe en donnant une formule qui fitte correctement nos données d'énergie de polarisation sans désordre, notée à partir de maintenant E_p^{cl} (*cl* pour clean) :

$$E_p^{cl}(r_s) = \frac{A_0 + A_1 r_s}{A_2 + A_3 r_s + A_4 r_s^2} E_F. \quad (7.10)$$

Pour ne pas alourdir les notations, nous n'avons pas précisé les indices 2C et 4C dans cette formule qui a la même forme pour les deux types de système. En réalité, chaque système a son jeu de paramètres, A_i^{2C} ou A_i^{4C} , dont les valeurs sont explicitées dans le tableau 7.1. De même, l'énergie de Fermi E_F doit être remplacée par E_F^{2C} pour le système 2-C et par E_F^{4C} pour le système 4-C. Précisons enfin que la formule (7.10) rend bien compte de nos données pour $0 \leq r_s \leq 20$.

Effet du désordre et fit de nos données $E_p(k_F l, r_s)$

On rajoute à présent le désordre. A notre connaissance, nous sommes les premiers à avoir calculé avec désordre l'énergie de polarisation du gaz 2D. Cela n'a notamment pas été fait en Diffusion Monte Carlo car il est difficile d'introduire le désordre dans cet algorithme qui travaille dans un espace des positions continu. En revanche, en GFMC, l'espace est discrétisé et la prise en compte du désordre est triviale via le modèle d'Anderson (§3.2). Sur la figure 7.4, nous avons tracé l'énergie de polarisation E_p des systèmes 2-C (b) et 4-C (e) en fonction du désordre $1/\sqrt{k_F l}$, pour différents degrés d'interaction r_s . A très faible interaction ($r_s \leq 1.2$ en 2-C et $r_s \leq 0.3$ en 4-C), on trouve que le désordre fait croître E_p . En particulier, à $r_s = 0$ (cercles), l'énergie de polarisation E_p vérifie, du moins dans le régime de désordre exploré, la formule perturbative (7.3), $E_p/E_F = 1/2 + \log 2/\pi k_F l$ (courbes en pointillés), comme nous l'avons déjà montré au §7.1.3. A plus forte interaction ($r_s > 1.2$ en 2-C et $r_s > 0.3$ en 4-C), l'effet du désordre s'oppose et on observe une décroissance de E_p quand $1/k_F l$ augmente. La correction perturbative du second ordre en $1/k_F l$ n'est plus valable sauf peut-être à très faible désordre ($1/k_F l < 0.04$). Elle est remplacée par une correction en $1/\sqrt{k_F l}$. Ainsi, on obtient un très bon fit de l'ensemble de nos données avec la formule suivante, valable pour $0.5 \leq r_s \leq 10$ en 2-C et $0.25 \leq r_s \leq 10$ en 4-C (du moins tant qu'elle donne une valeur strictement positive) :

$$E_p(k_F l, r_s) = E_p^{cl}(r_s) + \frac{\alpha(r_s)}{\sqrt{k_F l}} E_F + C \cdot E_F. \quad (7.11)$$

Dans cette expression, E_p^{cl} est l'énergie de polarisation du système propre donnée par le Padé (7.10), C est une constante valant $C^{2C} = 0$ en 2-C et $C^{4C} = 0.019$ en 4-C, et $\alpha(r_s)$ est

| i | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|------------|-------|--------|------|-------|-------|
| A_i^{2C} | 11.7 | -0.25 | 24.4 | 7.75 | 0.27 |
| A_i^{4C} | 27.93 | 9.83 | 56.5 | 46 | 1.77 |
| B_i^{2C} | 38.38 | -27.79 | 348 | 170.5 | 267 |
| B_i^{4C} | 2.70 | -24.81 | 42.4 | -11.5 | 246.9 |

TAB. 7.1 – Paramètres A_i et B_i des équations (7.10) et (7.12) pour les systèmes 2-C et 4-C.

un paramètre fitté par le Padé suivant :

$$\alpha(r_s) = \frac{B_0 + B_1 r_s^2}{B_2 + B_3 r_s + B_4 r_s^2}. \quad (7.12)$$

Les valeurs des paramètres B_i sont explicitées dans le tableau 7.1 et les courbes $\alpha(r_s)$ des systèmes 2-C et 4-C sont tracées respectivement sur les figures 7.4 (c) et 7.4 (f). En 4-C, on pourra simplement retenir que α^{4C} est égal avec une bonne précision à une constante, $\alpha^{4C} = -0.1$, pour $r_s \geq 2$. Par ailleurs, le fait que α s'annule en changeant de signe, à $r_s \approx 1.2$ en 2-C et $r_s \approx 0.3$ en 4-C, traduit les effets opposés du désordre à très faible interaction et plus forte interaction et donc l'impossibilité d'explorer le rôle du désordre sur l'énergie de polarisation du gaz 2D corrélé par une approche perturbative en interaction. Pour finir, remarquons qu'en abaissant l'énergie de polarisation du gaz 2D corrélé, le désordre favorise l'apparition d'une instabilité ferromagnétique. Il semble même sur la figure 7.4 (b) que l'énergie de polarisation E_p^{2C} s'annule à seulement $r_s = 10$ pour des désordres $k_F l < 1.7$ (cercles).

Dans la section suivante, on montre sans paramètre ajustable que l'énergie de polarisation du gaz 2D coïncide avec l'énergie caractéristique, thermique ou Zeeman, qui contrôle les comportements métalliques observés expérimentalement.

7.2 Energie caractéristique des comportements métalliques : l'énergie de polarisation

Sur les figures 7.5 et 7.7, nous avons reporté huit jeux de courbes expérimentales issues de la littérature. Celles-ci donnent la dépendance en température T ou en champ magnétique parallèle B_{\parallel} de la résistivité ρ , pour différentes densités de porteurs n_s de part et d'autre de la « phase métallique », respectivement dans des Si-MOSFETs et dans des hétérostructures n-GaAs. Nous nous intéressons dans cette section à l'axe x de ces courbes et montrons que l'énergie typique à laquelle la résistivité varie dans la « phase métallique » est l'énergie de polarisation du gaz 2D.

Pour chaque jeu de courbes correspondant à un échantillon donné, nous avons estimé le paramètre $\eta \equiv r_s \sqrt{k_F l}$ par la formule (2.1) en utilisant la mobilité maximale μ_{peak} de l'échantillon en question (voir §1.2.2). Ensuite, pour chaque courbe de densité n_s fixée, nous avons déterminé le paramètre d'interaction r_s correspondant, via l'équation (2.2), et le paramètre de désordre $k_F l$ connaissant $\eta = r_s \sqrt{k_F l}$. Ainsi, nous avons pu associer à chaque courbe expérimentale de couple $(r_s, k_F l)$ fixé, l'énergie de polarisation $E_p(r_s, k_F l)$ calculée en Monte Carlo Quantique grâce aux équations (7.11), (7.10) et (7.12). Remarquons que les corrections dues au désordre à l'énergie de polarisation E_p sont assez petites dans ces échantillons de haute

mobilité. E_p est donc dominée ici par la contribution sans désordre $E_p^{cl}(r_s)$ si bien que nos résultats sont en fin de compte peu sensibles à l'estimation faite de η .

Sur chaque courbe des figures 7.5 et 7.7, nous avons tracé un point rouge d'abscisse l'énergie de polarisation E_p correspondante, exprimée soit en terme de température de polarisation T_p pour les courbes $\rho(T)$,

$$T_p(r_s, k_{Fl}) = \frac{E_p(r_s, k_{Fl})}{k_B}, \quad (7.13)$$

k_B étant la constante de Boltzmann, soit en terme de champ magnétique de polarisation³ B_p pour les courbes $\rho(B_{\parallel})$,

$$B_p(r_s, k_{Fl}) = \frac{4E_p(r_s, k_{Fl})}{g\mu_B}. \quad (7.14)$$

Ici, g désigne le facteur de Landé qui vaut $g = 2$ dans les Si-MOSFETs et $g = 0.44$ dans les hétérostructures GaAs. Pour éviter tout malentendu, nous insistons sur le fait que nous n'avons calculé que l'abscisse de chacun de ces points rouges, l'ordonnée étant donné par l'intersection avec les courbes $\rho(T)$ ou $\rho(B_{\parallel})$ correspondantes. Les points sont donc par construction sur les courbes. Il est tout-à-fait remarquable que ces points rouges coïncident parfaitement, sans aucun paramètre ajustable, avec les points d'inflexion des courbes $\rho(T)$ et les champs magnétiques auxquels les courbes $\rho(B_{\parallel})$ saturent. Dans la suite, nous revenons en détail sur ce résultat (qu'il faudra nuancer dans le cas des hétérostructures) et discutons de ses implications quant à la compréhension du mécanisme régissant les comportements métalliques.

7.2.1 Cas des Si-MOSFETs

Champ magnétique de saturation des courbes $\rho(B_{\parallel})$: champ de polarisation

Nous présentons sur les figures 7.5 (a), 7.5 (b) et 7.5 (c) des données expérimentales de résistivité en fonction de B_{\parallel} , mesurées à basse température $T \leq 0.3K$. Ces trois figures correspondent à trois différents Si-MOSFETs, ayant respectivement comme pic de mobilité, $\mu_{peak} = 25000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [161], $\mu_{peak} = 41000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [208] et $\mu_{peak} = 20000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [282]. Les courbes ont été obtenues pour différentes densités électroniques n_s , du côté de la « phase métallique » à champ nul, sauf les trois courbes du haut dans la figure 7.5 (a) qui ont été obtenues du côté de la phase isolante. Manifestement, chacune des courbes $\rho(B_{\parallel})$ sature à partir du point rouge ce qui signifie que le champ magnétique de polarisation B_p coïncide avec le champ magnétique B_{sat} auquel la résistivité sature. En soi, ce résultat n'a rien d'étonnant. En effet, nous avons déjà remarqué au §2.4.1 que, quelque soit le mécanisme à l'origine de la dépendance $\rho(B_{\parallel})$, le seul effet du champ magnétique parallèle est de polariser l'échantillon par effet Zeeman et donc qu'il est naturel que la résistivité sature dès que B_{\parallel} est suffisamment fort pour polariser tous les spins ($B_{\parallel} \geq B_p$). De précédentes études expérimentales avaient d'ailleurs conclu à ce même résultat (voir [177] par exemple), la différence étant que nous l'étendons ici au régime des « basses » densités, de part et d'autre de la « transition métal/isolant ». En réalité, plus que le résultat physique peu surprenant, on retiendra de ces figures le parfait accord entre données expérimentales et données numériques, obtenu rappelons-le sans aucun paramètre ajustable. Celui-ci peut être considéré comme une validation de notre modèle. Il témoigne aussi de la justesse et de la précision de notre méthode Monte Carlo Quantique.

³Il s'agit du champ magnétique parallèle à appliquer au gaz 2D pour polariser tous les spins des porteurs par effet Zeeman et ainsi obtenir une polarisation complète $p = 1$.

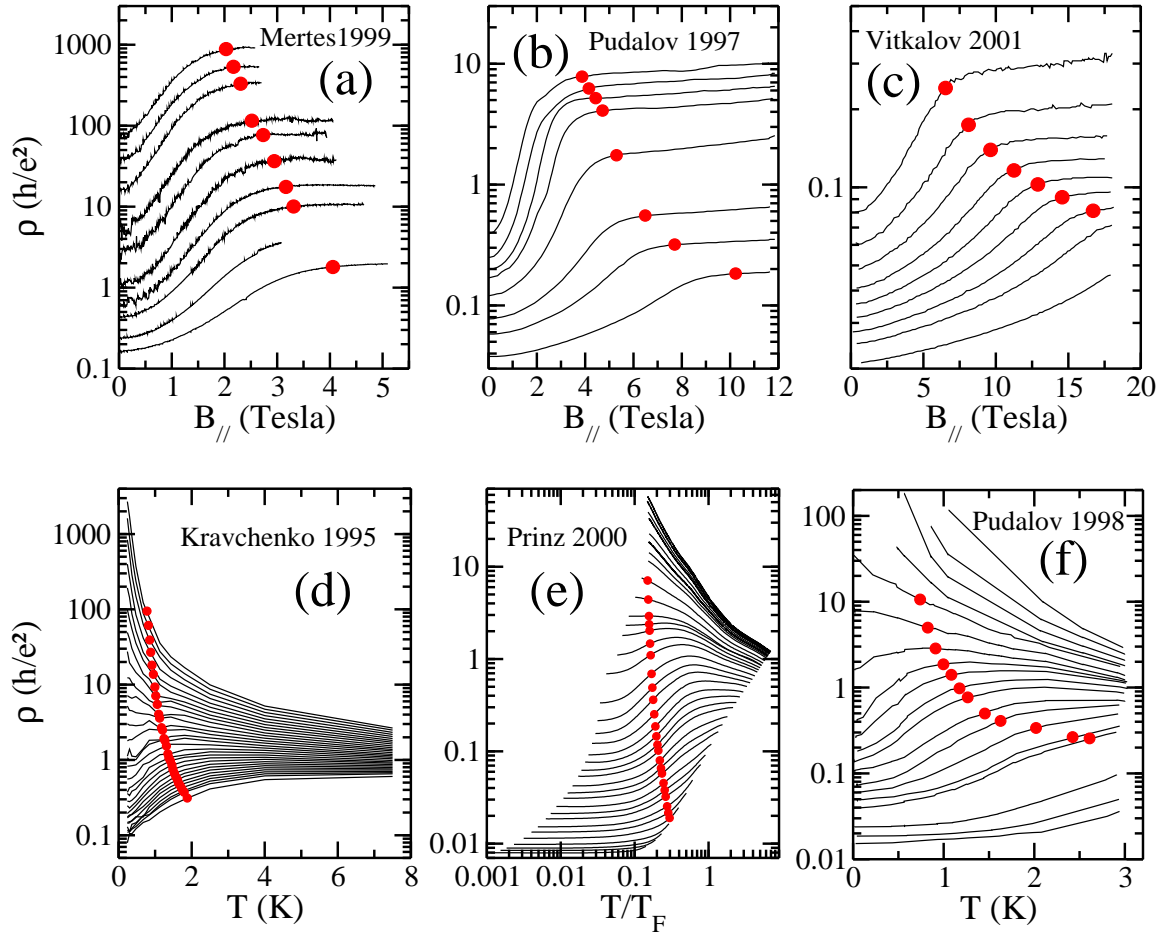


FIG. 7.5 – Données expérimentales de résistivité ρ mesurées dans différents Si-MOSFETs ((a)-[161], (b)-[208], (c)-[282], (d)-[135], (e)-[201] et (f)-[210]) en fonction du champ magnétique parallèle B_{\parallel} à basse température (en haut) et en fonction de la température T à champ nul (en bas). Les courbes correspondent à différentes densités n_s . Les points rouges sont donnés par les énergies de polarisation calculées pour chaque courbe en Monte Carlo Quantique et exprimées soit en terme de champ de polarisation B_p , soit en terme de température de polarisation T_p . Sans paramètre ajustable, on trouve un très bon accord entre les points rouges d'une part et les points d'inflexion des courbes $\rho(T)$ ou les champs de saturation des courbes $\rho(B_{\parallel})$ d'autre part.

Température de « crossover » des courbes $\rho(T)$: température de polarisation

Les figures 7.5 (d), 7.5 (e) et 7.5 (f) présentent des données expérimentales de résistivité en fonction de la température T , à champ magnétique nul, pour différentes densités électroniques n_s de part et d'autre de la « transition métal/isolant ». Elles correspondent à trois différents Si-MOSFETs, avec respectivement $\mu_{peak} = 30000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [135], $19600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [201] et $41000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [210]. Signalons en particulier que la figure 7.5 (d) retranscrit les premières données de Kravchenko *et al* à l'origine du débat sur la question de l'existence de métaux à deux dimensions. Au paragraphe 2.3.4, plus précisément sur la figure 2.6, nous avons tracé ces données en fonction de T/T_F (T_F étant la température de Fermi) et montré que la température caractéristique à laquelle la résistance augmente dans la « phase métallique » est assez élevée, de l'ordre de $T \approx 0.2 T_F$. Cette remarque avait d'ailleurs d'abord été formulée par B. L. Altshuler dans [8] sans qu'il puisse pour autant identifier cette échelle de température.

Via les trois figures 7.5 (d), 7.5 (e) et 7.5 (f), nous pouvons désormais affirmer que cette température caractéristique correspond à la température de polarisation T_p , donnée pour chaque courbe par les points rouges⁴. En effet, nous trouvons un accord visuellement parfait entre les points rouges et les températures typiques d'augmentation de la résistance, cela sans paramètre ajustable et pour les trois différents échantillons. Par conséquent, il semble qu'une unique échelle d'énergie contrôle la physique des comportements métalliques en température et celle de la magnétorésistance positive en champ parallèle : l'énergie de polarisation. Précisons à ce stade que, contrairement au champ magnétique parallèle qui polarise le gaz 2D (par effet Zeeman), la température peuple des états polarisés sans jamais induire une polarisation moyenne non nulle du système. En effet, lorsque la température est augmentée, des états de polarisation p et $-p$ se peuplent avec la même probabilité $P(p)$, donnée par le poids de Boltzmann $P(p) = P(p=0)e^{-E_p p^2/k_B T}$. Ainsi autant d'états de polarisation p que de polarisation $-p$ sont peuplés, si bien que la polarisation moyenne du gaz 2D reste toujours strictement nulle : la température n'aimante pas notre système !

En résumé, nous constatons sur la figure 7.5 que la température et le champ magnétique parallèle ont des effets similaires sur la résistivité du gaz 2D, du côté de la « phase métallique », et que l'énergie de polarisation est l'énergie caractéristique commune à ces deux effets. Ce résultat est très important car il impose de fortes contraintes sur le mécanisme responsable des comportements métalliques. Nous en reparlerons au §7.2.3.

Discussion sur la question de la divergence de la susceptibilité de spin χ au voisinage de la « transition métal-isolant »

Nous avons vu au §2.4.2 que la question de la divergence de la susceptibilité de spin χ au voisinage de la « transition métal-isolant » est fortement débattue, aussi bien parmi les théoriciens que les expérimentateurs. Dans cette section, nous proposons d'y répondre en analysant nos données d'énergie de polarisation E_p , directement reliée à la susceptibilité de spin χ par l'équation (7.2). D'après cette équation, il est clair que savoir si χ diverge ou non, revient à savoir si E_p s'annule à une densité critique ou, en terme de champ magnétique, si le champ de polarisation B_p s'annule. Sur la figure 7.6 de droite, nous comparons en fonction de r_s , nos B_p (points et ligne rouges) à des mesures expérimentales réalisées dans des Si-MOSFETs par deux équipes différentes⁵. Le premier jeu de données (carrés et pointillés bleus) est issu de [239] et correspond en fait à des mesures de champ de saturation B_{sat} par scaling de courbes de magnétorésistivité $\rho(B_{\parallel})$. Une fois de plus, on trouve un bon accord entre nos B_p et les champs B_{sat} (déjà vu sur les figures 7.5 (a), (b) et (c) pour d'autres échantillons). La coïncidence n'est néanmoins pas parfaite, comme cela a déjà été remarqué dans [214]. Nous attribuons ce léger désaccord à la procédure expérimentale utilisée dans [239] pour extraire B_{sat} . Pour le prouver, nous avons reporté sur la figure 7.6 de gauche quelques courbes expérimentales $\rho(B_{\parallel})$ issues de [239] et nous y avons rajouté, pour deux densités données, nos B_p (points) et les B_{sat} (carrés) extraits par les auteurs, via scaling des données. Manifestement, l'une de ces valeurs de B_{sat} est clairement inférieure à la vraie valeur du champ à laquelle la

⁴Comme on peut le voir sur la figure 7.5 (e), dans le régime de paramètres des expériences, T_p/T_F varie peu avec la densité autour de 0.2 ce qui explique nos premières conclusions au §2.3.4.

⁵Comme les Si-MOSFETs en question sont de mobilité similaire ($\mu_{peak} = 30000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour [239] et $\mu_{peak} = 24000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour [177]) et que l'énergie de polarisation dépend peu du désordre dans le régime de désordre des expériences (voir la figure 7.4 (e)), nous n'avons tracé qu'une seule courbe $B_p(r_s)$, en prenant le η donné par $\mu_{peak} = 30000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, pour ne pas alourdir la figure.

résistivité sature, alors que nos données de B_p sont en bon accord avec le champ de saturation des courbes $\rho(B_{\parallel})$. Ainsi, les auteurs de [239] ont conclu par leur procédé à une divergence de la susceptibilité de spin χ . Nous la remettons ici en cause, sachant qu'elle est extrêmement sensible au procédé utilisé pour extraire B_{sat} et que nous estimons faux le procédé en l'occurrence utilisé (du moins pas assez précis à basse densité pour conclure). Par ailleurs, nous comparons aussi sur la figure 7.6 de droite nos $B_p(r_s)$ à des mesures de champ de polarisation effectuées dans [177] par analyse d'oscillations Shubnikov de Haas (petits diamants verts). Cette fois-ci, nous trouvons un accord absolument parfait entre nos données numériques et ces données expérimentales. Nous en concluons finalement que B_p décroît fortement avec r_s sans s'annuler. Autrement dit, nous pensons que la susceptibilité de spin χ ne diverge pas, en accord avec [213] ou [205] mais en contradiction avec [239]. Les prétendues divergences de χ sont dûes, selon nous, aux méthodes de mesure expérimentales, trop imprécises à forte interaction lorsque le champ de polarisation B_p devient tout petit.

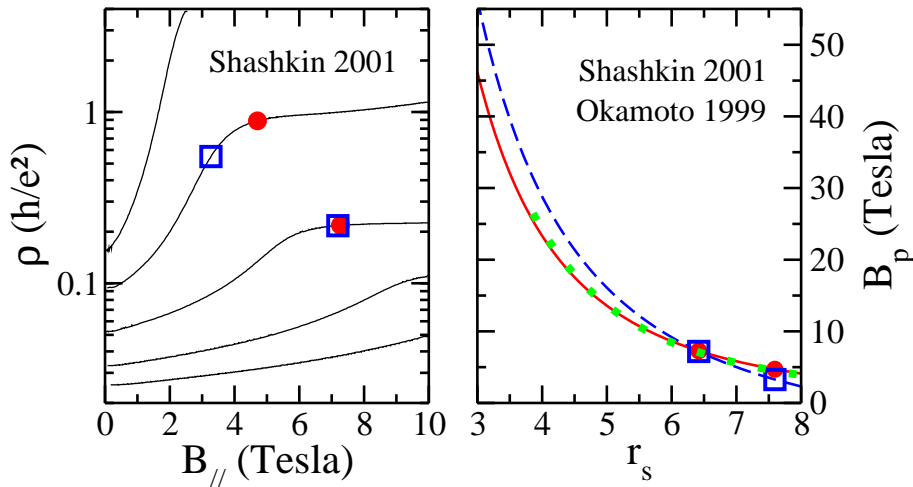


FIG. 7.6 – A gauche : résistivité ρ en fonction du champ magnétique parallèle B_{\parallel} , à différentes densités n_s , d'après [239]. A droite : champ de saturation B_{sat} mesuré expérimentalement dans [239] (pointillés bleus), champ de polarisation B_p calculé en Monte Carlo Quantique (ligne rouge) et champ de polarisation B_p mesuré expérimentalement dans [177] (petits diamants verts) en fonction du degré d'interaction r_s . Dans les deux figures, les points rouges correspondent aux B_p calculés en Monte Carlo Quantique et les carrés bleus aux B_{sat} issus de [239], pour deux densités fixées.

7.2.2 Cas des hétérostructures GaAs

Nous nous intéressons à présent à l'échelle d'énergie des comportements métalliques dans les hétérostructures GaAs, en adoptant la même démarche que précédemment, pour les Si-MOSFETs. Ainsi, nous avons reporté sur la figure 7.7 des données expérimentales de résistivité en fonction du champ magnétique parallèle ((a)-[152]) et en fonction de la température ((b)-[272]), dans deux différents gaz d'électrons GaAs de mobilité respective $\mu_{peak} = 5.5 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et $\mu_{peak} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Nous avons rajouté les points rouges correspondant aux énergies de polarisation associées à chaque courbe et exprimées en terme de champ de polarisation B_p (a) ou de température de polarisation T_p (b). Elles ont été calculées en Monte Carlo Quantique à partir du modèle 2-C.

Nous trouvons à nouveau que la température caractéristique à laquelle on observe l'augmentation de la résistivité associée au comportement métallique, coïncide approximativement

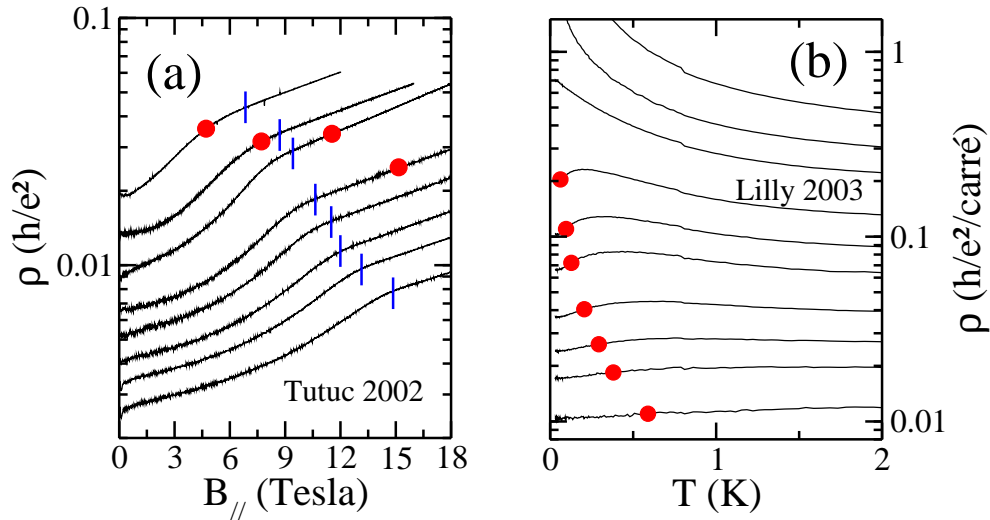


FIG. 7.7 – Données expérimentales de résistivité ρ mesurées dans des hétérostructures n -GaAs en fonction du champ magnétique parallèle $B_{||}$ à basse température ((a)-[272]) et en fonction de la température T à champ nul ((b)-[152]). Les courbes correspondent à différentes densités n_s . Les points rouges sont donnés par les énergies de polarisation calculées pour chaque courbe en Monte Carlo Quantique et exprimées soit en terme de champ de polarisation B_p (a), soit en terme de température de polarisation T_p (b). Les traits bleus dans (a) indiquent les champs magnétiques de polarisation mesurés dans [152].

avec la température de polarisation calculée numériquement (b). Précisons toutefois que l'analyse des données est rendue difficile par le fait que l'effet métallique est peu marqué dans les hétérostructures, comme nous l'avons déjà remarqué au §2.2. En ce qui concerne les courbes $\rho(B_{||})$ (a), nous observons notre premier désaccord entre données expérimentales et données numériques. En effet, les données expérimentales montrent, non pas une saturation comme dans les Si-MOSFETs, mais un fort changement de comportement aux champs de polarisation, mesurés indépendamment via l'analyse d'oscillations Shubnikov de Haas (§2.4.1). Or, nos données numériques de champ de polarisation B_p (points rouges) sont loin de coïncider avec ces mesures expérimentales (traits bleus). Nous en déduisons donc, ayant confiance dans nos calculs numériques, qu'il manque un ingrédient dans notre modèle pour rendre compte des données expérimentales de champ de polarisation, ou de façon équivalente de susceptibilité de spin χ , dans les hétérostructures GaAs. Cet ingrédient pourrait bien être l'épaisseur du gaz 2D [271], sachant que les puits quantiques formés dans les hétérostructures GaAs sont bien plus épais que ceux formés dans les Si-MOSFETs. S. De Palo *et al* ont d'ailleurs montré dans [179], par des calculs Monte Carlo Quantique similaires aux nôtres, que la prise en compte de l'épaisseur de l'échantillon GaAs dans le calcul des interactions coulombiennes permet de retrouver les données expérimentales de susceptibilité de spin. Ils ont également trouvé que l'effet de l'épaisseur est négligeable dans les hétérostructures AlAs, plus « fines » (voir aussi [275]), ce qui signifie que nos données Monte Carlo devraient être en accord avec les données expérimentales de susceptibilité de spin dans ces matériaux. Bien sûr, il serait aussi intéressant de prendre en compte l'effet orbital induit par l'épaisseur de ces échantillons.

Finalement, on retiendra que l'énergie typique impliquée dans les comportements métalliques semble être aussi l'énergie de polarisation dans les hétérostructures GaAs (figure (b)). Cependant, d'autres effets s'ajoutent dans ces échantillons, par rapport aux Si-MOSFETs, ce qui rend plus complexe leur étude.

7.2.3 Conclusion partielle : contraintes sur les possibles mécanismes responsables des comportements métalliques

Suite aux résultats obtenus aux précédents paragraphes, nous aboutissons aux deux conclusions essentielles suivantes, la seconde étant une conséquence de la première :

- l'échelle d'énergie impliquée dans les comportements métalliques est l'énergie de polarisation du gaz 2D (i).
- dans la « phase métallique », le système non-polarisé conduit beaucoup mieux le courant que le système polarisé (ii).

La première conclusion (i) a été établie en calculant numériquement l'énergie de polarisation E_p du gaz 2D à partir de notre modèle « minimal » prenant en compte la répulsion coulombienne, le spin, l'éventuelle double dégénérescence de vallées et le désordre de manière non perturbative (§3). Sans paramètre ajustable, nous trouvons un très bon accord quantitatif entre nos données numériques E_p et l'énergie caractéristique qui contrôle les comportements métalliques. Précisons que ce résultat a été établi sans ambiguïté dans les Si-MOSFETs (§7.2.1) mais reste à être confirmé dans les hétérostructures GaAs (§7.2.2). En particulier, nous avons réussi à identifier comme la température de polarisation⁶, la « température de cross-over » des courbes $\rho(T)$ (telle qu'elle est nommée dans [8]), et ce sans avoir besoin de rajouter un quelconque ingrédient extrinsèque à notre modèle. Il est important de comprendre que dans ce résultat, outre le spin, la répulsion coulombienne joue un rôle essentiel puisque E_p dépend fortement de r_s (voir les figures 7.4(a) et 7.4(d)). La double dégénérescence de vallées est aussi très importante pour rendre compte des données dans les Si-MOSFETs car elle diminue E_p d'un facteur 2. En revanche, le désordre apporte seulement de petites corrections à E_p , de l'ordre de 10 – 30%, pour les échantillons considérés dans notre étude. Par ailleurs, une des conséquences du résultat (i) est que les modèles non-contrôlés par l'énergie de polarisation sont à exclure. C'est le cas par exemple du modèle de percolation de Y. Meir⁷ [159] bien que nous ne nions pas que des phénomènes de percolation puissent jouer un rôle à la « transition métal-isolant » dans les hétérostructures GaAs (§2.6.4). C'est le cas également du modèle de B. Spivak [258] discuté au §2.6.2. De même, nous pensons que tous les modèles cherchant à expliquer les comportements métalliques par l'existence d'ingrédients extrinsèques (comme celle d'un désordre dépendant de la température ou du champ magnétique, voir §2.6.3) sont peu pertinents puisque notre modèle minimal suffit pour rendre compte des principales caractéristiques expérimentales. La suite de ce chapitre le confirmera. Enfin, une autre conséquence de (i) est que les comportements métalliques sont dûs à un effet de température finie, impliquant des « hautes » énergies, ce que nous avons déjà fortement soupçonné au §2.3.4. Par conséquent, la question de l'existence d'un vrai métal à température nulle est certes intéressante théoriquement mais dépasse le cadre des expériences. Rappelons d'ailleurs que nous avons montré au chapitre 6 qu'il n'existe en fait probablement pas de métal à température nulle.

La conclusion (ii) est une conséquence immédiate de (i), sachant que la résistivité croît avec la température T et le champ magnétique parallèle B_{\parallel} dans la « phase métallique » : lorsque

⁶Rappelons que cette dénommée température de polarisation est simplement définie par l'équation (7.13). Elle ne correspond en aucun cas à une valeur de température permettant de polariser le système puisqu'en moyenne, la température ne polarise pas.

⁷En effet, dans ce modèle, la polarisation des spins entraîne une augmentation de la conductance (et non pas une diminution) puisque l'énergie de Fermi augmente avec la polarisation, ce qui permet « l'ouverture » des contacts ponctuels quantiques introduits dans le modèle.

l'on augmente T ou B_{\parallel} , on peuple des états polarisés et la résistance augmente. *A priori*, elle est plutôt contre-intuitive puisque sans interaction, la situation est inversée. En effet, lorsque l'on polarise le système sans interaction, le niveau de Fermi E_F augmente et donc la longueur de localisation ξ du système augmente également, conformément à l'équation (5.22). Sans interaction, le système polarisé conduit donc mieux que le système non-polarisé, plus localisé. Ainsi, pour comprendre les comportements métalliques, il suffit de comprendre pourquoi, en présence d'interaction, ces propriétés de localisation s'inversent (voir la figure 7.8). Dans la suite de ce chapitre, nous montrons en utilisant les résultats du chapitre 6 que notre modèle minimal rend compte de cette assertion (ii), en plus de l'assertion (i).

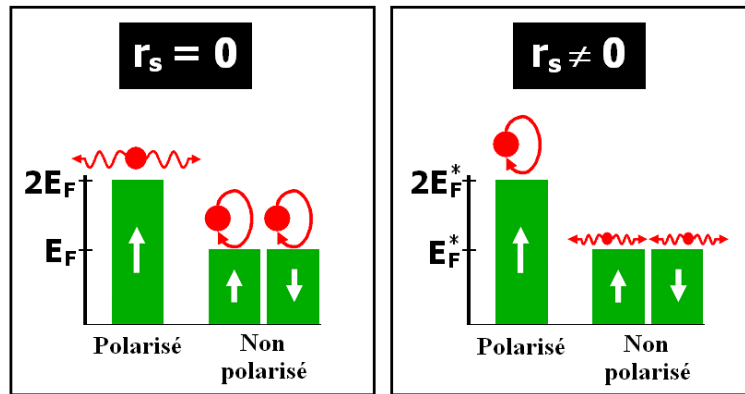


FIG. 7.8 – Schéma illustrant l'origine des comportements métalliques dans les gaz 2D de basse densité. Sans interaction (à gauche), le système polarisé conduit beaucoup mieux que le système non-polarisé alors qu'avec interaction (à droite), cette situation s'inverse. E_F désigne l'énergie de Fermi du système non-polarisé sans interaction et E_F^* celle avec interaction, dans une approche liquide de Fermi.

7.3 Mécanisme proposé : délocalisation par les interactions et dépendance en polarisation

Formulons ici clairement le mécanisme que nous proposons pour expliquer les comportements métalliques à température finie. Dans la suite, nous le justifierons à l'aide de nos résultats Monte Carlo Quantique obtenus à partir de notre modèle minimal (§7.3.1). Puis nous discuterons de sa pertinence quant à la description des données expérimentales (§7.3.2 et §7.3.3). Enfin, nous essaierons de situer notre scénario parmi la multitude d'autres théories proposées (§7.3.4).

Enoncé du mécanisme. Du fait des interactions coulombiennes, le système polarisé en spin devient plus localisé que le système non-polarisé (et donc moins bon conducteur) dans la zone «centrale» du diagramme de phase désordre/interaction. Or, lorsque l'on augmente la température T , on peuple des états de polarisation $p \neq 0$ (avec à la fois des $p > 0$ et des $p < 0$). De même, lorsque l'on applique un champ magnétique B_{\parallel} dans le plan du gaz 2D, on polarise les spins des porteurs. Par conséquent, au centre du diagramme de phase, la résistivité du gaz 2D augmente avec T ou B_{\parallel} pour des valeurs typiques $k_B T \approx g \mu_B B_{\parallel} / 2 \approx E_p$. On observe ainsi un effet métallique en température et une magnétorésistance positive.

7.3.1 Origine du mécanisme

Pour comprendre pourquoi dans la « phase métallique », le système non-polarisé conduit beaucoup mieux le courant que le système polarisé (proposition (ii) du §7.2.3), nous comparons dans la suite les propriétés de localisation des systèmes polarisés et non-polarisés en spin, en utilisant nos données de longueurs de localisation ξ calculées en Monte Carlo Quantique à température nulle aux chapitres 5 et 6.

Inversion par les interactions des propriétés de localisation des systèmes polarisés et non-polarisés

Nous avons tracé sur la figure 7.9, pour quelques valeurs du désordre, les longueurs de localisation des systèmes polarisés (pointillés) et non-polarisés (lignes pleines) en fonction du degré d'interaction r_s . La figure de gauche traite le cas de gaz 2D avec une seule vallée (hétérostructures), pour lesquels les systèmes polarisés et non-polarisés correspondent respectivement aux systèmes 1-C et 2-C dont les longueurs de localisation sont données par les formules (6.1), (6.2), (6.3) et (6.4). La figure de droite traite quant à elle du cas de gaz 2D avec deux vallées dégénérées (Si-MOSFETs). Les systèmes polarisés et non-polarisés sont les systèmes 2-C et 4-C, et leurs longueurs de localisation sont données par les formules (6.3), (6.4), (6.7) et (6.8).

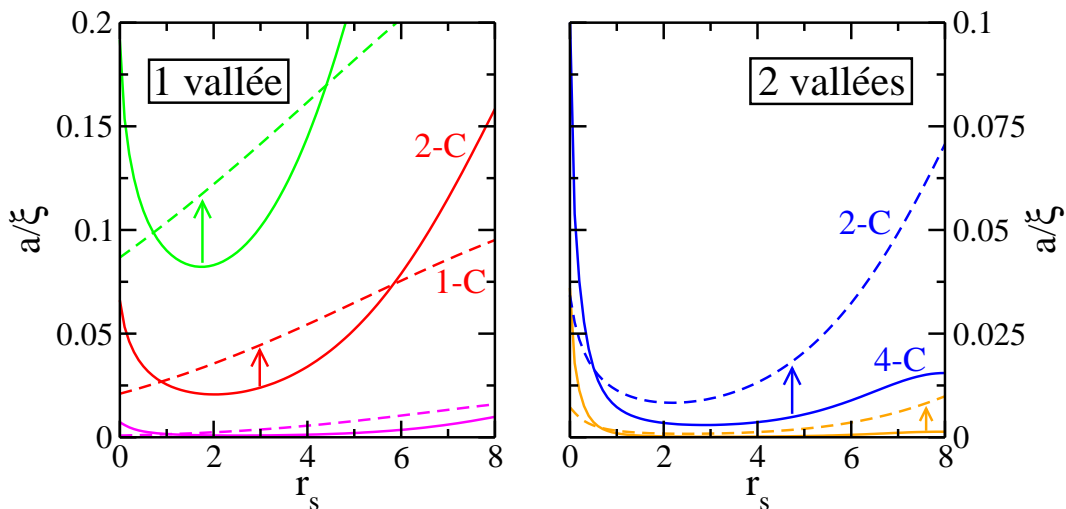


FIG. 7.9 – Comparaison en fonction de r_s des longueurs de localisation inverses a/ξ des systèmes non-polarisés (lignes pleines) et polarisés (lignes en pointillés), avec une vallée (à gauche) ou deux vallées dégénérées (à droite). Chaque couple de droites correspond à une valeur donnée du désordre (de bas en haut, $k_{Fl} = 3.02$, 1.34 et 0.75 à gauche, et $k_{Fl} = 1.51$ et 0.89 à droite, où k_{Fl} est celui du système non-polarisé). Les courbes sont données par les fits (6.1), (6.2), (6.3), (6.4), (6.7) et (6.8). A faible interaction, le système non-polarisé est plus localisé que le système polarisé mais à plus forte interaction, la situation s'inverse. Dans ce cas, le peuplement des états polarisés du système (par la température ou un champ magnétique parallèle) conduit à une localisation des porteurs, comme indiqué par les flèches, et l'on observe alors un comportement métallique de la résistivité.

Sans interaction, on constate sans surprise que le système non-polarisé est toujours plus localisé que le système polarisé. Effectivement, ceci se comprend facilement en remarquant que la longueur de localisation augmente lorsque les électrons gagnent de l'énergie cinétique, si bien que les états excités (en particulier les états polarisés) sont forcément moins localisés que l'état fondamental (non-polarisé). La figure 7.9 montre que cette situation reste vraie à

faible interaction $r_s \lesssim 1$. Expérimentalement, on s'attend à observer dans cette situation une magnétorésistance parallèle négative, puisqu'un champ magnétique parallèle polarise les porteurs et donc délocalise le système qui voit ainsi sa résistance diminuer. De même, on s'attend à un comportement isolant en température, celle-ci peuplant les états excités polarisés.

Le point essentiel de la figure 7.9 est que les interactions électron-électron peuvent inverser ces propriétés de localisation. On aboutit alors à la situation où c'est le système polarisé qui est le plus localisé. Insistons sur le fait que ce résultat, équivalent à la proposition (ii) du §7.2.3, est simplement une conséquence de l'effet conjoint interactions coulombiennes/localisation d'Anderson. La suite du raisonnement découle sans effort : en augmentant la température T ou le champ magnétique parallèle B_{\parallel} , on peuple des états de polarisation non nulle, plus localisés que l'état de polarisation nulle et donc la résistance du système augmente. Ce mécanisme explique l'observation expérimentale d'une magnétorésistance positive et d'un comportement métallique en température. Bien sûr, il n'est pertinent pour expliquer les expériences que si les températures et les champs magnétiques typiques impliqués dans ces deux effets sont de l'ordre de l'énergie de polarisation du système. La section précédente 7.2 montre que c'est bien le cas.

Validité du mécanisme à polarisation intermédiaire

Nous avons comparé pour l'instant les propriétés de localisation des systèmes non-polarisés ($p = 0$) et complètement polarisés⁸ ($p = 1$). Or dans les expériences, l'augmentation continue de la température T ou du champ magnétique parallèle B_{\parallel} conduit à l'occupation d'états excités de polarisation intermédiaire $0 < p < 1$. Ainsi, pour appuyer notre scénario, nous proposons de comparer ici les longueurs de localisation du fondamental non-polarisé (à $T = 0$ et $B_{\parallel} = 0$) et des états partiellement polarisés. Pour ce faire, il est essentiel de remarquer qu'à polarisation intermédiaire $0 < p < 1$, le fondamental du système complet de N particules à $T = 0$ ne vérifie pas la théorie d'échelle à un paramètre. Nous avons établi ce résultat en calculant la fonction d'échelle β de ce système et en montrant qu'elle ne coïncide pas avec la fonction d'échelle universelle de la théorie d'échelle de la localisation (figure non montrée). Ainsi, il n'est pas possible, et cela n'aurait aucun sens, de calculer la longueur de localisation ξ du système de N particules à $0 < p < 1$, telle qu'elle est définie au §5.3.3. En revanche, il est possible de calculer les longueurs de localisation ξ_{\uparrow} et ξ_{\downarrow} des deux sous-systèmes constitués respectivement des N_{\uparrow} particules de spin up et des N_{\downarrow} particules de spin down. Nous avons en effet vérifié, même en présence d'interaction, que ces deux sous-systèmes vérifient la théorie d'échelle. La figure 7.10 présente les résultats $\xi_{\uparrow\downarrow}(p)$ que nous avons obtenus sans interaction (à gauche) et avec interaction (à droite), pour le système 2-C.

Sans interaction, les deux sous-systèmes sont indépendants. Les N_{\uparrow} particules de spin up sont sensibles au désordre $k_F l_{\uparrow} = (1 + p)k_F l/2$ tandis que les N_{\downarrow} particules de spin down sont sensibles au désordre $k_F l_{\downarrow} = (1 - p)k_F l/2$. On s'attend donc à avoir, compte-tenu de la formule (5.23) établie au §5.3.3 :

$$\frac{a}{\xi_{\uparrow\downarrow}}(p, r_s = 0) = \frac{A}{k_F l \sqrt{1 \pm p}} \exp -[Bk_F l(1 \pm p)]. \quad (7.15)$$

Sur la figure 7.10 (en haut à gauche), nous vérifions que nous obtenons effectivement cette

⁸Rappelons que la polarisation est définie par $p = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/N$ et donc que l'on a $-1 \leq p \leq 1$. Pour des raisons de symétrie évidentes $p \rightarrow -p$, nous limitons dans la suite le domaine de polarisation à $0 \leq p \leq 1$. N_{\uparrow} fera donc toujours référence aux particules majoritaires et N_{\downarrow} , aux particules minoritaires.

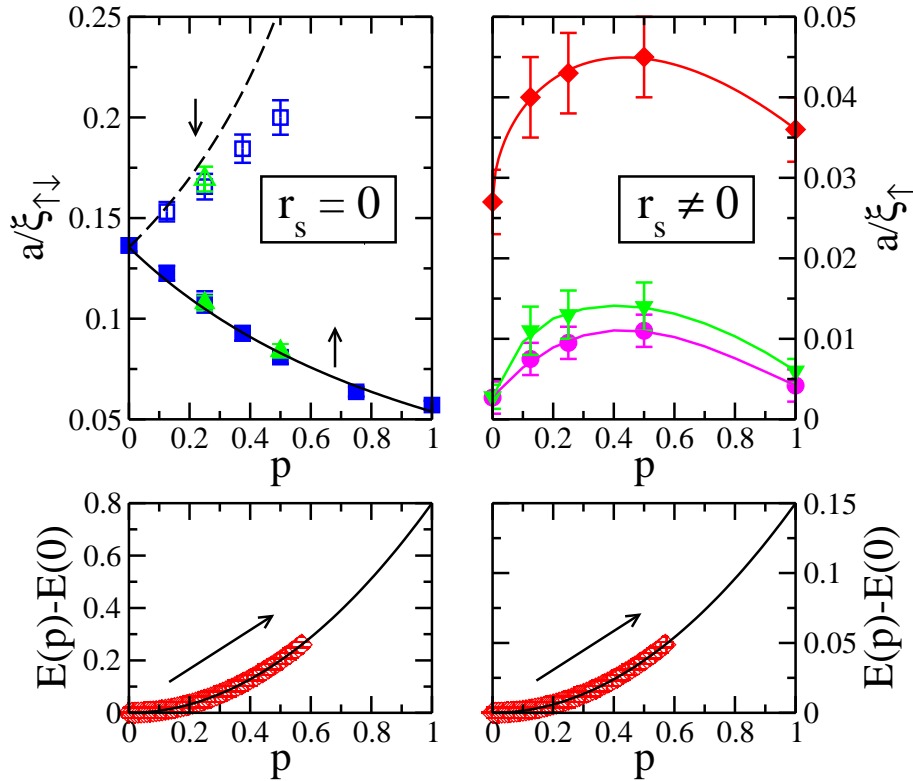


FIG. 7.10 – En haut : dépendance en polarisation p de la longueur de localisation inverse a/ξ_{\uparrow} des particules up majoritaires d'un système 2-C, sans interaction (à gauche) et avec interaction (à droite). À gauche : les symboles correspondent à différentes tailles ($N = 32$ (carrés) et $N = 40$ (triangles)) à $\nu \approx 1/28$, $r_s = 0$ et $k_{Fl} = 0.77$. En plus de $a/\xi_{\uparrow}(p)$ (symboles pleins), on a rajouté la courbe $a/\xi_{\downarrow}(p)$ pour les particules down minoritaires (symboles vides). Les lignes noires donnent la dépendance théorique (7.15). À droite : les symboles correspondent à différents degrés d'interaction et de désordre ($r_s = 2$, $k_{Fl} = 1.78$ (cercles), $r_s = 2$, $k_{Fl} = 1.04$ (diamants) et $r_s = 4$, $k_{Fl} = 1.78$ (triangles)). Les données sont extrapolées à la limite thermodynamique continue et les lignes sont des fits pour guider l'œil. En bas : allure de la dépendance en polarisation p de l'énergie E (en unité de E_F) des systèmes 2-C étudiés en haut. Lorsque la température est augmentée, les états de polarisation intermédiaire (en rouge) se peuplent, comme indiqué par les flèches. Il s'ensuit un effet de délocalisation des particules up majoritaires (à gauche, $r_s = 0$) ou au contraire un effet de localisation (à droite, $r_s \neq 0$).

dépendance (l'accord entre nos données (symboles) et la formule théorique (lignes noires) n'est pas parfait pour les particules de spin down, minoritaires, car de forts effets de taille finie persistent). Ainsi, on trouve qu'en polarisant le système ($p > 0$), les particules de spin up, de plus en plus nombreuses et donc de plus en plus énergétiques, se délocalisent alors que les particules de spin down, de moins en moins nombreuses et donc de moins en moins énergétiques, se localisent. Ce résultat est simplement une généralisation à polarisation intermédiaire de celui trouvé précédemment sur la figure 7.9 à $r_s = 0$. Il n'a rien de surprenant.

En présence d'interaction, la figure 7.10 en haut à droite montre que cette situation s'inverse. Sur cette figure, nous n'avons tracé que la longueur de localisation $\xi_{\uparrow}(p)$ des particules up car nous n'avons pas réussi à approcher la limite thermodynamique pour les particules down. Cela n'a en fait pas beaucoup d'importance car ce sont de toute façon les particules up, majoritaires, qui dominent largement les propriétés de transport du système. Ainsi on trouve sur cette figure, non seulement que l'état entièrement polarisé $p_1 = 1$ est plus localisé

que l'état non-polarisé $p_2 = 0$, avec interaction, mais aussi que cette situation reste vraie à polarisations $p_1 > p_2$ intermédiaires⁹. Ce résultat corrobore et précise le mécanisme formulé précédemment pour expliquer les comportements métalliques : lorsque la température T ou le champ magnétique B_{\parallel} est augmenté, les états excités de polarisation $p > 0$, plus localisés, se peuplent (figure 7.10 du bas) et donc la résistance du système augmente.

L'étape suivante serait de déduire de nos données Monte Carlo à température nulle $\xi_{\uparrow\downarrow}(p)$, des données de conductance $g(n_s, \mu, T, B_{\parallel})$, directement comparables aux données expérimentales. Pour commencer simplement, on pourrait construire un modèle qui prend en compte la température et un éventuel champ magnétique parallèle, dans un poids de Boltzmann $P(p) \propto \exp\left(-\frac{E(p) - g\mu_B B_{\parallel}/2}{k_B T}\right)$ donnant la probabilité de peupler un état de polarisation p . Les particules up ou down d'un état p contribueraient à la conductance totale en apportant leur part $g(p) \propto \exp\left(-\frac{L_{\Phi}(T)}{\xi_{\uparrow\downarrow}(p)}\right)$, où $L_{\Phi}(T)$ est la longueur de cohérence de phase du système qui décroît avec la température. La température aurait ainsi deux effets contradictoires : en peuplant les états polarisés plus localisés, elle diminuerait la conductance du système mais en abaissant la longueur de cohérence de phase, elle l'augmenterait. En voulant concrétiser ce projet, nous nous sommes heurtés à deux difficultés majeures. D'une part, nous n'avons pas réussi à fitter correctement nos données $\xi_{\uparrow\downarrow}(p)$ dans le domaine d'interaction et de désordre des expériences. La raison principale en est le long temps de calcul dépensé pour maîtriser les effets de taille finie et donc la rareté des données. D'autre part, nous n'avons pas trouvé de formule qui donne avec certitude la dépendance $L_{\Phi}(T)$ de la longueur de cohérence de phase avec la température, dans le régime localisé. Cela dit, nous pensons que ce projet mériterait d'être approfondi.

Dans la remarque ci-dessous, nous expliquons comment, en mélangeant les $\xi_{\uparrow\downarrow}(p)$, la température empêche le rescaling à un paramètre des données expérimentales. Ensuite, nous ne parlerons plus des données de longueurs de localisation à polarisation intermédiaire $0 < p < 1$. Nous nous intéresserons seulement à leurs valeurs à $p = 0$ et $p = 1$ car celles-ci contiennent l'essentiel de l'information nécessaire pour discuter du bien-fondé de notre mécanisme.

Remarque : échec apparent de la théorie d'échelle à un paramètre dans les expériences

Selon la théorie d'échelle de la localisation à un paramètre (§1.3.3), toutes les données expérimentales, obtenues pour différentes densités de porteurs, mobilités, températures, etc . . . , doivent pouvoir se rescaler sur une seule et même courbe en utilisant un unique paramètre de scaling. Or dans le cadre du problème de la « transition métal/isolant » à 2D, un tel scaling à un paramètre n'est pas observé ([210], §2.2). Ainsi, certains auteurs ont conclu que la théorie d'échelle de la localisation ne pouvait être valable dans la « phase métallique ». Ils ont alors cherché, par un lourd traitement des données expérimentales, à

⁹Plus précisément, ils semblent que les courbes $a/\xi_{\uparrow}(p)$ aient une forme en « cloche » : elles atteignent leur maximum à $p = 0.5$ avant de décroître jusqu'à la valeur $a/\xi_{\uparrow}(p = 1) > a/\xi_{\uparrow}(p = 0)$. Selon notre mécanisme, cette forme en « cloche » de $a/\xi_{\uparrow}(p)$ implique également une forme en « cloche » des courbes de magnétorésistance $\rho(B_{\parallel})$: elles devraient ainsi atteindre un maximum à $p = 0.5$ avant de décroître puis saturer à $p \geq 1$. Or ce n'est pas cette forme qui est observée expérimentalement (§2.4.1). Ainsi, peut-être que d'autres effets correctifs sont à prendre en compte pour retrouver les données expérimentales. Cela étant dit, nous n'excluons pas que cette forme originale des courbes $a/\xi_{\uparrow}(p)$ soit due à un effet de taille finie en ν (et peut-être aussi dans une moindre mesure en N). Certes, nous avons vérifié que la limite thermodynamique a bien été atteinte en traçant des courbes $a/\xi_{\uparrow}(N)$ et nous avons aussi veillé à extraire la limite continue via des fits linéaires sur nos données $a/\xi_{\uparrow}(\nu)$. Cependant, nous n'avons pas réussi à diminuer davantage nos barres d'erreur indiquées sur la figure 7.10 en haut à droite et manifestement, celles-ci sont encore grandes, comparées à la variation typique des données $a/\xi_{\uparrow}(p)$, qui s'avère extrêmement petite. Nous serions donc prêts à croire qu'en réalité, la longueur de localisation $\xi_{\uparrow}(p)$ croît continûment de $p = 0$ à $p = 1$. Il serait intéressant de regarder ce qu'il en est pour les systèmes 4-C.

faire apparaître un scaling à deux paramètres [18, 126], ce qui les a conduit à soutenir l'existence d'un vrai métal à température nulle, en contradiction avec la théorie d'échelle. En réalité, nous pensons que les données expérimentales ne peuvent être rescalées à l'aide d'un unique paramètre car la température peuple plusieurs états excités de différentes polarisations p . Indépendamment, chaque état p (particules up et down prises séparément) vérifie la théorie d'échelle à un paramètre, le paramètre en question étant la longueur de localisation $\xi_{\uparrow\downarrow}(p)$. En mélangeant ces différents états, la température rend impossible le rescaling à un paramètre des données expérimentales. En résumé, et nous l'avons justifié au chapitre §6, nous pensons que la théorie d'échelle reste valable dans les systèmes bidimensionnels corrélés à température nulle. Elle n'est pas observée dans les expériences uniquement à cause d'un simple effet de température finie.

Rôle de la dégénérescence de vallées

Il est important de souligner le rôle essentiel de la double dégénérescence de vallées qui transparait de la comparaison des parties gauche et droite de la figure 7.9. Comme nous l'avons déjà remarqué au chapitre 6, les interactions délocalisent beaucoup plus fortement le système non-polarisé dans deux vallées (4-C) que le système non-polarisé dans une seule vallée (2-C) et elles localisent le système polarisé dans une vallée (1-C). Il s'ensuit les deux conséquences importantes suivantes :

- A désordre et interaction fixés, l'écart entre les longueurs de localisation des systèmes polarisés et non-polarisés est en général beaucoup plus grand avec double dégénérescence de vallées que sans. Selon notre mécanisme, l'augmentation de la résistance dans la « phase métallique » doit donc être beaucoup plus importante dans les Si-MOSFETs possédant deux vallées dégénérées que dans les hétérostructures GaAs n'en possédant qu'une. C'est effectivement ce qui a été observé dans les expériences (voir §2.2).
- En présence de double dégénérescence de vallées et avec interaction, l'état fondamental (4-C) est complètement délocalisé, pour toute considération pratique, car $a/\xi^{4C} \approx 0$. En revanche, sans cette dégénérescence (2-C), il reste strictement localisé¹⁰. Dans ce cas, la température peut activer des mécanismes de transport par « variable range hopping » (voir la remarque du §1.3.2) qui conduisent à une diminution de la résistance du système. Cet effet s'oppose au mécanisme discuté dans cette présente section puisque selon ce dernier, la température fait croître la résistance en peuplant les états excités plus localisés. Pour traiter entièrement le problème, il faudrait déterminer quel effet l'emporte sur l'autre.

7.3.2 Diagramme de phase numérique désordre/interaction et comparaison au diagramme expérimental

Sur la figure 7.11, nous avons tracé en fonction du désordre $1/\sqrt{k_F l}$ et de l'interaction r_s , la différence $\delta = a/\xi_{NP} - a/\xi_P$ des longueurs de localisation inverses des systèmes non-polarisés (ξ_{NP}) et polarisés (ξ_P). A gauche se trouve le diagramme obtenu avec une vallée ($\delta = a/\xi_{2C} - a/\xi_{1C}$) et à droite, celui obtenu avec deux vallées ($\delta = a/\xi_{4C} - a/\xi_{2C}$). Dans chacun des deux diagrammes, on distingue trois régions :

- la région blanche ($\delta \approx 0$). Dans celle-ci, les longueurs de localisation ξ_P et ξ_{NP} sont toutes les deux extrêmement grandes car le désordre est faible ($k_F l \geq 4$), si bien que δ

¹⁰Peut-être que ceci peut expliquer pourquoi dans [23], les auteurs observent dans des hétérostructures GaAs des comportements métalliques à de très fortes résistivités $\rho \gg h/e^2$ (au lieu de $\rho \lesssim h/e^2$). L'originalité des échantillons utilisés dans ces expériences pourrait aussi avoir son rôle à jouer.

vaut approximativement zéro.

- la région rouge ($\delta > 0$). Elle correspond à la zone faiblement corrélée ($r_s \lesssim 1$) de la figure 7.9 où le système non-polarisé est plus localisé que le système polarisé. Selon le raisonnement développé au cours de cette section, des comportements isolants doivent y être observés expérimentalement.
- la région bleue ($\delta < 0$). Dans celle-ci, les interactions ont inversé les propriétés de localisation des systèmes polarisé et non-polarisés. Cette région correspond, selon notre mécanisme, à la zone du diagramme où des comportements métalliques sont observés expérimentalement.

Nous avons rajouté sur chaque diagramme, deux droites passant par l'origine correspondant à deux échantillons typiques, l'un « sale » (comme dans les années 80), l'autre « propre » (comme dans les expériences de Kravchenko). Rappelons en effet qu'en variant la densité n_s expérimentalement, un échantillon de mobilité μ donnée se déplace sur le diagramme selon une ligne droite passant par l'origine, de pente $1/\eta \propto 1/\sqrt{\mu}$ (voir §1.2.2). Dans la suite, nous établissons le lien entre notre diagramme numérique et les données expérimentales, dans les différentes régions a, b, c, d et A, B, C .

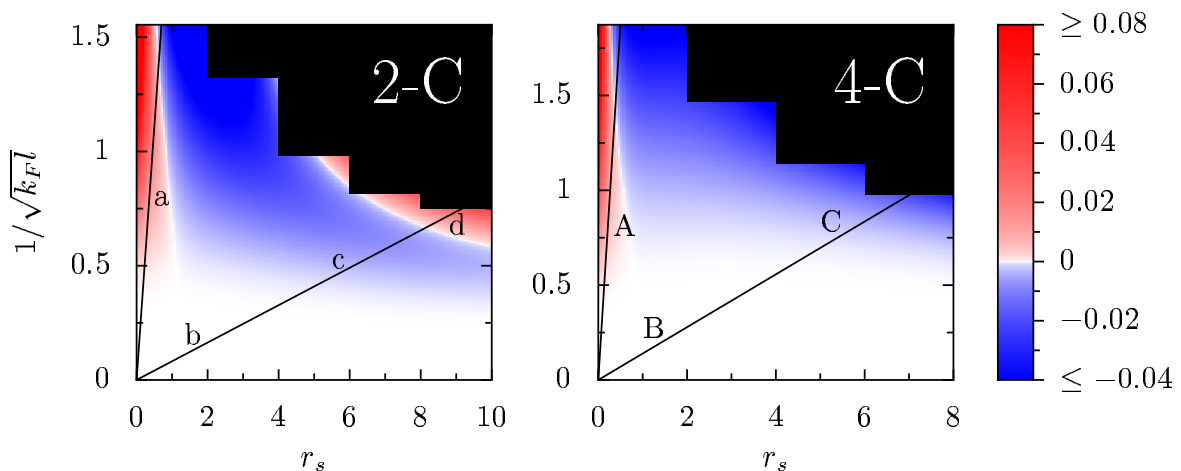


FIG. 7.11 – Diagramme de phase désordre/interaction du système 2-C (à gauche) et 4-C (à droite), obtenu numériquement. On a tracé en code couleur $\delta(r_s, 1/\sqrt{k_F l})$. Dans la zone rouge ($\delta > 0$), le système polarisé est moins localisé que le système non-polarisé et dans la zone bleue ($\delta < 0$), c'est l'inverse. D'après le mécanisme que nous proposons pour expliquer les comportements métalliques expérimentaux, ces deux zones rouge et bleue s'identifient respectivement aux phases isolante et « métallique ». Lorsque l'on varie la densité dans un échantillon expérimental, on se déplace dans le diagramme sur une droite passant par l'origine, en franchissant les zones blanches et/ou rouges et/ou bleues, selon la mobilité de l'échantillon (voir texte). Les rectangles noirs cachent les zones où nous n'avons pas de données.

Discussion du cas 4-C

Nous nous intéressons pour commencer aux systèmes 4-C, correspondant aux Si-MOSFETs, et discutons du diagramme obtenu, région par région.

- La région A (rouge) correspond à l'isolant d'Anderson. Expérimentalement, elle est accessible par des échantillons de mobilité pas trop haute et de densité pas trop basse (typiquement ceux de la génération des années 80 où $\mu \lesssim 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et $n_s \gtrsim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Des comportements isolants y ont effectivement été observés [36, 273], comme en témoigne le diagramme expérimental 2.5.

- La région B (zone blanche à gauche) est atteinte expérimentalement à haute densité. Dans cette région, le désordre et les interactions sont suffisamment faibles pour pouvoir appliquer les théories diagrammatiques qui prédisent de petites corrections quantiques à la localisation faible [145]. Expérimentalement, la résistivité ρ dépend très peu de la température T (sauf à haute température où des phonons apparaissent) comme cela est visible sur les courbes du bas de la figure 7.5 (e). Ceci est en accord avec le fait que l'on trouve $\delta \approx 0$ dans cette région.
- La région C (bleue) correspond à la phase « métallique », où l'on observe la forte dépendance positive $\rho(T)$ qui intrigue tant la communauté depuis plus de quinze ans. Nous attribuons ces comportements métalliques au fait que dans cette région, l'état fondamental est complètement délocalisé (pour toute considération pratique) alors que ses excitations polarisées ne le sont pas. Ainsi en peuplant ces états, la température fait croître fortement la résistance du système. Nous constatons que la région C apparaît à désordre intermédiaire $k_F l \approx 1$ et forte interaction ($r_s \geq 5$ pour la droite considérée), en accord avec les expériences. C'est d'ailleurs pour cela qu'elle n'est accessible que par des échantillons de haute mobilité et basse densité.

Signalons pour finir que la comparaison brutale du diagramme expérimental 2.5 et du diagramme numérique 7.11 montre que les échantillons du diagramme expérimental se situent tous dans la région blanche du diagramme numérique. On pourrait alors penser que nos résultats numériques retranscrivent mal les données expérimentales. En réalité, il faut bien comprendre que les frontières des trois zones de notre diagramme numérique dépendent légèrement du choix du code couleur. De plus, l'estimation par la formule (1.11) des pentes $1/\eta$ des droites représentant les trajectoires des échantillons dans le diagramme expérimental, a été obtenue à partir de la mobilité maximale μ_{peak} et non pas à partir de la mobilité à très haute densité, plus petite. Par exemple, elle donne $\eta = 21$ pour l'échantillon de Kravchenko ([135], figure 2.3 (a)) alors que nous avons pris $\eta = 7$ pour la droite (BC) du diagramme 7.11 et retrouvons ainsi les r_s et $k_F l$ typiques de la « phase métallique » expérimentale. Nous pensons donc finalement que l'accord semi-quantitatif obtenu tel quel, sans paramètre ajustable, entre nos résultats numériques et les données expérimentales, est suffisamment convaincant pour valider le mécanisme que nous proposons comme origine des comportements métalliques dans les Si-MOSFETs.

Discussion du cas 2-C

On s'intéresse à présent au diagramme désordre/interaction des systèmes 2-C (figure 7.11 de gauche). Ceux-ci modélisent, rappelons-le, les hétérostructures (du type GaAs par exemple). Il est inutile de s'attarder sur les régions a et b car elles s'interprètent de la même manière que les régions A et B du diagramme des Si-MOSFETs (4-C). La discussion de la région c est en revanche plus complexe. Nous y trouvons, selon notre mécanisme, une « phase métallique » (bleue) mais il serait présomptueux de l'identifier directement à la « phase métallique » expérimentale. Il existe en effet dans les hétérostructures GaAs plusieurs effets qui s'ajoutent à notre mécanisme et que nous n'avons pas pris en compte. Nous en avons d'ailleurs déjà parlé au cours de ce chapitre : phénomène de percolation (§7.2.3), « variable range hopping » (§7.3.1), effet orbital et correction des interactions coulombiennes dûs à l'épaisseur du gaz 2D (§7.2.2), ... Cela étant dit, nous pensons tout-de-même que notre mécanisme joue un rôle essentiel dans les comportements métalliques des hétérostructures. Il n'est simplement pas le seul et nous ne voudrions pas réduire trop rapidement le problème. Finissons par quelques mots sur la région d que l'on trouve isolante. Sa présence est en accord avec le fait que l'on retrouve expérimentalement un isolant à très basse densité (segments rouges sur la partie

droite du diagramme 2.5). Cependant, nous ne prétendons pas que la phase isolante de très basse densité soit due au fait que l'on ait $\delta > 0$ dans cette région. La question de la nature de cette phase isolante fortement corrélée est un autre problème que nous n'avons pas cherché à traiter dans cette thèse.

7.3.3 Points d'accord semi-quantitatifs entre notre scénario et les données expérimentales

Comme nous venons de le voir, le mécanisme que nous proposons pour expliquer les comportements métalliques rend compte des principales caractéristiques des expériences à un niveau semi-quantitatif. Ici, nous résumons les différents points d'accord obtenus sans paramètre ajustable entre nos résultats numériques et les données expérimentales :

- nos résultats numériques (diagramme 7.11) rendent compte du fait que les comportements métalliques sont observés dans des échantillons de haute mobilité et à basse densité, c'est-à-dire au centre du diagramme de phase, à des désordres $k_F l \approx 1$ et interaction $r_s \approx 5 - 10$ intermédiaires (§2.3.1). C'est d'ailleurs parce que $k_F l \approx 1$ dans cette région, que la résistance est de l'ordre de h/e^2 dans la « phase métallique ».
- dans le même ordre d'idée, nos résultats montrent l'importance du désordre dans l'observation de comportements métalliques. Les échantillons trop sales (comme ceux des années 80) sont nécessairement isolants, dans la zone a ou A rouge du diagramme 7.11. Au contraire, les échantillons trop propres, dans la zone blanche, ne peuvent montrer qu'une très faible dépendance $\rho(T)$.
- notre scénario rend compte de la similarité des courbes expérimentales $\rho(T)$ et $\rho(B_{\parallel})$ dans la « phase métallique ». En effet, selon notre mécanisme, la température T et le champ B_{\parallel} ont tous deux pour effet de peupler les états polarisés, plus localisés que l'état fondamental non polarisé, et donc d'augmenter la résistivité du gaz 2D.
- de même, notre mécanisme explique pourquoi les comportements métalliques sont supprimés par l'application d'un champ magnétique parallèle (§2.4.1).
- nos résultats mettent en exergue le rôle essentiel de la dégénérescence de vallées (7.3.1) et rendent ainsi compte du fait que les Si-MOSFETs, possédant deux vallées dégénérées, montrent des comportements métalliques beaucoup plus forts que les autres matériaux.
- enfin, notre scénario rend compte de l'énergie caractéristique impliquée dans les comportements métalliques, à savoir l'énergie de polarisation (§7.2). Autrement dit, nos résultats numériques capturent parfaitement la température typique à laquelle la résistance augmente dans la « phase métallique ». De même pour le champ magnétique parallèle.

7.3.4 Positionnement de notre scénario par rapport aux autres théories proposées

Nous avons vu au §2.6 que plusieurs modèles théoriques, plus ou moins fondés, ont été proposés dans la littérature pour expliquer les comportements métalliques. Face à cette multitude de travaux, nous ne voudrions surtout pas que notre scénario soit considéré comme une simple tentative d'explication supplémentaire, participant plus à la confusion des esprits qu'à leur clarification. Nous pensons au contraire que nos travaux se détachent des précédents car nous avons réussi, à partir d'un modèle minimal non contesté et d'une méthode de ré-

solution (quasi-)exacte, à rendre compte des principales caractéristiques expérimentales, sans paramètre ajustable. Ainsi nous pensons avoir élucidé la question de l'existence de métaux à deux dimensions et celle de l'origine des comportements métalliques expérimentaux, même si nous ne nions pas que d'autres effets correctifs seraient à prendre en compte pour rendre nos travaux plus quantitatifs, en particulier dans les hétérostructures.

Pour aider le lecteur dans sa compréhension et ainsi lui permettre de se faire sa propre opinion, il nous paraît intéressant de comparer nos travaux aux précédents modèles proposés. Au §7.2.3, nous avons déjà montré que certains d'entre eux peuvent être exclus, n'étant pas contrôlés par le spin et l'énergie de polarisation. Nous n'en rediscuterons pas ici. L'idée est plutôt de situer notre scénario par rapport aux deux principales écoles théoriques, l'une « conservatrice » (représentée entre autres par B. L. Altshuler, voir §2.6.3), l'autre « réformatrice » (représentée entre autres par A. M. Finkelstein, voir §2.6.1). En ce qui concerne la première école, nous sommes d'accord sur le fait qu'il n'existe pas de vrai métal à deux dimensions et donc que les comportements métalliques observés dans les expériences doivent disparaître à très basse température. De plus, comme B. L. Altshuler *et al* dans [8], nous pensons que les comportements métalliques impliquent les états excités de « haute énergie » (en l'occurrence les états polarisés) et donc que l'habituel paradigme selon lequel seuls les porteurs proches du niveau de Fermi participent au transport, ne s'applique pas dans ces expériences. En revanche, cette première école attribue les comportements métalliques à des ingrédients extrinsèques (dépendance en température du désordre par exemple) sans se soucier des interactions, alors qu'au contraire, nous pensons que les interactions entre électrons sont l'une des clés du problème. En ce qui concerne la seconde école, nous partageons avec elle la conviction du rôle essentiel de la répulsion coulombienne et de la dégénérescence de vallées. Plus précisément, nous sommes d'accord sur le fait que les comportements métalliques sont dûs à un effet de délocalisation par les interactions. Cependant, nous ne sommes pas d'accord quant à la question de l'existence d'un vrai métal à température nulle (et de la divergence de la susceptibilité de spin à la transition). En effet, contrairement à nous, cette seconde école défend le plus souvent l'existence d'un métal à 2D stabilisé par les interactions (et d'une divergence de la susceptibilité de spin) en s'appuyant sur des traitements diagrammatiques complexes, plus ou moins contrôlés et limités au régime diffusif. Dans [220], les auteurs ont même montré proprement, pour un nombre infini de vallées, une instabilité du liquide de Fermi à interaction arbitrairement faible. Nous ne sommes pas en mesure de confirmer ou infirmer ce résultat. Nous pouvons simplement affirmer que même s'il est théoriquement intéressant, il n'a aucune valeur prédictive quant aux systèmes expérimentaux.

Conclusion et perspectives

Principaux résultats

La problématique qui a servi de fil directeur à ce travail de thèse est celle de l'effet conjoint des interactions coulombiennes et du désordre dans le gaz bidimensionnel d'électrons. Au terme de ce manuscrit et plus généralement de ces années de recherche doctorale, nous pensons avoir contribué à trois principales avancées dans ce domaine.

D'une part, sur un plan technique, nous avons réussi à mettre au point une méthode numérique permettant d'étudier la localisation d'Anderson en présence d'interaction et même, plus précisément, de calculer la longueur de localisation du système corrélé à la limite thermodynamique. A notre connaissance, aucune méthode analytique ou numérique ne le permettait jusqu'à ce jour. Il est vrai que le problème nécessite un traitement non perturbatif du désordre, et si possible aussi des interactions, ce qui veut dire concrètement pour le théoricien, une multitude de diagrammes de Feynman à resommer à tout ordre . . . chose qui devient vite infaisable en pratique. Numériquement, le problème avait déjà été exploré mais le plus souvent, il n'était pas possible d'atteindre la limite thermodynamique (§2.7). La méthode que nous proposons dans ce manuscrit et que nous avons publiée dans [89], tire sa force de la concomitance de quelques idées simples. Premièrement, nous utilisons un algorithme Monte Carlo Quantique permettant de résoudre exactement (ou presque, disons autant que faire se peut) le problème à N -corps à température nulle pour un nombre de particules assez élevé, de l'ordre de quelques dizaines. Deuxièmement, cet algorithme est implémenté sur un réseau discret, ce qui nous permet d'incorporer facilement le désordre, avant d'extrapoler nos données à la limite continue. Troisièmement, nous avons réussi à trouver en la conductance de Thouless une bonne quantité de mesure de la localisation. Et quatrièmement, nous sommes parvenus à traiter judicieusement nos données pour en extraire la limite thermodynamique en faisant de la théorie d'échelle. Mais à vrai dire, si nous avons réussi à mettre au point une telle méthode, c'est aussi parce que nous sommes arrivés au « bon moment ». Au laboratoire, le problème de l'effet conjoint désordre/interaction à 2D avait déjà été exploré, aussi bien du point de vue numérique qu'expérimental, par notamment J.-L. Pichard, X. Waintal, M. Sanquer, D. L'Hôte et R. Leturcq [148, 191, 190, 288]. Plus récemment, H. Falakshahi pendant sa thèse s'était attaqué aux méthodes Monte Carlo Quantique pour l'étude de la fusion du cristal de Wigner et avait ainsi mis en place de solides bases sur lesquelles construire plus tard notre méthode [80]. Il est évident que nous avons beaucoup bénéficié de ces travaux, pour savoir quel chemin emprunter et quels pièges éviter. Enfin, pour finir sur une considération beaucoup plus terre à terre, c'est aussi grâce à la puissance de nos ordinateurs actuels et aux moyens de calcul mis à disposition au laboratoire, que notre projet a pu se concrétiser : tellement coûteuse en temps de calcul, notre méthode n'aurait sans doute pas été exploitable il y a vingt ans.

De cette méthode, nous avons d'abord tiré profit en étudiant théoriquement les effets des

interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson à température nulle. Sans interaction, le phénomène de localisation d'Anderson à deux dimensions est déjà bien trop complexe pour être décrit analytiquement mais à défaut d'une théorie complète, les opinions s'accordent sur un point : elle vérifie à température nulle une loi d'échelle prédisant l'absence d'état métallique à deux dimensions [1]. Rapidement, P. W. Anderson a soulevé l'importance d'incorporer les interactions électron-électron dans le problème [86] mais ce n'était pas chose facile et analytiquement, faute de mieux, seul l'effet des interactions dans le régime diffusif faiblement désordonné a pu être étudié. Grâce à notre méthode numérique, nous avons réussi à montrer dans une large gamme de désordre et d'interaction, que les interactions coulombiennes n'ont pas d'effets « dramatiques » sur la localisation et que le gaz 2D désordonné est en fait un bon liquide de Fermi : en particulier, la théorie d'échelle de la localisation reste valable et l'on a toujours un isolant à température nulle. Nos résultats ont également montré l'importance du degré de dégénérescence de spin et de vallée, en accord avec les théories perturbatives de B. L. Altshuler, C. Castellani et A. M. Finkelstein [6, 47, 84]. En effet, lorsque les électrons n'ont pas de degré de liberté interne, les interactions renforcent la localisation mais dès que l'on ajoute un degré de liberté de spin ou de vallée, l'effet s'oppose et les interactions deviennent finalement bénéfiques au transport en délocalisant (partiellement) les fonctions d'onde électroniques. Si l'on ajoute encore un degré de liberté interne, l'effet de délocalisation s'amplifie et la longueur de localisation du système devient plus grande que la plus grande longueur de cohérence de phase accessible dans les expériences, si bien que le système peut être considéré comme métallique, au sens pratique. Cet effet de localisation ou de délocalisation par les interactions se comprend dans une approche Hartree-Fock comme le résultat d'une compétition entre les contributions de Fock (localisant le système) et d'Hartree (le délocalisant, d'autant plus que le niveau de dégénérescence est élevé).

Enfin, tout au long de cette thèse, un souci constant a été accordé à la compréhension des données expérimentales et sur ce point, nous pensons aussi avoir apporté notre pierre à l'édifice. L'objectif était de comprendre les comportements métalliques, en apparence contradiction avec la théorie d'échelle de la localisation, que S. V. Kravchenko et bien d'autres avaient observé dans divers dispositifs bidimensionnels de haute mobilité et basse densité [2]. Sur le plan théorique, de nombreuses propositions avaient été avancées pour expliquer ces étranges comportements, sans atteindre de consensus, si bien que le premier défi à relever pour tout physicien intrigué par ce sujet, était sans doute de parvenir à faire le tri dans ce fouillis inextricable de publications. Par ce travail de thèse, nous pensons avoir fortement contribué à la simplification du problème. Contrairement aux autres travaux théoriques, nous avons développé une approche dénuée d'*a priori* partant du modèle le plus simple possible, contenant uniquement les ingrédients connus comme étant présents et indispensables dans les échantillons en question (désordre, interaction, spin, vallée), pour ensuite en calculer le fondamental quasi-exact à température nulle. Puis nous avons soigneusement comparé nos données numériques aux données expérimentales, sans préjuger. De cette manière, nous avons réussi à isoler l'énergie caractéristique impliquée dans les comportements métalliques et à l'identifier comme étant l'énergie de polarisation du système, apportée dans les expériences soit sous forme d'énergie thermique, soit sous forme d'énergie Zeeman. Nous en avons déduit que les comportements métalliques ne correspondent pas une propriété de température nulle du gaz 2D mais au contraire impliquent les états excités polarisés. Par conséquent, ils doivent disparaître à température nulle, conformément à la théorie d'échelle, ce qui signifie que si l'on était capable d'abaisser davantage la température dans les expériences, la résistivité devrait

finalement diverger. Remarquons qu'en niant l'existence d'un métal à deux dimensions, ce résultat rejoint les positions conservatrices de B. L. Altshuler mais s'oppose aux prédictions exotiques de S. V. Kravchenko ou A. M. Finkelstein, si bien qu'il risque d'être mal accueilli par une partie la communauté . . . Une autre conséquence de l'identification de cette énergie est que les comportements métalliques sont dûs au fait que le système polarisé en spin conduit beaucoup moins bien le courant que le système non-polarisé. Dans cette thèse, nous avons montré que l'effet des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson conduit à une telle situation et le scénario qui s'est finalement dégagé de nos résultats a permis de rendre en compte, sans paramètre ajustable et à un niveau semi-quantitatif, des principales caractéristiques expérimentales. Nous pensons donc avoir trouvé l'origine des comportements métalliques qui intriguent depuis si longtemps la communauté.

Ce qui reste ouvert

Finissons par quelques idées de projets que l'on aurait volontiers abordés s'il fallait prolonger ce travail de thèse. Espérons qu'elles suscitent la curiosité du lecteur et lui donne l'envie de poursuivre lui-même sur ces thématiques.

- Il serait intéressant de comprendre l'origine physique des effets de localisation ou de délocalisation par les interactions. Pour la sonder, on pourrait dans un premier temps résoudre notre modèle dans le cadre de l'approximation Hartree-Fock puis comparer les résultats obtenus à nos résultats Monte Carlo exacts, de façon à déterminer si tous les effets des interactions coulombiennes sur la localisation sont contenus dans cette approximation. Si tel n'est pas le cas, on pourrait poursuivre la démarche en faisant de la théorie de la fonctionnelle de la densité, souvent plus efficace pour traiter les interactions que l'approximation Hartree-Fock.
- Dans le même ordre d'idée, il serait fort profitable d'arriver à comprendre en profondeur les calculs diagrammatiques de B. L. Altshuler, C. Castellani ou encore A. M. Finkelstein. L'objectif à long terme serait de parvenir à calculer l'effet des interactions non pas sur le terme du premier ordre en $1/k_F l$ mais sur celui du second ordre, puis du troisième etc . . . Analytiquement, nous n'avons aucun espoir d'en être capable mais numériquement, cela pourrait être possible grâce à la méthode Monte Carlo Diagrammatique, récemment mise au point par N. V. Prokof'ev et B. V. Svistunov [202] et utilisée avec succès sur le modèle de Hubbard [131]. L'outil pourrait alors être extrêmement puissant, notamment pour comprendre jusqu'à quel ordre en désordre et en interaction il est nécessaire d'aller pour retrouver les résultats Monte Carlo (quasi-)exactes.
- Modifier la forme explicite de l'interaction électron-électron pourrait aussi être instructif. Par exemple, remplacer l'interaction coulombienne par une interaction écrantée à courte portée permettrait de vérifier ou non, notre idée selon laquelle c'est surtout la composante à courte portée de l'interaction qui importe dans les effets de localisation ou de délocalisation. En outre, on décrirait plus finement la physique des Si-MOSFETs puisque dans ces dispositifs, l'interaction est écrantée.
- Il serait aussi tentant d'augmenter le degré de dégénérescence de vallées (limité à deux dans cette thèse). *A priori*, l'effet de délocalisation par les interactions devrait grandement s'amplifier, jusqu'à peut-être permettre la stabilisation d'un état métallique, comme le prédisent A. Punnoose et A. M. Finkelstein [220]. Toutefois, en pratique, une telle étude est pour l'instant irréalisable car il faudrait considérer des systèmes trop grands par rapport à la puissance actuelle des ordinateurs et au temps de calcul disponible.

- En ce qui concerne la compréhension des données expérimentales, il serait intéressant de poursuivre notre tentative d'introduire la température dans notre modèle numérique. L'idée serait de vérifier que la diminution de la longueur de cohérence de phase avec la température, entraînant une baisse de la résistivité du système, n'est pas suffisante pour contrecarrer l'augmentation de la résistivité due au peuplement d'états excités polarisés, plus localisés. On pourrait aussi estimer le rôle des phonons, celui de l'épaisseur du gaz 2D ou encore celui de l'interaction spin-orbite, qui ne sont pas déterminants pour expliquer les comportements métalliques mais qui peuvent toutefois apporter de petites corrections à la résistivité. Si l'on parvenait ainsi à reproduire numériquement les données expérimentales de résistivité en fonction de la température ou du champ magnétique parallèle, notre scénario paraîtrait sans doute plus convaincant aux yeux de la communauté.
- Au lieu de faire systématiquement un moyennage des quantités calculées sur le potentiel aléatoire, on pourrait s'intéresser aux propriétés individuelles des échantillons, un par un, à configuration de désordre donnée, avant de poursuivre ensuite par une étude statistique. Cela permettrait peut-être de comprendre certains résultats de M. Baenninger *et al*, publiés dans [23], en particulier le caractère « métallique » ou isolant des échantillons qu'ils étudient, particulièrement petits, de taille mésoscopique.
- Dans cette thèse, on a regardé ce que devient l'isolant d'Anderson lorsque l'on branche les interactions mais l'on pourrait aussi adopter la démarche inverse en regardant ce que devient le cristal de Wigner lorsque l'on branche le désordre. On pourrait ainsi compléter le diagramme de phase désordre/interaction et peut-être aussi en apprendre sur la phase isolante.
- On pourrait aussi varier la dimensionalité du système. Théoriquement, il devrait être possible d'effectuer exactement la même étude que celle entreprise dans cette thèse, cette fois en dimension trois, mais en pratique, on risquerait d'être rapidement limité par le temps de calcul et les effets de taille finie. En revanche, en dimension une, l'étude ne devrait pas poser de problème et on devrait probablement trouver une rupture de la théorie d'échelle puisqu'à 1D, le gaz d'électrons n'est pas un liquide de Fermi mais un liquide de Luttinger. Cela étant dit, il faudrait voir s'il y a un quelconque intérêt à utiliser cette méthode par rapport aux autres méthodes exactes à une dimension, comme la méthode DMRG.
- L'étude du cas unidimensionnel aurait son intérêt pour comprendre ce qui est caché derrière l'approximation Fixed Node : en particulier, il faudrait éclaircir le lien entre la conductance de Thouless exacte, positive ou négative, et celle calculée en Monte Carlo dans cette approximation, toujours positive (voir §5.2.3). Pour cela, on pourrait résoudre le problème 1D de manière exacte en Monte Carlo (il n'y a pas de problème signe à 1D) et comparer les résultats à ceux obtenus en Monte Carlo Fixed Node. On verrait alors, du moins à 1D, si l'approximation ne fait que prendre la valeur absolue de la conductance de Thouless ou si son action est plus subtile.
- Enfin, on envisage dans un avenir proche d'exploiter nos codes Monte Carlo pour calculer des fonctions de réponse. L'objectif serait d'une part de sonder la structure du gaz 2D corrélé via l'étude des effets des interactions sur la fonction de réponse densité-densité et d'autre part d'étudier l'effet des corrélations sur la susceptibilité de spin, sachant que celle-ci détermine l'ordre magnétique des spins nucléaires associés aux électrons du gaz 2D (projet entamé avec X. Waintal et P. Simon [251]). Paradoxalement, nos premiers résultats semblent montrer que l'exploitation du théorème fluctuation-dissipation par le RQMC (§4.4.3) n'est en fait pas profitable à ce types de calculs car une action retorse de l'approximation Fixed Node est alors introduite.

Bibliographie

- [1] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization : absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 42 :673, 1979.
- [2] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik. Metallic behavior and related phenomena in two dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 73 :251, 2001.
- [3] A. A. Abrikosov and I. M. Khalatnikov. The theory of a Fermi liquid (the properties of liquid ^3He at low temperatures). *Reports Progr. Phys.*, 22 :329, 1959.
- [4] E. Akkermans and G. Montambaux. *Physique mésoscopique des électrons et des photons*. EDP Sciences, CNRS Editions, 2004.
- [5] G. Allison, E. A. Galaktionov, A. K. Savchenko, S. S. Safonov, M. M. Fogler, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie. Thermodynamic density of states of two-dimensional GaAs systems near the apparent metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett*, 96 :216407, 2006.
- [6] B. L. Altshuler and A. G. Aronov. *Electron-electron interactions in disordered systems*. Elsevier, 1985.
- [7] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, and P. A. Lee. Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 44 :1288, 1980.
- [8] B. L. Altshuler, G. W. Martin, D. L. Maslov, V. M. Pudalov, A. Prinz, G. Brunthaler, and G. Bauer. Weak-localization type description of conduction in the "anomalous" metallic state. *cond-mat/0008005*, 2000.
- [9] B. L. Altshuler and D. L. Maslov. Altshuler and Maslov reply. *Phys. Rev. Lett*, 83 :2092, 1999.
- [10] B. L. Altshuler and D. L. Maslov. Theory of metal-insulator transitions in gated semiconductors. *Phys. Rev. Lett*, 82 :145, 1999.
- [11] B. L. Altshuler, D. L. Maslov, and V. M. Pudalov. Metal-insulator transition in 2D : Anderson localization by temperature-dependent disorder. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 218 :193, 2000.
- [12] B. L. Altshuler, D. L. Maslov, and V. M. Pudalov. Metal-insulator transition in 2D : resistance in the critical region. *Physica E*, 9 :209, 2001.
- [13] J. B. Anderson. Quantum chemistry by random walk. *J. Chem. Phys.*, 65 :4121, 1976.
- [14] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109 :1492, 1958.
- [15] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54 :437, 1982.

- [16] A. F. Andreev and I. M. Lifshitz. Quantum theory of defects in crystals. *Sov. Phys. JETP*, 29 :1107, 1969.
- [17] E. Y. Andrei, G. Deville, D. C. Glattli, F. I. B. Williams, E. Paris, and B. Etienne. Observation of a magnetically induced Wigner solid. *Phys. Rev. Lett*, 60 :2765, 1988.
- [18] S. Anissimova, S. V. Kravchenko, A. Punnoose, A. M. Finkel'stein, and T. M. Klapwijk. Flow diagram of the metal insulator transition in two dimensions. *Nature Phys.*, 3 :707, 2007.
- [19] D. N. Aristov. Indirect RKKY interaction in any dimensionality. *Phys. Rev. B*, 55 :8064, 1997.
- [20] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, 1976.
- [21] C. Attacalite, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, and G. B. Bachelet. Correlation energy and spin polarization in the 2D electron gas. *Phys. Rev. Lett*, 88 :256601, 2002.
- [22] M. Baenninger, A. Ghosh, M. Pepper, H.E. Beere, I. Farrer, P. Atkinson, and D. A. Ritchie. Local transport in a disorder-stabilized correlated insulating phase. *Phys. Rev. B*, 72 :241311, 2005.
- [23] M. Baenninger, A. Ghosh, M. Pepper, H.E. Beere, I. Farrer, and D. A. Ritchie. Low-temperature collapse of electron localization in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 100 :016805, 2008.
- [24] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108 :1175, 1957.
- [25] S. Baroni and S. Moroni. Reptation Quantum Monte Carlo : a method for unbiased ground-state averages and imaginary-time correlations. *Phys. Rev. Lett*, 82 :4745, 1999.
- [26] D. M. Basko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler. Metal-insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states. *Annals of Physics*, 321 :1126, 2006.
- [27] D. M. Basko, I. L. Aleiner, and B. L. Altshuler. On the problem of many-body localization. *cond-mat/0602510*, 2006.
- [28] E. Batke and C. W. Tu. Effective mass of a space-charge layer on GaAs in a parallel magnetic field. *Phys. Rev. B*, 34 :3027, 1986.
- [29] M. S. Becker, A. A. Broyles, and T. Dunn. A parametric approach to the ground-state energy of an electron gas. *Phys. Rev.*, 175 :224, 1968.
- [30] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick. Possible triplet superconductivity in MOSFETs. *Phys. Rev. B*, 58 :8214, 1998.
- [31] G. Bergmann. Weak localization in thin films. *Phys. Rep.*, 107 :1, 1984.
- [32] R. Berkovits and J. W. Kantelhardt. Parallel magnetoconductance of interacting electrons in a two-dimensional disordered system. *Phys. Rev. B*, 65 :125308, 2002.
- [33] R. Berkovits, J. W. Kantelhardt, Y. Avishai, S. Havlin, and A. Bunde. No indications of metal-insulator transition for systems of interacting electrons in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 63 :085102, 2001.
- [34] B. Bernu, F. Delyon, M. Duneau, and M. Holzmann. Metal-insulator transition in the Hartree-Fock phase diagram of the fully polarized homogeneous electron gas in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 78 :245110, 2008.

- [35] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect. Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder. *Nature*, 453 :891, 2008.
- [36] D. J. Bishop, D. C. Tsui, and R. C. Dynes. Nonmetallic conduction in electron inversion layers at low temperatures. *Phys. Rev. Lett*, 44 :1153, 1980.
- [37] S. Bogdanovich and D. Popovic. Onset of glassy dynamics in a two-dimensional electron system in silicon. *Phys. Rev. Lett*, 88 :236401, 2002.
- [38] L. Bonsall and A. A. Maradudin. Some static and dynamical properties of a two-dimensional Wigner crystal. *Phys. Rev. B*, 15 :1959, 1977.
- [39] D. Braun, E. Hofstetter, A. MacKinnon, and G. Montambaux. Level curvatures and conductances : a numerical study of the Thouless relation. *Phys. Rev. B*, 55 :7557, 1997.
- [40] G. Brunthaler, A. Prinz, G. Bauer, and V.M. Pudalov. Exclusion of quantum coherence as the origin of the 2D metallic state in high-mobility silicon inversion layers. *Phys. Rev. Lett*, 87 :096802, 2001.
- [41] G. Brunthaler, A. Prinz, G. Bauer, V.M. Pudalov, E.M. Dizhur, J. Jaroszynski, P. Glod, and T. Dietl. Weak localization in the 2D metallic regime of Si-MOS. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 8 :579, 1999.
- [42] H. Böttger and V. Bryskin. *Hopping conduction in solids*. Akademie Verlag, Berlin, 1985.
- [43] M. C. Buonaura and S. Sorella. Numerical study of the two-dimensional Heisenberg model using a Green function Monte Carlo technique with a fixed number of walkers. *Phys. Rev. B*, 57 :11446, 1998.
- [44] I.S. Burmistrov and N.M. Chtchelkatchev. Electronic properties in a two-dimensional disordered electron liquid : spin-valley interplay. *Phys. Rev. B*, 77 :195319, 2008.
- [45] A. Camjayi, K. Haule, V. Dobrosavljevic, and G. Kotliar. Coulomb correlations and the Wigner-Mott transition. *Nature Physics*, 4 :932, 2008.
- [46] C. Castellani, C. Di Castro, and P. A. Lee. Metallic phase and metal-insulator transition in two-dimensional electronic systems. *Phys. Rev. B*, 57 :R9381, 1998.
- [47] C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee, and M. Ma. Interaction-driven metal-insulator transitions in disordered fermion systems. *Phys. Rev. B*, 30 :527, 1984.
- [48] C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee, M. Ma, S. Sorella, and E. Tabet. Spin fluctuations in disordered interacting electrons. *Phys. Rev. B*, 30 :1596, 1984.
- [49] D. Ceperley. Path-integrals in the theory of condensed Helium. *Rev. Mod. Phys.*, 67 :279, 1995.
- [50] D. Ceperley, G. V. Chester, and M. H. Kalos. Monte Carlo simulation of a many-fermion study. *Phys. Rev. B*, 16 :3081, 1997.
- [51] D. M. Ceperley and B. J. Alder. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys. Rev. Lett*, 45 :566, 1980.
- [52] P. B. Chakraborty, P. J. Denteneer, and R. T. Scalettar. Determinant quantum Monte Carlo study of the screening of the one-body potential near a metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 75 :125117, 2007.

- [53] S. Chakravarty, S. Kivelson, C. Nayak, and K. Voelker. Wigner glass, spin liquids and the metal-insulator transition. *Phil. Mag. B*, 79 :859, 1999.
- [54] S. Chakravarty, L. Yin, and E. Abrahams. Interactions and scaling in a disordered two-dimensional metal. *Phys. Rev. B*, 58 :R559, 1998.
- [55] K. M. Cham and R. G. Wheeler. Temperature-dependent resistivities in Silicon inversion layers at low temperatures. *Phys. Rev. Lett*, 44 :1472, 1980.
- [56] M. V. Chermisin. Thermal correction to resistivity of 2D electron (hole) gas in low-temperature measurements at $B = 0$. *cond-mat/0203387*, 2002.
- [57] S. T. Chui and B. Tanatar. Impurity effect on the two-dimensional electron fluid-solid transition in zero fluid. *Phys. Rev. Lett*, 74 :458, 1995.
- [58] P. T. Coleridge, A. Sachrajda, and P. Zawadzki. Weak localization, interaction effects and the metallic phase in p-SiGe. *Phys. Rev. B*, 65 :125328, 2002.
- [59] P. T. Coleridge, R. L. Williams, Y. Feng, and P. Zawadzki. Metal-insulator transition at $B = 0$ in p-type SiGe. *Phys. Rev. B*, 56 :R12764, 1997.
- [60] R. Dalichaouch, J. P. Armstrong, S. Schultz, P. M. Platzman, and S. L. McCal. Microwave localization by two-dimensional random scattering. *Nature*, 354 :53, 1991.
- [61] D. Dalidovich and V. Dobrosavljevic. Landau theory of the Fermi-liquid to electron-glass transition. *Phys. Rev. B*, 66 :081107, 2002.
- [62] P. J. H. Denteneer and R. T. Scalettar. Interacting electrons in a two-dimensional disordered environment : effect of a Zeeman magnetic field. *Phys. Rev. Lett*, 90 :246401, 2003.
- [63] P. J. H. Denteneer, R. T. Scalettar, and N. Trivedi. Conducting phase in the two-dimensional disordered Hubbard model. *Phys. Rev. Lett*, 83 :4610, 1999.
- [64] D. L. Diedrich and J. B. Anderson. An accurate Quantum Monte Carlo calculation of the barrier height for the reaction $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$. *Science*, 258 :786, 1992.
- [65] V. Dobrosavljevic, E. Abrahams, E. Miranda, and S. Chakravarty. Scaling theory of two-dimensional metal-insulator transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :455, 1997.
- [66] G. J. Dolan and D. D. Osheroff. Nonmetallic conduction in thin metal films at low temperatures. *Phys. Rev. Lett*, 43 :721, 1979.
- [67] V. T. Dolgoplov and A. Gold. Magnetoresistance of a two-dimensional electron gas in a parallel magnetic field. *JETP Lett.*, 71 :27, 2000.
- [68] V. T. Dolgoplov, G. V. Kravchenko, A. A. Shashkin, and S. V. Kravchenko. Properties of electron insulating phase in Si inversion-layers at low-temperatures. *JETP Lett.*, 55 :733, 1992.
- [69] N. D Drummond and R. J. Needs. Phase diagram of the low-density two-dimensional homogeneous electron gas. *Phys. Rev. Lett*, 102 :126402, 2009.
- [70] S. C. Dultz and H. W. Jiang. Thermodynamic signature of a two-dimensional metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4689, 2000.
- [71] S. C. Dultz, H. W. Jiang, and W. J. Schaff. Absence of floating delocalized states in a two-dimensional hole gas. *Phys. Rev. B*, 58 :R7532, 1998.
- [72] J. T. Edwards and D. J. Thouless. Numerical studies of localization in disordered systems. *J. Phys. C*, 5 :807, 1972.

- [73] A. L. Efros. Coulomb gap in disordered systems. *J. Phys. C*, 9 :2021, 1976.
- [74] A. L. Efros. Metal-non-metal transition in heterostructures with thick spacer layers. *Solid State Commun.*, 70 :253, 1989.
- [75] A. L. Efros and B. I. Shklovskii. Coulomb gap and low-temperature conductivity of disordered systems. *J. Phys. C*, 8 :L49, 1975.
- [76] J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Compressibility of the two-dimensional electron gas : measurements of the zero-field exchange energy and fractional quantum Hall gap. *Phys. Rev. B*, 50 :1760, 1994.
- [77] C. Mora et X. Waintal. Variational wave functions and their overlap with the ground state. *Phys. Rev. Lett*, 99 :030403, 2007.
- [78] P. P. Ewald. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 64 :253, 1921.
- [79] Jr. F. A. Stevens and M. A. Pokrant. Variational calculation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. A*, 8 :990, 1973.
- [80] H. Falakshahi. *Etude de la fusion quantique du cristal de Wigner*. PhD thesis, Université Paris XI, 2004.
- [81] H. Falakshahi and X. Waintal. Hybrid phase at the quantum melting of the Wigner crystal. *Phys. Rev. Lett*, 94 :046801, 2005.
- [82] F. F. Fang and P. J. Stiles. Effects of a tilted magnetic field on a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev.*, 174 :823, 1968.
- [83] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications*, volume 1. Wiley, New York, 1968.
- [84] A. M. Finkel'stein. Influence of Coulomb interaction on the properties of disordered metals. *Sov. Phys. JETP*, 57 :97, 1983.
- [85] A. M. Finkel'stein. Weak localization and Coulomb interaction in disordered systems. *Z. Phys. B*, 56 :189, 1984.
- [86] L. Fleishman and P. W. Anderson. Interactions and the Anderson transition. *Phys. Rev. B*, 21 :2366, 1980.
- [87] R. Fletcher, V. M. Pudalov, A. D. B. Radcliffe, and C. Possanzini. Critical behavior of thermopower and conductivity at the metal-insulator transition in high-mobility Si-MOSFET's. *cond-mat/0002436*, 2000.
- [88] G. Fleury and X. Waintal. Many-body localization study in low-density electron gases : Do metals exist in two dimensions? *Phys. Rev. Lett*, 101 :226803, 2008.
- [89] G. Fleury and X. Waintal. A numerical finite size scaling approach to many-body localization. *Phys. Rev. Lett*, 100 :076602, 2008.
- [90] G. Fleury and X. Waintal. The energy scale behind the metallic behaviors in low-density Si-MOSFETs. *cond-mat/09023171*, 2009.
- [91] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R.J. Needs, and G. Rajagopal. Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Rev. Mod. Phys.*, 73 :33, 2001.
- [92] E. Fradkin and S. A. Kivelson. Liquid-crystal phases of quantum Hall systems. *Phys. Rev. B*, 59 :8065, 1999.

- [93] R. M. Fye, M. J. Martins, D. J. Scalapino, J. Wagner, and W. Hanke. Drude weight, optical conductivity and flux properties of one-dimensional Hubbard rings. *Phys. Rev. B*, 44 :6909, 1991.
- [94] X. P. A. Gao, A. P. Mills Jr., A. P. Ramirez, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Weak-localization-like temperature-dependent conductivity of a dilute two-dimensional hole gas in a parallel magnetic field. *Phys. Rev. Lett*, 89 :016801, 2002.
- [95] G. Giuliani and G. Vignale. *Quantum theory of the electron liquid*. Cambridge University Press, 2005.
- [96] T. Gokmen, M. Padmanabhan, O. Gunawan, Y.P. Shkolnikov, K. Vakili, E.P. De Poortere, and M. Shayegan. Parallel magnetic field tuning of valley splitting in AlAs two-dimensional electrons. *Phys. Rev. B*, 78 :233306, 2008.
- [97] A. Gold and V. T. Dolgoplov. Temperature dependence of the conductivity for the two-dimensional electron gas : analytical results for low temperatures. *Phys. Rev. B*, 33 :1076, 1986.
- [98] A. M. Goldman and N. Markovic. Superconductor-insulator transitions in the two-dimensional limit. *Physics Today*, 51 :39, 1998.
- [99] L. P. Gor'kov, A. I. Larkin, and D. E. Khmel'nitskii. Particle conductivity in a two-dimensional random potential. *JETP Lett.*, 30 :248, 1979.
- [100] R. C. Grimm and R. G. Storer. Monte-Carlo solution of Schrödinger's equation. *J. Comput. Phys.*, 7 :134, 1971.
- [101] O. Gunawan, T. Gokmen, K. Vakili, M. Padmanabhan, E. P. De Poortere, and M. Shayegan. Spin-valley phase diagram of the two-dimensional metal-insulator transition. *cond-mat/0609493*, 2006.
- [102] O. Gunawan, Y. P. Shkolnikov, K. Vakili, T. Gokmen, E. P. De Poortere, and M. Shayegan. Valley susceptibility of an interacting two-dimensional electron system. *Phys. Rev. Lett*, 97 :186404, 2006.
- [103] A. R. Hamilton, M. Y. Simmons, M. Pepper, E. H. Linfield, and D. A. Ritchie. Metallic behavior in dilute two-dimensional hole systems. *Phys. Rev. Lett*, 87 :126802, 2001.
- [104] A. R. Hamilton, M. Y. Simmons, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose, and D. A. Ritchie. Reentrant insulator-metal-insulator transition at $B = 0$ in a two-dimensional hole gas. *Phys. Rev. Lett*, 82 :1542, 1999.
- [105] Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C. C. Li, D. C. Tsui, and H. Shtrikman. The metalliclike conductivity of a two-dimensional hole system. *Phys. Rev. Lett*, 80 :1288, 1998.
- [106] Y. Hanein, N. Nenadovic, D. Shahar, Hadas Shtrikman, J. Yoon, C. C. Li, and D. C. Tsui. Linking insulator-to-metal transitions at zero and finite magnetic fields. *Nature*, 400 :735, 1999.
- [107] Y. Hanein, D. Shahar, J. Yoon, C. C. Li, D. C. Tsui, and H. Shtrikman. Observation of the metal-insulator transition in two-dimensional n-type GaAs. *Phys. Rev. B*, 58 :R13338, 1998.
- [108] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57 :97, 1970.

- [109] S. He and X. C. Xie. New liquid phase and metal-insulator transition in Si MOSFETs. *Phys. Rev. Lett*, 80 :3324, 1998.
- [110] D. Heidarian and N. Trivedi. Inhomogeneous metallic phase in a disordered Mott insulator in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 93 :126401, 2004.
- [111] P. Henseler, J. Kroha, and B. Shapiro. Self-consistent study of Anderson localization in the Anderson-Hubbard model in two and three dimensions. *Phys. Rev. B*, 78 :235116, 2008.
- [112] J. H. Hetherington. Observations on the statistical iteration of matrices. *Phys. Rev. A*, 30 :2713, 1984.
- [113] S. Hikami, A. Larkin, and Y. Nagaoka. Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two-dimensional random systems. *Prog. Theor. Phys.*, 63 :707, 1980.
- [114] H. Hu, A. Strybulevych, J. H. Page, S. E. Skipetrov, and B. A. van Tiggelen. Localization of ultrasound in a three-dimensional elastic network. *Nature Physics*, 4 :945, 2008.
- [115] J. Huang, J. S. Xia, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Disappearance of metal-like behavior in GaAs two-dimensional holes below 30 mK. *Phys. Rev. Lett*, 98 :226801, 2008.
- [116] S. Ilani, A. Yacoby, D. Mahalu, and H. Shtrikman. Unexpected behavior of the local compressibility near the $B = 0$ metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett*, 84 :3133, 2000.
- [117] S. Ilani, A. Yacoby, D. Mahalu, and H. Shtrikman. Microscopic structure of the metal-insulator transition in two dimensions. *Science*, 292 :1354, 2001.
- [118] J. Jaroszynski, D. Popovic, and T. M. Klapwijk. Universal behavior of the resistance noise across the metal-insulator transition in silicon inversion layers. *Phys. Rev. Lett*, 89 :276401, 2002.
- [119] A. P. Mills Jr., A. P. Ramirez, X. P. A. Gao, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and S. H. Simon. Suppression of weak localization effects in low-density metallic 2D holes. *cond-mat/0101020*, 2001.
- [120] T. Kato. On the eigenfunctions of many-particle systems in quantum mechanics. *Commun. Pure Appl. Math.*, 10 :151, 1957.
- [121] G. Katomeris, F. Selva, and J-L. Pichard. Andreev-Lifshitz supersolid revisited for a few electrons on a square lattice. i. *Eur. Phys. J. B*, 31 :401, 2003.
- [122] F. W. Van Keuls, H. Mathur, H. W. Jiang, and A. J. Dahm. Localization scaling relation in two dimensions : Comparison with experiment. *Phys. Rev. B*, 56 :13263, 1997.
- [123] S. I. Khondaker, I. S. Shlimak, J. T. Nicholls, M. Pepper, and D. A. Ritchie. Two-dimensional hopping conductivity in a δ -doped GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterostructure. *Phys. Rev. B*, 59 :4580, 1999.
- [124] T. M. Klapwijk and S. Das Sarma. A few electrons per ion scenario for the $B = 0$ metal-insulator transition in two dimensions. *Solid State Commun.*, 110 :581, 1999.
- [125] N. N. Klimov, D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, H. Kojima, and M. E. Gershenson. Interaction effects in conductivity of a two-valley electron system in high-mobility Si inversion layers. *cond-mat/08092750*, 2008.

- [126] D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov. Metal-insulator transition in 2D : experimental test of the two-parameter scaling. *Phys. Rev. Lett*, 100 :046405, 2008.
- [127] K. Kobayashi, B. Lee, and N. Trivedi. Conductivity and spin susceptibility for the disordered 2D Hubbard model. *cond-mat/0807.3372*, 2008.
- [128] W. Kohn. Theory of the insulating state. *Phys. Rev.*, 133 :A171, 1964.
- [129] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C*, 6 :1181, 1973.
- [130] R. Kotlyar and S. Das Sarma. Disorder and interaction in 2D : exact diagonalization study of the Anderson-Hubbard-Mott model. *Phys. Rev. Lett*, 86 :2388, 2001.
- [131] E. Kozik, K. Van Houcke, E. Gull, L. Pollet, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer. Diagrammatic Monte Carlo for the Hubbard model. *cond-mat/0907.0863*, 2009.
- [132] B. Kramer and A. Mackinnon. Localization : theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, 56 :1469, 1993.
- [133] S. V. Kravchenko and T. M. Klapwijk. Metallic low-temperature resistivity in a 2D electron system over an extended temperature range. *Phys. Rev. Lett*, 84 :2909, 2000.
- [134] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio. Possible metal-insulator transition at $B = 0$ in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 50 :8039, 1994.
- [135] S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio. Scaling of an anomalous metal-insulator transition in a two-dimensional system in Silicon at $B = 0$. *Phys. Rev. B*, 51 :7038, 1995.
- [136] S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik. Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems. *Rep. Prog. Phys.*, 67 :1, 2004.
- [137] S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik, and D. Simonian. Comment on «theory of metal-insulator transitions in gated semiconductors». *Phys. Rev. Lett*, 83 :2091, 1999.
- [138] S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, A. D. Kent, and V. M. Pudalov. Effect of a tilted magnetic field on the anomalous $H=0$ conducting phase in high-mobility Si-MOSFETs. *Phys. Rev. B*, 58 :3553, 1998.
- [139] S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, W. E. Mason, and J. E. Furneaux. Electric field scaling at a $B = 0$ metal-insulator transition in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 77 :4938, 1996.
- [140] K. Lai, W. Pan, D. C. Tsui, S. A. Lyon, M. Mühlberger, and F. Schäffler. Two-dimensional metal-insulator transition and in-plane magnetoresistance in a high-mobility strained Si quantum well. *Phys. Rev. B*, 72 :081313, 2005.
- [141] J. Lam, M. D'Iorio, D. Brown, and H. Lafontaine. Scaling and the metal-insulator transition in Si/SiGe quantum wells. *Phys. Rev. B*, 56 :R12741, 1997.
- [142] P. K. Lam and S. M. Girvin. Liquid-solid transition and the fractional quantum-hall effect. *Phys. Rev. B*, 30 :473, 1984.
- [143] L. D. Landau. The theory of a Fermi liquid. *Sov. Phys. JETP*, 3 :920, 1957.
- [144] L. D. Landau. On the theory of the Fermi liquid. *Sov. Phys. JETP*, 8 :70, 1958.

- [145] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, 57 :287, 1985.
- [146] A. J. Leggett. *Dephasing and non-dephasing collisions in nanostructures*. Granular Nanoelectronics, Plenum Press, New York, 1991.
- [147] R. Leturcq. *Etude expérimentale de la transition métal-isolant en dimension deux*. PhD thesis, Université Paris XI, 2002.
- [148] R. Leturcq, D. L'Hote, R. Tourbot, C. J. Mellor, and M. Henini. Resistance noise scaling in a dilute two-dimensional hole system in GaAs. *Phys. Rev. Lett*, 90 :076402, 2003.
- [149] K. P. Li, D. Popovic, and S. Washburn. Conductance fluctuations near the two-dimensional metal-insulator transition. *Physica B : Cond. Mat.*, 249-251 :504, 1998.
- [150] I. M. Lifschitz, S. A. Gredeskul, and L. A. Pastur. *Introduction to the theory of disordered systems*. Wiley, New-York, 1988.
- [151] D. Lilliehöök and J. E. Furneaux. Scaling limits for the two-dimensional metal-insulator transition at $B = 0$ in Si-MOSFETs. *Phys. Rev. B*, 66 :165328, 2002.
- [152] M. P. Lilly, J. L. Reno, J. A. Simmons, I. B. Spielman, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, K. W. West, E. H. Hwang, and S. Das Sarma. Resistivity of dilute 2D electrons in an undoped GaAs heterostructure. *Phys. Rev. Lett*, 90 :056806, 2003.
- [153] A. MacKinnon. The conductivity of the one-dimensional disordered Anderson model : a new numerical method. *J. Phys. C*, 13 :L1031, 1980.
- [154] A. MacKinnon and B. Kramer. One-parameter scaling of localization length and conductance in disordered systems. *Phys. Rev. Lett*, 47 :1546, 1981.
- [155] A. MacKinnon and B. Kramer. The scaling theory of electrons in disordered solids : additional numerical results. *Z. Phys. B.*, 53 :1, 1983.
- [156] M. J. Manfra, E. H. Hwang, S. Das Sarma, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and A. M. Sergent. Transport and percolation in a low-density high-mobility two-dimensional hole system. *Phys. Rev. Lett*, 99 :236402, 2007.
- [157] M. Marchi, S. De Palo, S. Moroni, and G. Senatore. Correlation energy and spin susceptibility of a two-valley two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 80 :035103, 2009.
- [158] W. Mason, S. V. Kravchenko, G. E. Bowker, and J. E. Furneaux. Experimental evidence for a coulomb gap in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 52 :7857, 1995.
- [159] Y. Meir. Percolation-type description of the metal-insulator transition in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 83 :3506, 1999.
- [160] Y. Meir. From the zero-field metal-insulator transition in two dimensions to the quantum Hall transition : a percolation-effective-medium theory. *Phys. Rev. B*, 63 :073108, 2001.
- [161] K. M. Mertes, D. Simonian, M. P. Sarachik, S. V. Kravchenko, and T. M. Klapwijk. Response to parallel magnetic field of a dilute two-dimensional electron system across the metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 60 :R5093, 1999.
- [162] K. M. Mertes, H. Zheng, S. A. Vitkalov, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk. Temperature dependence of the resistivity of a dilute two-dimensional electron system in high parallel magnetic field. *Phys. Rev. B*, 63 :041101, 2001.
- [163] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 :1087, 1953.

- [164] A. P. Jr. Mills, A. P. Ramirez, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Nonmonotonic temperature-dependent resistance in low density 2D hole gases. *Phys. Rev. Lett*, 83 :2805, 1999.
- [165] N. F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proc. Phys. Soc. London, Ser. A*, 62 :416, 1949.
- [166] N. F. Mott. *Metal Insulator transitions*. Taylor and Francis, 1990.
- [167] N. F. Mott and E. A. Davis. *Electronic processes in non-crystalline materials*. Oxford, Clarendon, 1979. Seconde édition.
- [168] S. S. Murzin, S. I. Dorozhkin, G. Landwehr, and A. C. Gossard. Effect of hole-hole scattering on the conductivity of the two-component 2D hole gas in GaAs/(AlGa)As heterostructures. *JETP Lett.*, 67 :113, 1998.
- [169] D. R. Nelson and B. I. Halperin. Dislocation-mediated melting in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 19 :2457, 1979.
- [170] Z. A. Nemeth and J-L. Pichard. Ground state of partially melted Wigner molecule. *Europhys. Lett.*, 58 :744, 2002.
- [171] Z. A. Nemeth and J-L. Pichard. Andreev-Lifshitz supersolid revisited for a few electrons on a square lattice. ii. *Eur. Phys. J. B*, 33 :87, 2003.
- [172] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford University Press, 1999.
- [173] J. A. Nixon and J. H. Davies. Potential fluctuations in heterostructure devices. *Phys. Rev. B*, 41 :7929, 1999.
- [174] H. Noh, M. P. Lilly, D. C. Tsui, J. A. Simmons, E. H. Hwang, S. Das Sarma, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Interaction corrections to two-dimensional hole transport in the large- r_s limit. *Phys. Rev. B*, 68 :165308, 2003.
- [175] P. Nozières. *Interacting Fermi systems*. Benjamin, New York, 1964.
- [176] V. Oganesyan, S. A. Kivelson, and E. Fradkin. Quantum theory of a nematic Fermi fluid. *Phys. Rev. B*, 64 :195109, 2001.
- [177] T. Okamoto, K. Hosoya, S. Kawaji, and A. Yagi. Spin degree of freedom in a two-dimensional electron liquid. *Phys. Rev. Lett*, 82 :3875, 1999.
- [178] Tohru Okamoto, Mitsuaki Ooya, Kunio Hosoya, and Shinji Kawaji. Spin polarization and metallic behavior in a Silicon two-dimensional electron system. *Phys. Rev. B*, 69 :41202, 2004.
- [179] S. De Palo, M. Botti, S. Moroni, and G. Senatore. Effects of thickness on the spin susceptibility of the two dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett*, 94 :226405, 2005.
- [180] S. Pankov and V. Dobrosavljevic. Self-doping instability of the Wigner-Mott insulator. *Phys. Rev. B*, 77 :085104, 2008.
- [181] S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, H. C. Manoharan, M. Shayegan, and R. Winkler. The effect of spin-splitting on the metallic behavior of a two-dimensional system. *Science*, 283 :2056, 1999.
- [182] S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, M. Shayegan, and R. Winkler. Anisotropic magnetoresistance of two-dimensional holes in GaAs. *Phys. Rev. Lett*, 84 :5592, 2000.

- [183] S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, M. Shayegan, and R. Winkler. Spin-splitting in GaAs 2D holes. *Physica E*, 9 :31, 2001.
- [184] S. J. Papadakis and M. Shayegan. Apparent metallic behavior at $B = 0$ of a two-dimensional electron system in AlAs. *Phys. Rev. B*, 57 :R15068, 1998.
- [185] P. Papon, J. Leblond, P. H. E. Meijer, and S. L. Schnur. *The physics of phase transitions : concepts and applications*. Springer, Seconde édition, 2006.
- [186] R. G. Parr and W. Yang. *Density-functional theory of atoms and molecules*. Oxford University, New York, 1989.
- [187] A. A. Pastor and V. Dobrosavljevic. Melting of the electron glass. *Phys. Rev. Lett*, 83 :4642, 1999.
- [188] P. Phillips. Deconstruction of the trap model for the new conducting state in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 64 :113202, 1999.
- [189] P. Phillips, Y. Wan, I. Martin, S. Knysh, and D. Dalidovich. Superconductivity in a two-dimensional electron gas. *Nature*, 395 :253, 1998.
- [190] J.-L. Pichard, M. Sanquer, K. Slevin, and P. Debray. Broken symmetries and localization lengths in Anderson insulators : theory and experiment. *Phys. Rev. Lett*, 65 :1812, 1990.
- [191] J.-L. Pichard and G. Sarma. Finite size scaling approach to Anderson localisation. *J. Phys. C*, 14 :L127, 1981.
- [192] J.-L. Pichard and G. Sarma. Finite-size scaling approach to Anderson localisation. ii. quantitative analysis and new results. *J. Phys. C*, 14 :L617, 1981.
- [193] C. Pierleoni and D. M. Ceperley. Computational methods in coupled electron-ion Monte Carlo simulations. *ChemPhysChem*, 6 :1872, 2005.
- [194] D. Pines and P. Nozières. *The theory of quantum liquids*, volume I. Benjamin, New York, 1966.
- [195] L. P. Pitaevskii. *Sov. Phys. JETP*, 10 :1267, 1960.
- [196] E. L. Pollock and D. M. Ceperley. Path-integral computation of superfluid densities. *Phys. Rev. B*, 36 :8343, 1987.
- [197] D. Popovic, A. B. Fowler, and S. Washburn. Metal-insulator transition in two dimensions : effects of disorder and magnetic field. *Phys. Rev. Lett*, 79 :1543, 1997.
- [198] D. Popovic, A. B. Fowler, and S. Washburn. Metal-insulator transition in a low-mobility two-dimensional electron system. *Physica B : Cond. Mat.*, 249-251 :701, 1998.
- [199] D. Popovic and S. Washburn. Mesoscopic behavior near a two-dimensional metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 56 :R10048, 1997.
- [200] W. H. Press, W. T. Vetterling, S. A. Teukolsky, and B. P. Flannery. *Numerical recipes in C : the art of scientific computing (2nd edition)*. Cambridge University Press, 1992.
- [201] A. Prinz, V. M. Pudalov, G. Brunthaler, and G. Bauer. Metal-insulator transition in Si-MOS structures. *Superlattices and Microstructures*, 27 :301, 2000.
- [202] N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov. Bold diagrammatic Monte Carlo : a generic sign-problem tolerant technique for polaron models and possibly interacting many-body problems. *Phys. Rev. B*, 77 :125101, 2008.

- [203] Y. Y. Proskuryakov, A. K. Savchenko, S. S. Safonov, M. Pepper, M.Y. Simmons, and D.A. Ritchie. Fermi-liquid behaviour of the low-density 2D hole gas in GaAs/AlGaAs heterostructure at large values of r_s . *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4895, 2001.
- [204] Y.Y. Proskuryakov, A.K. Savchenko, S.S. Safonov, M. Pepper, M.Y. Simmons, and D.A. Ritchie. Hole-hole interaction effect in the conductance of the two-dimensional hole gas in the ballistic regime. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :076406, 2002.
- [205] O. Prus, Y. Yaish, M. Reznikov, U. Sivan, and V. Pudalov. Thermodynamic spin magnetization of strongly correlated two-dimensional electrons in a Silicon inversion layer. *Phys. Rev. B*, 67 :205407, 2003.
- [206] V. M. Pudalov. Unconventional metallic state in a two-dimensional system with broken inversion symmetry. *JETP Lett.*, 66 :175, 1997.
- [207] V. M. Pudalov. Metallic conduction, apparent metal-insulator transition and related phenomena in two-dimensional electron liquid. *cond-mat/0405315*, 2004.
- [208] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Instability of the two-dimensional metallic phase to parallel magnetic field. *JETP Lett.*, 65 :932, 1997.
- [209] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Breakdown of the anomalous two-dimensional metallic phase in a parallel magnetic field. *Physica B : Cond. Mat.*, 249-251 :697, 1998.
- [210] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Lack of universal one-parameter scaling in the two-dimensional metallic regime. *JETP Lett.*, 68 :442, 1998.
- [211] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Metal-insulator transition in two dimensions. *Physica E*, 3 :79, 1998.
- [212] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Maximum metallic conductivity in Si-MOS structures. *Phys. Rev. B*, 60 :R2154, 1999.
- [213] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Effect of the in-plane magnetic field on conduction of the Si-inversion layer : magnetic field driven disorder. *cond-mat/0103087*, 2001.
- [214] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Weak anisotropy and disorder dependence of the in-plane magnetoresistance in high mobility (100) Si-inversion layers. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :076401, 2002.
- [215] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, and H. Kojima. On the electron-electron interactions in two dimensions. *cond-mat/0401396*, 2004.
- [216] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Interaction effects in conductivity of Si inversion layers at intermediate temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :126403, 2003.
- [217] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, N. Butch, E. M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Low-density spin susceptibility and effective mass of mobile electrons in Si inversion layers. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :196404, 2002.
- [218] V. M. Pudalov, A. Punnoose, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer. Valley splitting in Si-inversion layers at low magnetic fields. *cond-mat/0104347*, 2001.
- [219] A. Punnoose and A. M. Finkel'stein. Dilute electron gas near the metal-insulator transition : role of valleys in Silicon inversion layers. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :016802, 2002.

- [220] A. Punnoose and A. M. Finkel'stein. Metal-insulator transition in disordered two-dimensional electron systems. *Science*, 310 :289, 2005.
- [221] F. Rapisarda and G. Senatore. Diffusion Monte Carlo study of electrons in two-dimensional layers. *Aust. J. Phys.*, 49 :161, 1996.
- [222] P. Reynolds, D. M. Ceperley, B. J. Alder, and W. A. Lester. Fixed-node quantum Monte Carlo for molecules. *J. Chem. Phys.*, 77 :5593, 1982.
- [223] E. Ribeiro, R. D. Jäggi, T. Heinzel, K. Ensslin, G. Medeiros-Ribeiro, and P. M. Petroff. Metal-insulator transition in a disordered two-dimensional electron gas in GaAs-AlGaAs at zero magnetic field. *Phys. Rev. Lett*, 82 :996, 1999.
- [224] U. Rössler, F. Malcher, and G. Lommer. Spin-splitting in structured semiconductors. volume 87, page 376, Wurzburg, Fed. Rep. Germany, 1988. Proceedings of the international conference.
- [225] M. P. Sarachik. Disorder-dependence of the critical density in two-dimensional systems : an empirical relation. *Europhys. Lett.*, 57 :546, 2002.
- [226] S. Das Sarma and E. H. Hwang. Charged impurity-scattering-limited low-temperature resistivity of low-density Silicon inversion layers. *Phys. Rev. Lett*, 83 :164, 1999.
- [227] S. Das Sarma and E. H. Hwang. Calculated temperature-dependent resistance in low-density two-dimensional hole gases in GaAs heterostructures. *Phys. Rev. B*, 61 :R7838, 2000.
- [228] S. Das Sarma and E. H. Hwang. Parallel magnetic field induced giant magnetoresistance in low density quasi-two dimensional layers. *Phys. Rev. Lett*, 84 :5596, 2000.
- [229] S. Das Sarma and E. H. Hwang. The so-called two dimensional metal-insulator transition. *Solid State Comm.*, 135 :579, 2005.
- [230] S. Das Sarma, M. P. Lilly, E. H. Hwang, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and J. L. Reno. Two-dimensional metal-insulator transition as a percolation transition in a high-mobility electron system. *Phys. Rev. Lett*, 94 :136401, 2005.
- [231] H. J. Schulz, G. Cuniberti, and P. Pieri. Fermi liquids and Luttinger liquids. *cond-mat/9807366*, 1998.
- [232] G. Senatore and N. H. March. Recent progress in the field of electron correlation. *Rev. Mod. Phys.*, 66 :445, 1994.
- [233] V. Senz, U. Doetsch, U. Gennser, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, R. Hartmann, and D. Grützmacher. Metal-insulator transition in a 2-dimensional system with an easy spin axis. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 8 :237, 1999.
- [234] V. Senz, T. Heinzel, T. Ihn, K. Ensslin, G. Dehlinger, D. Grützmacher, and U. Gennser. Coexistence of weak localization and a metallic phase in Si/SiGe quantum wells. *Phys. Rev. B*, 61 :R5082, 2000.
- [235] V. Senz, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, G. Dehlinger, D. Grützmacher, and U. Gennser. Analysis of the metallic phase of two-dimensional holes in SiGe in terms of temperature dependent screening. *Phys. Rev. Lett*, 85 :4357, 2000.
- [236] A. A. Shashkin. Metal-insulator transitions and the effects of electron-electron interactions in two-dimensional electron systems. *Physics-Uspokhi*, 48 :129, 2005. Disponible sur cond-mat/0405556.

- [237] A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, and G. V. Kravchenko. Insulating phases in a two-dimensional electron system of high-mobility Si-MOSFETs. *Phys. Rev. B*, 49 :14486, 1994.
- [238] A. A. Shashkin, G. V. Kravchenko, and V. T. Dolgoplov. Floating up of the extended states of Landau levels in a two-dimensional electron gas in Silicon MOSFET's. *JETP Lett.*, 58 :220, 1993.
- [239] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk. Indication of the ferromagnetic instability in a dilute two-dimensional electron system. *Phys. Rev. Lett*, 87 :086801, 2001.
- [240] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk. Sharp increase of the effective mass near the critical density in a metallic two-dimensional electron system. *Phys. Rev. B*, 66 :073303, 2002.
- [241] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, and T. M. Klapwijk. Metal-insulator transition in 2D : equivalence of two approaches for determining the critical point. *Phys. Rev. Lett*, 87 :266402, 2001.
- [242] M. Shayegan, E. P. De Poortere, O. Gunawan, Y. P. Shkolnikov, E. Tutuc, and K. Vakili. Two-dimensional electrons occupying multiple valleys in AlAs. *cond-mat/0606158v1*, 2006.
- [243] D. L. Shepelyansky. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Phys. Rev. Lett*, 73 :2607, 1994.
- [244] D. L. Shepelyansky and P. H. Song. Quantum ergodicity for electrons in two dimensions. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 8 (7) :665, 1999.
- [245] J. Shi, S. He, and X. C. Xie. Droplet state in an interacting two-dimensional electron system. *Phys. Rev. B*, 60 :R13950, 1999.
- [246] J. Shi, S. He, and X. C. Xie. Meta-percolation and metal-insulator transition in two dimensions. *cond-mat/9904393*, 1999.
- [247] B. I. Shklovskii and A. L. Efros. *Electronic properties of doped semi-conductors*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New-York Tokyo, 1984.
- [248] M. Y. Simmons and A. R. Hamilton. Condensed-matter physics : real metals, 2D or not 2D? *Nature*, 400 :715, 1999.
- [249] M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose, and D. A. Ritchie. Weak localization, hole-hole interactions, and the metal-insulator transition in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 84 :2489, 1998.
- [250] M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose, D. A. Ritchie, A. K. Savchenko, and T. G. Griffiths. Metal-insulator transition at $B = 0$ in a dilute two dimensional GaAs-AlGaAs hole gas. *Phys. Rev. Lett*, 80 :1292, 1998.
- [251] P. Simon, B. Braunecker, and D. Loss. Magnetic ordering of nuclear spins in an interacting two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 77 :045108, 2008.
- [252] D. Simonian, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik. Reflection symmetry at a $B = 0$ metal-insulator transition in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 55 :R13421, 1997.
- [253] D. Simonian, S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik, and V. M. Pudalov. Magnetic field suppression of the conducting phase in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 79 :2304, 1997.

- [254] D. Simonian, S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik, and V. M. Pudalov. H/T scaling of the magnetoconductance near the conductor-insulator transition in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 57 :R9420, 1998.
- [255] Y. Song, R. Wortis, and W. A. Atkinson. Dynamical mean field study of the two-dimensional disordered Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 77 :054202, 2008.
- [256] S. Sorella. Green Function Monte Carlo with stochastic reconfiguration. *Phys. Rev. Lett*, 80 :4558, 1998.
- [257] B. Spivak. Properties of the strongly correlated two-dimensional electron gas in Si-MOSFETs. *Phys. Rev. B*, 64 :085317, 2001.
- [258] B. Spivak. Phase separation in the two-dimensional electron liquid in MOSFETs. *Phys. Rev. B*, 67 :125205, 2003.
- [259] B. Spivak and S. A. Kivelson. Phases intermediate between a two-dimensional electron liquid and Wigner crystal. *Phys. Rev. B*, 70 :155114, 2004.
- [260] B. Spivak and S. A. Kivelson. Transport in two dimensional electronic micro-emulsions. *cond-mat/0510422*, 2005.
- [261] B. Srinivasan, G. Benenti, and D. L. Shepelyansky. Delocalizing effect of the Hubbard repulsion for electrons on a two-dimensional disordered lattice. *Phys. Rev. B*, 67 :205112, 2003.
- [262] A. Szabo and N. S. Ostlund. *Modern quantum chemistry*. McGraw-Hill, New York, 1989.
- [263] B. Tanatar and D. M. Ceperley. Ground state of the two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 39 :5005, 1989.
- [264] D. F. B. ten Haaf, H. J. M. van Bommel, J. M. J. van Leeuwen, W. van Saarloos, and D.M.Ceperley. Proof for an upper bound in fixed-node Monte Carlo for lattice fermions. *Phys. Rev. B*, 51 :13039, 1995.
- [265] J. S. Thakur and D. Neilson. Superconductivity in a correlated disordered two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 58 :13717, 1998.
- [266] J. S. Thakur and D. Neilson. Phase diagram of the metal-insulator transition in two-dimensional electronic systems. *Phys. Rev. B*, 59 :R5280, 1999.
- [267] D. J. Thouless. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, 13 :93, 1974.
- [268] L. A. Tracy, E. H. Hwang, K. Eng, G. A. Ten Eyck, E. P. Nordberg, K. Childs, M. S. Carroll, M. P. Lilly, and S. Das Sarma. Observation of percolation-induced two-dimensional metal-insulator transition in a Si MOSFET. *Phys. Rev. B*, 79 :235307, 2009.
- [269] L.A. Tracy, J.P. Eisenstein, M.P. Lilly, L.N. Pfeiffer, and K.W. West. Surface acoustic wave propagation and inhomogeneities in low density two-dimensional electron systems near the metal-insulator transition. *Solid State Commun.*, 137 :150, 2006.
- [270] N Trivedi and D. M. Ceperley. Ground-state correlations of quantum antiferromagnets : a Green-function Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*, 41 :4552, 1990.
- [271] E. Tutuc, S. Melinte, E. P. De Poortere, M. Shayegan, and R. Winkler. Role of finite layer thickness in spin polarization of GaAs two-dimensional electrons in strong parallel magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 67 :241309, 2003.

- [272] E. Tutuc, S. Melinte, and M. Shayegan. Spin polarization and g factor of a dilute GaAs two-dimensional electron system. *Phys. Rev. Lett*, 88 :036805, 2002.
- [273] M. J. Uren, R. A. Davies, and M. Pepper. The observation of interaction and localisation effects in a two-dimensional electron gas at low temperatures. *J. Phys. C.*, 13 :L985, 1980.
- [274] M. J. Uren, R. A. Davies, and M. Pepper. Logarithmic corrections to two-dimensional transport in Silicon inversion layers. *J. Phys. C.*, 14 :5737, 1981.
- [275] K. Vakili, Y. P. Shkolnikov, E. Tutuc, E. P. De Poortere, and M. Shayegan. Spin susceptibility of two-dimensional electrons in narrow AlAs quantum wells. *Phys. Rev. Lett*, 92 :226401, 2004.
- [276] B. A. van Tiggelen. Anderson localization of waves. *Cours aux Houches, disponible sur le site www.andersonlocalization.com*, 1998.
- [277] C. M. Varma, Z. Nussinov, and W. van Saarloos. Singular Fermi liquids. *Phys. Rep.*, 361 :267, 2002.
- [278] S. A. Vitkalov, K. James, B. N. Narozhny, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk. In-plane magnetoconductivity of Si-MOSFET's : a quantitative comparison between theory and experiment. *Phys. Rev. B*, 67 :113310, 2003.
- [279] S. A. Vitkalov, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk. Spin polarization of two-dimensional electrons determined from Shubnikovï¿½de-Haas oscillations as a function of angle. *Phys. Rev. B*, 64 :073101, 2001.
- [280] S. A. Vitkalov, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk. Spin polarization of strongly interacting 2D electrons : the role of disorder. *Phys. Rev. B*, 65 :201106, 2002.
- [281] S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk. Small-angle Shubnikovï¿½de Haas measurements in a 2D electron system : the effect of a strong in-plane magnetic field. *Phys. Rev. Lett*, 85 :2164, 2000.
- [282] S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk. Scaling of the magnetoconductivity of Silicon MOSFETs : evidence for a quantum phase transition in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 87 :086401, 2001.
- [283] T. Vojta, F. Epperlein, and M. Schreiber. Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? it depends! *Phys. Rev. Lett*, 81 :4212, 1998.
- [284] T. Vojta and M. Schreiber. Localization and conductance in the quantum coulomb glass. *Phil. Mag. B*, 81 :1117, 2001.
- [285] D. Vollhardt and P. Wölfle. Self-consistent theory of Anderson localization. In *Electronic Phase Transitions*. Elsevier Science, 1992.
- [286] X. Waintal. *Effet de l'interaction Coulombienne sur la localisation d'Anderson dans des systèmes de basses dimensions*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 1999.
- [287] X. Waintal. On the quantum melting of the two-dimensional Wigner crystal. *Phys. Rev. B*, 73 :075417, 2006.
- [288] X. Waintal, G. Benenti, and J.-L. Pichard. New quantum phase between the Fermi glass and the Wigner crystal in two dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 83 :1826, 1999.
- [289] X. Waintal, G. Fleury, K. Kazymyrenko, M. Houzet, P. Schmitteckert, and D. Weinmann. Persistent currents in one dimension : the counterpart of Leggett's theorem. *Phys. Rev. Lett*, 101 :106804, 2008.

- [290] D. S. Wiersma, P. Bartolini, A. Lagendijk, and R. Righini. Localization of light in a disordered medium. *Nature*, 390 :671, 1997.
- [291] E. P. Wigner. On the interaction of electrons in metals. *Phys. Rev.*, 46 :1002, 1934.
- [292] Y. Yaish, O. Prus, E. Buchstab, S. Shapira, G. Ben Yoseph, U. Sivan, and A. Stern. Interband scattering and the «metallic phase» of two-dimensional holes in GaAs /Al-GaAs. *Phys. Rev. Lett*, 84 :4954, 2000.
- [293] C. E. Yasin, M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, R. G. Clark, N. E. Lumpkin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Universal behaviour in the floating up of quantum Hall extended states as $B \rightarrow 0$. *Bull. Am. Phys. Soc.*, 46 :1037, 2001.
- [294] J. Yoon, C.C. Li, D. Shahar, D.C. Tsui, and M. Shayegan. Wigner crystallization and metal-insulator transition of two-dimensional holes in GaAs at $B = 0$. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :1744, 1999.
- [295] J. Yoon, C.C. Li, D. Shahar, D.C. Tsui, and M. Shayegan. Parallel magnetic field induced transition in transport in the dilute two-dimensional hole system in GaAs. *Phys. Rev. Lett*, 84 :4421, 2000.
- [296] A. P. Young. Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 19 :1855, 1979.
- [297] G. Zala, B. Narozhny, and I. L. Aleiner. Interaction corrections at intermediate temperatures : longitudinal conductivity and kinetic equation. *Phys. Rev. B*, 64 :214204, 2001.
- [298] J. Zhu, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West. Spin susceptibility of an ultra-low density two dimensional electron system. *Phys. Rev. Lett*, 90 :056805, 2003.
- [299] J. Zinn-Justin. *Intégrale de chemin en mécanique quantique : introduction*. EDP Sciences, CNRS Editions, 2003.

Nous étudions l'effet des interactions coulombiennes sur la localisation d'Anderson dans le gaz bidimensionnel d'électrons désordonné. L'objectif est de statuer sur la question de l'existence de métaux à deux dimensions. En l'absence d'interaction, la théorie d'échelle de la localisation prédit qu'un désordre infinitésimal suffit à localiser la fonction d'onde électronique et donc à rendre le système isolant à température nulle (Abrahams et al. 1979). Dans certaines limites extrêmes, les interactions peuvent être prises en compte et l'on aboutit également à un état isolant. Cependant, aucune théorie analytique ne permet de traiter le régime quantique non-perturbatif où désordre et interaction sont intermédiaires. Expérimentalement, il est possible de l'explorer dans des échantillons de haute mobilité et basse densité. Depuis 1994, des comportements métalliques inexplicables y ont été observés (Kravchenko et al., 1994).

Nous avons mis au point une méthode numérique permettant d'étudier le problème couplé de la localisation d'Anderson en présence d'interaction, et en particulier de calculer la longueur de localisation du système corrélé à la limite thermodynamique. Cette méthode mêle Monte Carlo Quantique à température nulle et théorie d'échelle pour la conductance de Thouless. Nous trouvons que la théorie d'échelle de la localisation est préservée en présence d'interaction et donc que le gaz bidimensionnel, même corrélé, est isolant à température nulle. Nos résultats montrent de plus que les interactions délocalisent le gaz bidimensionnel et que cet effet de délocalisation est accru en présence de dégénérescence de vallées. Ils nous permettent de proposer un mécanisme simple rendant compte des principales caractéristiques des comportements métalliques observés expérimentalement.

Mots-clés : localisation d'Anderson, théorie d'échelle de la localisation, corrélations électroniques, transition métal-isolant à 2D, Monte Carlo Quantique.

We study the effect of Coulomb interaction on Anderson localisation in the disordered two-dimensional electron gas. Our objective is to determine whether or not there are metals in two dimensions. Without interaction, the scaling theory of localisation predicts that an arbitrarily small disorder is enough to localise the electronic wavefunction and therefore, to drive the two-dimensional system toward an insulating state at zero temperature (Abrahams et al. 1979). In some extreme limits, the interactions can be taken into account and one also finds an insulating state. However, there is no analytical tool to deal with the quantum non-perturbative regime, where both disorder and interactions are intermediate. Experimentally, it can be explored in low density and high mobility two-dimensional samples. Since 1994, unexplained metallic behaviors have been observed in this regime (Kravchenko et al., 1994).

We have developed a numerical technique to study the interplay between Anderson localisation and electronic interactions, and in particular, to compute the localization length of the correlated system in the thermodynamic limit. It uses a combination of ground state Quantum Monte Carlo and finite size scaling for the Thouless conductance. We find that the scaling theory of localisation is unaffected by electronic correlations, so that the two-dimensional electron gas stay in an insulating state at zero temperature. However, our results show that correlations delocalise the two-dimensional system and that the delocalisation is much more dramatic in the presence of valley degeneracy. These results suggest a simple mechanism that accounts for the main experimental features of the observed metallic phase.

Key words : Anderson localisation, scaling theory of localisation, electronic correlations, metal-insulator transition in 2D, Quantum Monte Carlo.