

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

**UNIVERSITE MENTOURI-CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre:
Série:

THESE

Présentée pour obtenir le diplôme de **Doctorat**

En

Physique Théorique

Par

ABDELLAOUI Assia

Intitulée

**OPERATEUR DENSITE, MAGNETOCONDUCTANCE
ET EFFET HALL QUANTIQUE: APPROCHE DE LANDAUER
DANS LE CADRE DE LA THEORIE DE LA REPONSE LINEAIRE**

Soutenue le: 19/03/ 2006©

Devant le Jury:

Président:	L. GUECHI	Prof.	Univ. Constantine
Rapporteur:	F. BENAMIRA	M. C	Univ. Constantine
Examineurs:	S. R. ZOZOU	M. C	Univ. Constantine
	M. MAAMACHE	Prof.	Univ. Sétif
	K. BENCHEIKH	Prof.	Univ. Sétif
	M. T. MEFTAH	Prof	Univ. Ouargla

Remerciements

Pour la proposition et la réalisation de cette thèse de Doctorat, je tiens particulièrement à remercier mon directeur de recherche Dr. F. Benamira pour ses conseils, sa permanente sollicitude qu'il voulu bien m'accorder et son assistance.

Mes remerciements et ma gratitude vont également à tout le collectif des enseignants qui voudront bien se pencher sur ma thèse avec beaucoup de tolérance et faire partie du jury: Messieurs L. Guechi et S. R. Zouzou de l'université de Constantine, Monsieur M. T. Meftah de l'université de Ouargla et Messieurs M. Maamache et A. Bencheikh de l'université de Sétif.

Ma gratitude la plus vive et mes remerciements les plus distingués vont aussi à:

- Prof. Bernhard Kramer de l'université de Hambourg, pour m'avoir reçu dans son laboratoire pour une période de 2+4 mois et permis de rencontrer des sommités dans le domaine de la physique de la matière condensée et les systèmes mésoscopiques dont je cite, en particulier, Neil Ashcroft et Tsuneya Ando, de participer à des conférences de renommée internationale en Allemagne et en Autriche, et notamment de présenter un de mes travaux devant l'éminent Prof. Klaus von Klitzing.
- Profs. Rodolfo Jalabert, Markus Büttiker et Harold Baranger pour les discussions stimulantes, Dietmar Weinmann pour les conseils et les orientations et M. Ghafari pour son estime, ainsi qu'à tous ceux que j'ai rencontré durant cette période.
- Mes parents pour leurs encouragements constants ainsi qu'à mes sœurs et beaux frères.
- Messieurs Abd el Hamid Bachkhaznadj et Djamel Bouda pour les conseils, le soutien et les encouragements constants.
- Belkacem Bouricha Karima pour sa présence, et Riccardo Mazzrello pour son soutien, ces discussions, ces conseils et recommandations.
- Abd el Hamid Dokhane, Maghlaoui Leila, Till Vorath et tous les amis qui m'ont encouragé à persévérer.

C'est avec l'esprit libre qu'on avance

Table des matières

Liste des figures	5
Table des notations	8
Introduction	10
1 Transport cohérent en présence d'un champ magnétique	16
1.1 Introduction	16
1.2 Systèmes mésoscopiques	17
1.3 Dynamique classique et quantique d'un électron en présence d'un champ magnétique	19
1.3.1 Systèmes non confinés	20
1.3.2 Systèmes confinés	26
1.3.3 Confinement et désordre	33
1.4 Conduction	35
1.4.1 Modèle de Drude : Approche semi-classique	35
1.4.2 Magnéto-transport et effet Hall	37
1.4.3 Inconsistances de la théorie de Drude	41
1.5 Vision de Landauer : Approche heuristique	42
1.5.1 Formule de Landauer à deux terminaux	43
1.5.2 Formules de généralisation à plusieurs canaux de transmission	46
2 Opérateur densité dans le point de vue de Landauer : Champ magnétique arbitraire	48
2.1 Introduction	48
2.2 Description	51
2.3 Opérateur densité	54
2.3.1 Opérateur densité du type Kubo	56

2.4	Opérateur densité dans l'approche de Landauer	59
2.4.1	Technique de projection	59
2.4.2	Expression explicite de ϱ^{SC}	65
2.4.3	Expression finale de ϱ^L	67
2.5	Expression explicite de ϱ_d^L	68
2.5.1	Opérateur densité de courant	68
2.5.2	Expression formelle de ϱ_d^L	69
2.5.3	Evaluation du Superopérateur Master $\mathbf{\Lambda}$ dans le cadre de la théorie de diffusion	71
2.6	Valeur moyenne de la densité de courant	73
2.6.1	Conditions de conservation	74
2.7	Valeur moyenne du flux de courant	78
2.8	Conclusion	79

3 Magnétoconductance dans le point de vue de Landauer : Champ magnétique faible **81**

3.1	Introduction	81
3.2	Description	83
3.3	Expression de ϱ_d^L	85
3.3.1	Inverse de $\mathbf{\Gamma}$	94
3.4	Evaluation de \mathcal{G}^{SC} en terme des coefficients de transmission et réflexion	96
3.5	Evaluation de $\mathcal{G}^1(\mathbf{B})$	97
3.6	Expression générale de la magnéto-conductance $\mathcal{G}^L(\mathbf{B})$	99
3.7	Discussion	101
3.7.1	Limite d'une structure unidimensionnelle	102
3.7.2	Invariance par renversement de \mathbf{B}	103
3.7.3	Limite $\mathbf{B} = \mathbf{0}$	105
3.8	Conclusion	106

4 Régime de Hall quantique **107**

4.1	Introduction	107
-----	------------------------	-----

4.2	Mesure expérimentale	108
4.3	Effet Hall quantique intégral : Concepts de base	110
4.4	Effet des impuretés (désordre)	113
4.4.1	Largeur des bandes de Landau	114
4.4.2	Localisation et percolation	115
4.4.3	Description qualitative de l'EHQI en terme de la densité d'états	119
4.5	Effet de la température	121
4.5.1	Echelles de longueur en présence de localisation	123
4.6	Théorie d'échelle	124
4.7	Transport dans le modèle des états de bords : Approche probabiliste	126
4.7.1	Approche de Büttiker	127
4.7.2	Approche de Landauer	130
4.7.3	Discussion	134
4.8	Conclusion	135
5	Théorie de l'effet Hall quantique intégral dans l'approche de Landauer	136
5.1	Introduction	136
5.2	Formulation du problème	140
5.3	Opérateur densité en présence d'un champ magnétique intense dans l'approche de Landauer	141
5.4	Valeur moyenne du flux de courant I dans un champ \mathbf{B} intense	145
5.4.1	Expression de I^1 dans un champ \widehat{Bz} intense	146
5.4.2	Expression de I^{SC} dans un champ \widehat{Bz} intense	147
5.4.3	Valeur moyenne du flux de courant	148
5.5	Magnétoconductance longitudinale	148
5.6	Densité de particules $N(\mathbf{r})$	150
5.7	Modèle	153
5.8	Conductance Hall \mathcal{G}^{Hall}	156
5.9	Discussion	157
5.10	Conclusion	161

Conclusion générale et perspectives	163
A Propriétés du superopérateur collisionnel Λ	167
A.1 Superopérateurs	167
A.2 Superopérateur Master	169
B Solutions de $\nabla \cdot X = 0$	174
C Inverse de ∇	177
D Conservation du courant	180
E Matrices de collisions et unitarité	182
F $\mathcal{G}^L(B)$ dans l'approximation du temps de relaxation	185
G Densité de particules induite	190
H Effet Hall quantique intégral : Méthode de comptage	192
H.1 Modèle	194
H.1.1 Conductances longitudinales	196
H.1.2 Conductances Hall	198
Bibliographie	199

Table des figures

1-1	(a) régime diffusif ; (b) régime balistique	17
1-2	Mouvement cyclotron effectué par l'électron sous l'effet d'un champ magnétique.	21
1-3	Spectre d'énergie en présence d'un champ magnétique.	24
1-4	Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie en l'absence de confinement dans un champ magnétique non nul perpendiculaire. Les niveaux de Landau remplis sont en noir.	25
1-5	Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie en l'absence de confinement dans un champ magnétique nul. La partie hachurée représente un continuum d'états.	26
1-6	Spectre d'énergie dans un potentiel de confinement parabolique.	27
1-7	Mouvement cyclotron en présence d'un confinement puit carré et spectre d'énergie correspondant pour $\Lambda_y \gg 1$ [30].	29
1-8	Mouvement du point de vue classique en présence de confinement : (a) orbites cyclotron et orbites ouvertes, (b) trajectoires traversantes dans les deux directions (ici une seule direction est montrée).	30
1-9	Trajectoire de l'électron en présence de confinement : (a) le champ magnétique est faible, (b) le champ magnétique est intense.	31
1-10	Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie en présence de confinement et en l'absence de champ magnétique. Ici le confinement est du type puits carré.	32
1-11	Spectre d'énergie : niveaux de Landau dans un confinement puits carré en présence de désordre.	33
1-12	Densité d'états en présence de confinement et de désordre.	34

1-13	Trajectoire de l'électron dans un champ magnétique intense en présence d'impuretés.	34
1-14	Trajectoire de l'électron dans un champ magnétique nul en présence d'impuretés.	35
1-15	Géométrie standard de l'effet Hall : (a) le champ électrique est appliqué entre les extrémités; (b) la déviation dans la direction $-y$ causée par le champ magnétique; (c) le champ électrique transversal compense la force due au champ magnétique [25].	38
1-16	Echantillon mésoscopique entre deux réservoirs (modèle de Landauer).	44
2-1	Echantillon mésoscopique en contact avec des terminaux liés à leur tour à des réservoirs. La structure est soumise à un champ magnétique \mathbf{B} uniforme.	53
3-1	Echantillon mésoscopique en contact avec des terminaux liés à leur tout à des réservoirs. La structure est soumise à un champ magnétique \widehat{Bz} faible.	83
4-1	Bare de Hall avec la barrière potentiel représentée par le gate, en représentation 3-dimensions [23].	108
4-2	L'effet Hall quantique original de von Klitzing, Doroda et Pepper (1981) pour un Si-MOSFET en fonction du potentiel du gate (barrière) à $T=1.5K$ et $B=18$ Tesla [19].	109
4-3	Variation de la résistivité longitudinale et la résistivité de Hall en fonction de la constante eB/hm . Le graphe montre une déviation du résultat semi-classique de Drude pour un champ magnétique intense en forme d'oscillations pour ρ_{xx} et plateaux pour ρ_{xy} [23].	112
4-4	QHE mesuré par von Klitzing (1982), pour un GaAs/GaAlAs dans un champ magnétique variable à la température $T=1.6K$ [13].	113
4-5	La conductivité diagonale σ_{xx} , la conductivité de Hall σ_{xy} et la densité d'états $\mathcal{D}(\varepsilon)$ en fonction du filling factor. La ligne pointillée diagonale correspond à la valeur ne/B	114
4-6	Formation des états de bords et des états massifs.	115

4-7	Orbites d'égal potentiel proches du sommet et du bas du potentiel aléatoire. Les flèches indiquent la direction du mouvement [32]. Les montagnes et les vallées sont les états localisés. La ligne de cote entre ceux-là représente les états étendus.	117
4-8	Densité d'états et longueur de localisation d'une bande Landau désordonnée. Un état électronique est étendu dans l'intervalle $\varepsilon'_c - \varepsilon_c = \Delta\varepsilon$ avec $\xi(\varepsilon)$ est plus large que la longueur de la brisure de la phase.	118
4-9	L'influence du désordre sur le spectre d'énergie d'un système bi-dimensionnel confiné ($W = 26\ell_c$) et dans un champ magnétique intense. Les coordonnées Y_ν dénotent l'emplacement des états. Pour une forte corrélation, seuls les états massifs avec $ Y_\nu < W/2$ sont sensiblement influencés [30].	119
4-10	Densité d'états et spectre d'énergie dans un champ magnétique \widehat{Bz} intense.	120
4-11	Comportement qualitatif de la magnétoconductivité longitudinale σ_{xx} et Hall σ_{xy} en fonction de $\varepsilon/\hbar\omega_c$ pour différentes températures T. Lorsque T croît, $T' < T''$, la largeur des pics de σ_{xx} croît. Le pas (step) dans σ_{xy} décroît.	122
4-12	Mesure expérimentale des résistances longitudinale et Hall à T= 0.3K (a) Si-MOSFET à $B = 13.8$ Tesla ; (b) GaAs/AlGaAs Hétérostructure [1].	123
4-13	Effet Hall quantique en fonction du facteur de remplissage ν à température nulle.	123
4-14	Orbite quasi classique ouverte se propageant au long du bord supérieur de l'échantillon. Dans un champ magnétique intense, le processus de retour après collision par l'impureté, sur des distances assez large en comparaison avec le rayon cyclotron, est supprimé.	127
4-15	Structure de Büttiker à quatre contacts parfaits.	128
4-16	Structure mésoscopique à deux terminaux avec le potentiel du gate est contrôlé par une barrière potentielle.	131
4-17	Contours d'égal potentiel au voisinage d'une barrière [111].	131
5-1	Structure mésoscopique bi-dimensionnelle soumise à un champ magnétique \widehat{Bz} intense.	140
H-1	Bare de Hall à six terminaux.	193

Table des notations

\mathbf{A}	potentiel vecteur
\mathbf{B}	champ magnétique uniforme
\mathcal{D}	densité d'états
ε	énergie
ε	coefficient de coupalge dans annexe (H)
f'	fonction de distribution Fermi-Dirac
\mathcal{G}	conductance
\hbar	constante de Planck
h	Hamiltonien
e^2/h	constante universelle ayant la dimension d'une conductance
\mathcal{I}	superopérateur unité
I	flux de courant électrique
\mathbf{j}	densité de courant électrique
k_B	Constante de Boltzmann
ℓ	Libre parcours moyen
L_ϕ	distance moyenne entre deux collisions inélastiques
\mathcal{L}	Liouvillien
ℓ_c, ℓ_B	rayon cyclotron, longueur magnétique
\mathcal{L}	rayon écran
m^*	masse réelle de l'électron
n	densité d'électrons ; nombre de canaux
$N(\mathbf{r})$	densité de particules en un point \mathbf{r}

\mathcal{P}	superopérateur diagonal de projection
\mathcal{Q}	superopérateur non diagonal de projection
\mathcal{R}	résistance
$R_{ij}^{\alpha\beta}$	coefficient de réflexion du canal j du terminal β dans le canal i du terminal α
S	matrice de collisions
$T_{ij}^{\alpha\beta}$	coefficient de transmission du canal j du terminal β dans le canal i du terminal α
T	opérateur de transition
T	température
T	coefficient de transmission
v_a	vitesse dans chaque canal
ω_c	pulsation cyclotron
$w_{L,R}$	potentiels induits aux régions asymptotiques des terminaux gauche et droit
$\mu_{L,R}$	potentiels chimiques des réservoirs gauche et droit respectivement
τ^ε	temps de relaxation dépendant de l'énergie de la particule
ξ	longueur de localisation; l'état dans lequel se trouve le système
Υ	largeur de la bande de Landau
σ_{ij}	tenseur conductivité
ρ_0	opérateur densité à l'équilibre
$\varrho(t)$	déviations de l'opérateur densité $\rho(t)$ de sa valeur à l'équilibre
ν	facteur de remplissage
Ω	volume de la structure
Ψ, φ	fonctions d'ondes
χ	fonction transverse
δ	la fonction de Kroncker
Λ	superopérateur Master
∇	opérateur différentiel
1	matrice unité d'ordre n
$\mathbf{1}$	vecteur unité dont les éléments sont $+1$ et -1

Introduction

Avec l'avancée de la technologie de pointe durant les dernières décennies, des échantillons semi-conducteurs et métalliques de taille réduite, de l'ordre du nanomètre, ont connu le jour. Les méthodes expérimentales de leurs fabrications sont diversifiées. Nous citons à titre d'exemple, les techniques de Lithographie, Molecular Beam Epitaxy (MBE) et récemment "Scanning Tunneling Microscope" (STM) [1].

Depuis presque un quart de siècle, ces dispositifs sont largement étudiés à la fois sur le plan expérimental et sur le plan théorique. L'étude expérimentale de leurs propriétés physiques a atteint un stade où désormais la plupart des prédictions sont confrontées à l'expérience. Cette étude révèle surtout, que le comportement des ces dispositifs diffère substantiellement du comportement semi-classique des échantillons macroscopiques. Par exemple, le transport dans ces échantillons, ne peut pas être expliqué par la théorie de Boltzmann car les interférences quantiques jouent un rôle prépondérant notamment à basse température et conduisent à des fluctuations parfois très importantes [2]. Ces échantillons ont reçu le nom de systèmes mésoscopiques.

L'intérêt des théoriciens pour ces systèmes avait commencé avec les travaux d'Altshuler [3], Lee [4], Fukuyama [5] etc. . . dans les années quatre vingt sur l'étude et la modélisation théorique du phénomène des fluctuations de la conductance en l'absence de champ magnétique extérieur. Plusieurs approches avaient été adoptées, parmi lesquelles citons la méthode diagrammatique [6, 5, 2], les matrices aléatoires [7] et récemment la théorie des champs à travers le modèle sigma non linéaire [8]. Toutes ces techniques avaient alors confirmé deux choses importantes à savoir l'universalité de ces fluctuations vis-à-vis du degré du désordre et que ces fluctuations sont de l'ordre de grandeur de la conductance elle-même.

Cette propriété stupéfiante a dès lors focalisé le plus gros des recherches dans le domaine de la physique de l'état solide sur les systèmes mésoscopiques et l'étude de leurs propriétés, notamment l'étude du transport en présence ou non d'un champ magnétique extérieur.

Historiquement, les phénomènes du transport électrique dans les solides ont été, en général, étudiés théoriquement par différentes techniques et approches. L'approche de Kubo, basée sur l'approximation de la réponse linéaire est celle qui a reçu le plus d'attention depuis la parution du travail de Kubo en 1957 [9]. L'avantage de cette méthode, purement analytique, est qu'elle explique et quantifie les propriétés dynamiques du transport par l'intermédiaire des propriétés statistiques du système étudié. La démarche consiste à inclure dans l'étude du transport dans un système physique fini le monde extérieur tout entier. Ce monde extérieur, qui est l'univers, est alors représenté par des réservoirs attachés au système en question. Le transport du courant électrique à l'intérieur du système physique est le résultat d'une différence entre les potentiels chimiques des différents réservoirs. Parfaitement modélisable par la théorie de la réponse linéaire, l'approche de Kubo ait marqué un grand succès.

Parallèlement à l'approche de la réponse linéaire de Kubo, Landauer introduit une nouvelle approche heuristique, qui consiste à regarder le transport dans un système physique comme le résultat de l'injection de particules chargées à partir des réservoirs extérieurs [10]. Landauer considère alors le transport à l'intérieur du système physique comme complètement cohérent, c'est-à-dire sans collisions inélastiques. Par ailleurs, dans ce point de vue, le courant circulant à l'intérieur de ce système (structure) est considéré comme l'agent instigateur d'une différence de potentiel entre les bornes de l'échantillon contenant des impuretés distribuées aléatoirement, dit désordonné. L'idée essentielle de Landauer est qu'à basse température où les porteurs ne subissent que des collisions élastiques avec les impuretés, le transport cohérent peut être vu comme une probabilité de diffusion (transmission et réflexion) par le désordre. Cette idée géniale, connue sous le nom de formalisme de Landauer, lui permet de montrer que la conductance propre d'un échantillon unidimensionnel est proportionnelle au rapport des coefficients de transmission et réflexion, T/R . La constante de proportionnalité n'est autre que la valeur universelle e^2/h .

En fait, ce résultat a été obtenu par Landauer presque au même moment que le résultat de Kubo, basée sur la réponse linéaire. Cependant, il n'a pas reçu beaucoup d'attention et ce jusqu'à la découverte des systèmes mésoscopiques aux années 80, où il a été, la première fois,

exploiter pour expliquer les fluctuations universelles de leur conductance [5].

Très vite après cet événement, l'approche de Landauer est devenue très célèbre pour sa simplicité et son efficacité à décrire les propriétés de transports des systèmes mésoscopiques. Cependant, d'autres chercheurs ont avancé l'idée que le formalisme de Landauer devrait conduire plutôt à une conductance uniquement proportionnelle au coefficient de transmission T .

La controverse installée a fait alors l'objet de plusieurs recherches expérimentales et théoriques pour sa résolution. Il s'est avéré plus tard, avec les travaux de Büttiker [11, 12] et d'autres, que la différence entre les deux formules réside dans la différence de potentiel utilisée pour calculer la conductance. En effet, la première formule utilise la différence entre les potentiels induits aux extrémités de l'échantillon, alors que la deuxième considère la différence entre les potentiels chimiques des réservoirs. Aussitôt, après, Imry [13] montra que la différence entre les deux formules réside dans la résistance des contacts qui n'est pas prise en considération dans la formule originale de Landauer. Autrement dit, la formule originale de Landauer donne la conductance propre à l'échantillon mésoscopique indépendamment de l'effet des contacts. D'un autre côté, Büttiker a poursuivi l'approche heuristique de Landauer mais en l'adaptant au point de vue de Kubo, c'est-à-dire en reliant le courant circulant à l'intérieur de l'échantillon aux potentiels chimiques des différents réservoirs. De cette manière, Büttiker arrive à obtenir la formule originale de Landauer à partir d'un dispositif avec quatre réservoirs extérieurs, deux servant comme source et évier du courant et les deux autres comme terminaux de mesure de la différence de potentiels. La formule originale de Landauer est alors obtenue dans le cas limite où les couplages entre les terminaux sont réduits au plus bas ordre.

Bien que le résultat original de Büttiker ait été obtenu par une approche complètement heuristique, il a été retrouvé génialement dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire par plusieurs auteurs. Nous citons ici les travaux les plus intéressants comme celui de Szafer-Stone [14] en l'absence d'un champ magnétique extérieur et ceux de Fisher-Lee [15] et Baranger-Stone [16] en présence d'un champ magnétique.

A notre avis, ces travaux étaient un grand tournant dans le formalisme heuristique de Landauer, puisqu'ils ont confirmé de manière claire que ce formalisme peut être modelée par la théorie de la réponse linéaire, dans le cadre du point de vue de Kubo [17]. C'est-à-dire lorsqu'il s'agit de considérer les potentiels des réservoirs comme les agents qui causent la circulation du

courant à l'intérieur de la structure. A l'inverse, on a cru pendant longtemps que la théorie de la réponse linéaire n'était pas applicable dans le point de vue de Landauer qui considère le courant comme l'instigateur du potentiel induit. Ceci est dû au fait, que la théorie de la réponse linéaire est par construction basée sur la définition, au préalable, d'un Hamiltonien qui contient toutes les interactions et les excitations extérieures, et calcul le courant dans l'échantillon comme réponse. D'autre part, on ne savait pas comment ne pas tenir compte de l'effet des contacts dans une théorie de réponse linéaire.

Ce dilemme a été pour la première fois résolu dans le travail de Benamira [18] en intégrant le potentiel induit à l'intérieur de la structure dans l'Hamiltonien du système et supprimant l'effet des contacts au niveau de l'opérateur densité statistique au moyen de la technique de projection. Cependant, ce travail considérait seulement le cas simple d'une théorie en l'absence d'un champ magnétique extérieur et par conséquent ne pouvait décrire d'importants phénomènes quantiques liés à une éventuelle existence d'un champ magnétique comme *la magnétoconductance* et *l'effet Hall quantique* [19]. Par ailleurs, à cause justement de l'absence du champ magnétique extérieur, on s'est intéressé uniquement au calcul de la conductance à partir de la partie diagonale de l'opérateur statistique, qui s'est avérée seule pertinente dans une structure à deux terminaux.

Notre objectif dans cette thèse, est de palier à ce manque et d'élargir la théorie pour tenir compte de l'effet d'un champ magnétique extérieur uniforme et d'en déduire les conséquences. Nous nous intéressons à déterminer la différence entre les points de vue de Kubo et de Landauer à partir de l'opérateur densité statistique lui-même avant même d'en déduire les conséquences sur les grandeurs physiques. Nous allons nous limiter dans notre étude à une structure à deux terminaux. Nous admettrons alors que les mesures sont effectuées réellement par un montage à quatre terminaux mais sans aucune perturbation sur les états quantiques des porteurs.

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse sont présentés dans les chapitres 2, 3 et 5.

Dans le chapitre 2, nous exposons en détail notre approche pour modéliser le point de vue de Landauer dans une théorie de réponse linéaire. Nous nous intéresserons alors au calcul de l'opérateur densité statistique d'un échantillon mésoscopique désordonné en présence d'un champ magnétique extérieur uniforme et d'intensité arbitraire. Nous mettons ainsi en exergue la différence entre les points de vue de Landauer et de Kubo au niveau de l'opérateur densité nécessaire pour le calcul de toutes les grandeurs physiques. Cette différence se manifeste par un

terme supplémentaire traduisant l'effet de la self-consistance introduite par la suppression des contacts.

Les chapitres 3 et 5, sont consacrés à l'application des résultats du chapitre 2 pour étudier le transport dans une structure mésoscopique à deux terminaux à travers le calcul de la conductance correspondante sous différentes conditions. Les terminaux reliant l'échantillon mésoscopique aux réservoirs, serviront précisément pour mener un calcul exact dans le cadre de la théorie de diffusion que nous adapterons à notre problème. Nous nous limitons au cas idéal où les mesures des tensions induites aux extrémités de l'échantillon sont effectuées de façon non invasive.

De prime abord, nous nous intéresserons à déterminer l'opérateur densité diagonal solution de l'équation maîtresse de manière exacte pour n'importe quelle valeur du champ magnétique perpendiculaire à la structure.

Dans le chapitre 3, nous nous intéresserons à la dérivation d'une expression généralisée de la magnétoconductance en présence d'un champ magnétique de faible intensité, perpendiculaire au flux du courant, valable dans le point de vue de Landauer. Celle-ci est définie par le rapport du courant circulant dans la structure considérée à la différence de potentiel induite aux extrémités de l'échantillon mésoscopique. Par ailleurs, l'inclusion du terme de la self-consistance nous permettra alors d'obtenir en fin de compte une formule de conductance généralisée exacte, valide même dans un champ magnétique nul. La formule finale est obtenue par un calcul mathématique exact sans faire appel à l'approximation du temps de relaxation. Enfin, nous discutons l'invariance par renversement du sens du champ magnétique. Nous montrons surtout que notre formule respecte bien les contraintes d'Onsager.

Dans le chapitre 5, nous élaborons un calcul microscopique sur l'effet Hall quantique intégral dans le cas où le champ magnétique appliqué est intense.

Nous adoptons le modèle des états de bords, jugé très fiable, pour déterminer les potentiels induits dans les différentes régions asymptotiques de la structure, en présence d'un champ magnétique intense. Nous dérivons ainsi les équations décrivant la variation des conductances Hall et longitudinale en fonction de la variation du champ magnétique et du désordre. Nous mettons ainsi en évidence la brisure de l'effet Hall quantique intégral et montrons que seulement en l'absence de dissipation, la magnétoconductance est nulle alors que la conductance Hall est

quantifiée à des entiers. Nous comparons aussi nos résultats avec ceux dérivés heuristiquement dans la littérature et ceux mesurés expérimentalement. La concordance est bien spectaculaire. Enfin, nous discutons les différents cas limites de cette théorie.

Pour mieux situer notre travail nous avons jugé utile d'inclure deux autres chapitres dans lesquels nous avons présenté tous les points essentiels de la littérature concernant l'évolution de l'étude des systèmes mésoscopiques durant ces deux dernières décennies.

Dans le chapitre 1, nous exposons en plus ou moins détail le phénomène de transport à faible température en l'absence de collisions inélastiques et en présence d'un champ magnétique. Nous mettons surtout l'accent sur le phénomène de quantification en présence d'un champ magnétique et ces effets sur les propriétés du transport des systèmes quantiques.

L'effet Hall quantique intégral est décrit qualitativement dans le chapitre 4. On y trouve aussi un résumé sur les hypothèses et techniques connues dans la littérature que nous adoptons dans notre travail sur le sujet. Nous nous limitons à une description des grandes lignes de l'évolution expérimentale et théorique de l'effet Hall quantique intégral au cours des dernières années. Plus précisément, nous discutons le modèle des états de bords pour décrire le phénomène de transport dans un champ magnétique intense, et mettons l'accent sur les résultats heuristiques qu'on trouve dans la littérature.

Chapitre 1

Transport cohérent en présence d'un champ magnétique

1.1 Introduction

La physique de l'état solide est consacrée à l'étude des propriétés des cristaux et en particulier à l'étude des phénomènes de conduction dans ces cristaux. Principalement, cette théorie ainsi que la physique statistique sont concernées par les propriétés des systèmes macroscopiques. Les premières théories développées pour l'étude du phénomène de conduction s'appuyaient toutes sur l'argument de la limite thermodynamique. Celle-ci consiste à considérer l'échantillon étudié comme ayant une taille très grande et ses constituants en nombre très grand mais tout en gardant leur rapport fini.

Généralement les systèmes sont dits macroscopiques si leur taille est plus grande qu'une certaine longueur de corrélation qui est de l'ordre du microscopique. Cependant, avec l'avancée de la technologie de pointe, la fabrication d'échantillons miniaturisés avec les techniques de lithographie connu le jour. Ces systèmes, appelés mésoscopiques (2DEG) [20], ont marqué une frontière nette entre les échelles microscopique et macrosopique. La propriété la plus importante qui se dégage de leur étude est que leur comportement est universel vis à vis des fluctuations [5, 2] et leur approche est complètement statistique [21, 22].

En raison de l'apparition de nouveaux phénomènes liés à une éventuelle existence d'un champ magnétique dans ces systèmes, en particulier le magnétotransport et l'effet Hall quan-

tique dont la concordance entre les prédictions théoriques et expérimentales est spectaculaire, nous allons mettre l'accent, dans ce chapitre, sur le phénomène de quantification en présence d'un champ magnétique et le phénomène de conduction. Pour ceci, rappelons de prime abord la définition des systèmes mésoscopiques.

1.2 Systèmes mésoscopiques

Un système est dit mésoscopique à une température donnée si les collisions inélastiques affectant les électrons de conduction sont très rares. A très basses températures (au voisinage du zéro absolu), le transport demeure cohérent tout au long de la direction de propagation puisque seules les collisions élastiques sont prédominantes. Quand la température augmente, les effets inélastiques commencent à apparaître plus souvent de sorte que la distance moyenne entre deux collisions inélastiques dénotée L_ϕ , diminue. Typiquement, cette longueur est de quelques nanomètres pour des températures assez élevées. Donc, on dit qu'un système est mésoscopique, à une température donnée, si sa longueur L dans la direction du transport est inférieure à L_ϕ . On peut distinguer plusieurs régimes de transport dans un échantillon mésoscopique selon sa taille L et sa largeur W relativement à la distance moyenne entre les collisions élastiques appelée libre parcours moyen (ℓ) [23]. Plus particulièrement, on définit les régimes dits diffusif et balistique par :

- Régime diffusif : $\ell \ll W, L \leq L_\phi$. Dans de tels échantillons, l'électron de conduction a un mouvement diffusif, c'est-à-dire, qu'il subit une multitude de diffusions à l'intérieur de l'échantillon avant de le quitter, (Fig. 1-1a).
- Régime balistique : $W, L \ll \ell$. Ici, en moyenne, l'électron ne subit aucune diffusion par les impuretés, à part les diffusions dues aux parois de l'échantillon (Fig. 1-1b). Généralement,

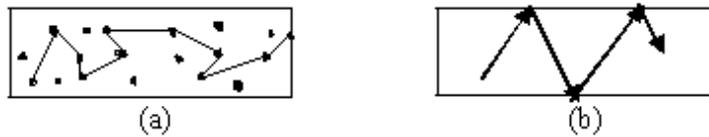


FIG. 1-1 – (a) régime diffusif; (b) régime balistique

les échantillons mésoscopiques utilisés dans l'expérience sont des :

• Semi-métaux

Les semi-métaux pouvant être utilisés dans des cas bien spécifiques, ont une densité de porteurs qui varie entre $10^{19}/\text{cm}^3$ et $10^{20}/\text{cm}^3$. Dans un semi-métal, une bande d'énergie est presque remplie et une autre est presque vide au zéro absolu [24, 25].

• Semi-conducteurs

Pour ceux là, la densité de porteurs de charge varie entre $10^{15}/\text{cm}^3$ et $10^{19}/\text{cm}^3$ et peut être contrôlée par dopage, une barrière électrostatique, etc.. Les propriétés électriques de ces systèmes (comme la résistivité) varient énormément avec la température. Au zéro absolu, un semi-conducteur devient isolant. Dans la théorie de bandes, si toutes les bandes d'énergie sont entièrement remplies, sauf une ou deux peu remplies, le cristal est un semi-conducteur ou parfois un semi-métal [25, 26].

• Métaux

Le Métal est un solide construit par une répétition régulière et infinie d'unités de structures identiques. Il est formé par un grand nombre d'électrons qui se déplacent librement appelés électrons de conduction. Le métal dispose d'une grande densité de porteurs ; elle est d'ordre $10^{22}/\text{cm}^3$. Plusieurs métaux se transforment en supraconducteurs à de faibles températures ce qui leur ajuste un autre degré de liberté.

En plus des atomes propres à leur structure, le métal, le semi-conducteur et le semi-métal sont formés aussi de défauts [24]. En particulier, les atomes d'*impuretés* peuvent se mêler à ces échantillons en plus ou moins grandes proportions. Si la concentration de ces impuretés est faible (d'ordre $10^{13} - 10^{19}$), on aura ainsi affaire à une solution solide désordonnée et notamment à un désordre *substitutionnel*. Ceci étant, les états électroniques étendus se transformeront en des états localisés (voir *Localisation d'Anderson*, chapitre 4).

La description du comportement des électrons à l'intérieur de ces échantillons est au coeur de la compréhension du phénomène de transport en présence d'un champ magnétique.

1.3 Dynamique classique et quantique d'un électron en présence d'un champ magnétique

Généralement dans l'étude théorique des propriétés physiques d'un solide, vu la complexité de ce dernier à cause du grand nombre d'atomes et d'électrons qui le constituent, on recourt à des méthodes approchées. La démarche consiste, selon les propriétés qu'on veut étudier, à dégager les effets principaux qui caractérisent ses propriétés et qui sont dus à la dynamique propre des électrons et des ions. Lorsque celles-ci sont comprises, on essaie de décrire les effets secondaires dus aux interactions mutuelles par la théorie de perturbation.

La nature dynamique du système considéré ne peut être déterminée que par la donnée de son Hamiltonien total. Celui-ci doit inclure, en principe, les énergies propres de tous les composants du système et leurs énergies d'interactions mutuelles qui sont très complexes et varient d'un échantillon à un autre. Pour décrire les phénomènes de conduction électrique (propriétés électriques), on sépare la dynamique des électrons de conduction de la dynamique des ions (ici les impuretés), de sorte qu'en l'absence de toute excitation extérieure, l'Hamiltonien total s'écrit

$$H = T_{el} + T_{ion} + V_{el-el} + V_{el-ion} + V_{ion-ion}. \quad (1.1)$$

Pour résoudre un problème aussi complexe, on doit alors recourir à des approximations plus ou moins plausibles selon le phénomène qu'on veut décrire. En ce qui nous concerne pour décrire les phénomènes de transport à *basse température*, on considère généralement *l'approximation dite statique* qui suppose que les particules du réseau sont en positions d'équilibre. L'idée de cette approximation [27], vient du fait que les électrons et les ions du réseau ont essentiellement des masses différentes. Donc, à cause de leur masse très lourde ($m_e/M \sim 10^{-3}$), le mouvement des ions (impuretés) est négligé (leur énergie cinétique sera aussi négligée). Par ailleurs, et du fait de la statique des ions, leurs interactions mutuelles, $V_{ion-ion}$, est une constante qui peut être ignorée, c'est à dire que les ions agissent sur les électrons de conduction comme des centres diffuseurs élastiques. D'autre part, à basse température les électrons de conduction sont supposés être sans interactions mutuelles ($V_{el-el} \equiv 0$) mais subissent l'effet du réseau périodique [25]. L'électron à l'intérieur d'un réseau périodique peut se comporter comme s'il était libre mais avec une masse m^* différente de sa masse propre. C'est à dire dans cette approximation, *dite de*

la *masse effective*, le potentiel périodique porte son effet sur la masse de l'électron (voir théorie des bandes [25])¹.

En ce sens, dans un système mésoscopique l'Hamiltonien (1.1) se réduit à l'étude de l'Hamiltonien à un corps

$$h = h^0 + V(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

où h^0 est l'Hamiltonien de l'électron libre et $V(\mathbf{r}) = V_{el-ion} = \sum_{j=1}^N V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ est le potentiel relatif au désordre substitutionnel. Il est donné par la somme des potentiels causés par les impuretés supposés statiques mais figées de manière aléatoire aux sites \mathbf{R}_j du réseau cristallin.

Nous nous intéresserons dans cette section à étudier la dynamique classique et quantique d'un gaz idéal d'électrons bi-dimensionnel en présence d'un champ magnétique uniforme \mathbf{B} en l'absence et en présence de confinement ainsi qu'en présence de désordre². En particulier, nous discuterons l'effet du confinement et de la géométrie sur la dynamique de l'électron dans de tels systèmes.

1.3.1 Systèmes non confinés

Dynamique classique

Classiquement une particule chargée de masse m^* en mouvement dans un champ magnétique \mathbf{B} subit une force perpendiculaire à sa vitesse et proportionnelle à sa charge $-e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Le mouvement de l'électron est alors gouverné par l'équation de Lorentz

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (1.3)$$

Celle-ci représente la partie magnétique de la force de Lorentz définie par l'action du champ magnétique exercé sur une charge ponctuelle e animée d'une vitesse \mathbf{v} . Si le champ \mathbf{B} constant est uniforme et perpendiculaire à la vitesse de l'électron $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, la solution générale de

¹On note que la masse effective dépend du potentiel périodique du réseau. Dans les métaux, la masse effective de l'électron est bien supérieure à sa masse propre $m^* > m$. Dans le cas d'un cristal semiconducteur, la masse effective est en générale un tenseur [28].

²Ce modèle ne peut être appliqué dans le cas général que s'il n'y a aucune interaction entre électrons.

(1.3) dans le plan (x, y) ³ perpendiculaire s'écrit :

$$x(t) = X + R \sin(\omega_c t + \varphi), \quad (1.4a)$$

$$y(t) = Y + R \cos(\omega_c t + \varphi). \quad (1.4b)$$

X, Y et φ sont des constantes d'intégration déterminées à partir des conditions initiales. Aussi, (1.4a-b) peuvent s'écrire sous forme plus compacte comme

$$x(t) = X + \xi \quad \text{et} \quad y(t) = Y + \eta, \quad (1.5)$$

où (ξ, η) sont les coordonnées relatifs reliées à \mathbf{v} à travers

$$\xi = -\frac{v_y}{\omega_c} \quad \text{et} \quad \eta = \frac{v_x}{\omega_c}. \quad (1.6)$$

Combinées ensemble, (ξ, η) définissent un mouvement cyclotron (circulaire, voir Fig. 1-2)⁴ de

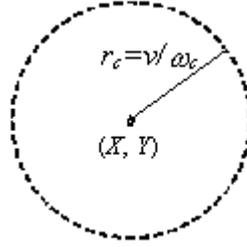


FIG. 1-2 – Mouvement cyclotron effectué par l'électron sous l'effet d'un champ magnétique.

centre (X, Y) , de rayon

$$r_c = \ell_c = v / \omega_c, \quad (1.7)$$

avec v est la vitesse tangentielle à l'orbite, et de fréquence de révolution ω_c appelée aussi pulsation cyclotron

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}. \quad (1.8)$$

³Les électrons sont dynamiquement bi-dimensionnels puisqu'ils sont libres de se déplacer dans un plan.

⁴L'orbite cyclotron est très incomplète à la température ambiante, mais dans le domaine de la température de l'hélium liquide un grand nombre de cycles est parcouru [25].

Classiquement, l'électron peut avoir n'importe quelle vitesse v et se mouvoir sur un rayon quelconque ℓ_c . A l'énergie de Fermi ε_F , la vitesse v coïncide avec v_F et le rayon cyclotron est donné par $\ell_c = v_F/\omega_c$.

Dynamique quantique

Quantiquement l'Hamiltonien de l'électron, libre de se déplacer à deux dimensions dans un champ magnétique perpendiculaire, est donné par

$$h^0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} = \frac{1}{2m^*}(P_x^2 + P_y^2), \quad (1.9)$$

où \mathbf{P} , le moment cinétique, s'écrit en représentation coordonnées comme

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - e\mathbf{A} = -i\hbar\nabla - e\mathbf{A}, \quad (1.10)$$

avec ∇ est l'opérateur différentiel et \mathbf{A} est le potentiel vecteur qui dérive du champ magnétique $\mathbf{B} = \text{Rot}\mathbf{A}$.

Comme les composantes du moment \mathbf{P} en présence d'un champ magnétique ne commutent pas en raison de la non nullité de ce dernier, on a

$$[P_x, P_y] = i\hbar e (\nabla \wedge \mathbf{A}) \cdot \hat{z} = i\frac{\hbar^2}{\ell_B^2}, \quad (1.11)$$

où ℓ_B , indépendant des paramètres du matériau, définit désormais la longueur magnétique⁵

$$\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (1.12)$$

Quantiquement, ξ et η ainsi que X et Y obéissent aux relations de commutation

$$[\xi, \eta] = i\ell_B^2 \quad \text{et} \quad [X, Y] = i\ell_B^2, \quad (1.13)$$

et donc à des incertitudes d'ordre ℓ_B . Ainsi, l'Hamiltonien (1.9) s'écrit en terme de (ξ, η) comme

⁵ ℓ_B est relié au quantum de flux Φ_0 par $\Phi_0 = 2\pi\ell_B^2 B$.

$$h^0 = \frac{\hbar\omega_c}{2\ell_B^2}(\xi^2 + \eta^2). \quad (1.14)$$

Pour la simplification des calculs qui suivront posons :

$$\xi = \ell_B \xi' \quad \text{et} \quad \eta = \ell_B \eta', \quad (1.15)$$

tel que $[\xi', \eta'] = i$ et par conséquent

$$h^0 = \frac{\hbar\omega_c}{2}(\xi'^2 + \eta'^2). \quad (1.16)$$

Soient a et a^+ les opérateurs hermitiques conjugués $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi' + i\eta')$ et $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi' - i\eta')$, vérifiant $[a, a^+] = 1$. Par substitution de ces derniers dans (1.16), on montre que h^0 est du type oscillateur harmonique :

$$h^0 = \frac{\hbar\omega_c}{2}(aa^+ + a^+a), \quad (1.17)$$

et que par conséquent le spectre correspondant consiste en niveaux d'énergie équidistants⁶

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}). \quad (1.18)$$

Ces niveaux discrets définissent les *niveaux de Landau* connus aussi par les *états magnétiques* [29]. $n = 0, 1, 2, \dots$ dénote les états ayant le même nombre quantique (n) appelés niveaux de Landau (Fig. 1-3).

Cependant, comme ε_n est indépendante du vecteur d'onde k , la vitesse de groupe est nulle ($v_{nk} = 0$)⁷ et les niveaux de Landau sont infiniment dégénérés. Le degré de leur dégénérescence par unité de surface est donné par la densité du flux du quanta $N_B = \frac{eB}{h} = \frac{1}{2\pi\ell_B^2}$.

Dans la jauge de Landau où le potentiel vecteur a une seule composante non nulle $\mathbf{A} = -By\mathbf{i}$,

⁶En présence de confinement dans la direction z , l'énergie ε vérifie la relation de dispersion correspondante $\varepsilon = \varepsilon_m + \varepsilon_n$ avec l'indice m est relatif aux niveaux suivant z . Mais généralement à de faibles températures avec de faibles densités de porteurs seul le plus bas niveau ($m = 1$) dans la direction perpendiculaire z est occupé, les autres ont un rôle insignifiant. C'est ainsi que la troisième dimension, défini par l'axe z , sera négligée et le problème se réduit à l'étude d'un système à deux dimensions dans le plan x, y

⁷Bien que les fonctions d'ondes sont des ondes planes, leur vitesse de groupe est nulle puisque ε est indépendante de k . Si nous étions portés à construire un paquet d'onde en dehors de ces états localisés, celui-là ne se déplacerait pas.

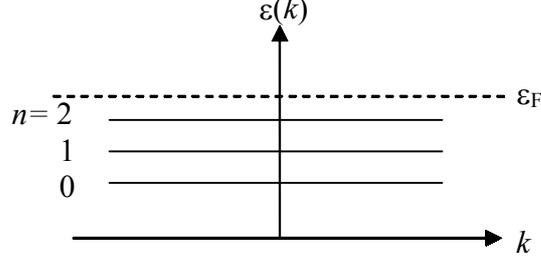


FIG. 1-3 – Spectre d'énergie en présence d'un champ magnétique.

l'Hamiltonien (1.9) s'écrit

$$h^0 = \frac{1}{2m^*} [(p_x + eBy)^2 + p_y^2]. \quad (1.19)$$

Par ailleurs, les états de Landau étendus suivant x et localisés suivant y , solution de l'équation stationnaire $h^0\varphi = \varepsilon\varphi$, sont le produit d'onde plane et fonction transverse :

$$\varphi_{nk}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \chi(y - Y), \quad (1.20)$$

où $Y = \ell_c^2 k$ est une constante de mouvement. $\chi(y - Y)$ est la fonction propre solution de l'équation réduite :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m^* \omega_c^2}{2} (y - Y)^2 \right] \chi(y - Y) = \varepsilon \chi(y - Y), \quad (1.21)$$

donnée ici par [30, 31]

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}} \ell_B n!}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\ell_B^2}\right) H_n\left(\frac{\sqrt{2}y}{\ell_B}\right), \quad (1.22)$$

avec $H_n(y)$ est le polynôme d'Hermite, ℓ_B est la longueur magnétique définie par (1.12)⁸ et $\chi_n(y)$ vérifie : $\lim_{|y| \rightarrow \infty} \chi_n(y) = 0$.

⁸ $\ell_c = \sqrt{2n+1} \ell_B$ est le rayon classique de l'orbite cyclotron qui à l'énergie (ground state) $\varepsilon_0 = \frac{\hbar \omega_c}{2}$ coïncide avec ℓ_B ($\ell_c = \ell_B$).

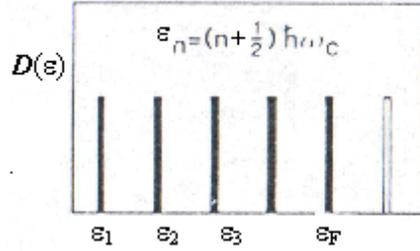


FIG. 1-4 – Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie en l'absence de confinement dans un champ magnétique non nul perpendiculaire. Les niveaux de Landau remplis sont en noir.

Densité d'états

Le nombre d'états de Landau est le même dans chaque niveau de Landau. Il est égal à un état par flux quantique h/e à travers l'échantillon. La densité d'états, i.e. le nombre d'états d'énergie $\varepsilon_\alpha \leq \varepsilon$ par unité de surface est défini par

$$n(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} \mathcal{D}(\varepsilon') d\varepsilon' \quad \text{et} \quad \mathcal{D}(\varepsilon) \propto \sum_{\alpha} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}), \quad (1.23)$$

Comme conséquence de la dégénérescence des niveaux de Landau, on montre [32] qu'en l'absence de confinement, la densité d'états $\mathcal{D}(\varepsilon)$ a la forme de pics δ -equi-distants (Fig. 1-4) (distances de $\hbar\omega_c$).

$$\mathcal{D}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n). \quad (1.24)$$

Soulignons que dans un champ magnétique nul ($\mathbf{B} \rightarrow 0$), la densité d'états (1.24) se réduit à

$$\mathcal{D}_0(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} & \text{pour } \varepsilon > 0 \\ 0 & \text{pour } \varepsilon < 0 \end{cases}, \quad (1.25)$$

une densité indépendante de l'énergie, illustrée par la Fig. (1-5)⁹ :

⁹Remarquons qu'à température nulle le second niveau commence à être peuplé si ε_F dépasse son énergie.

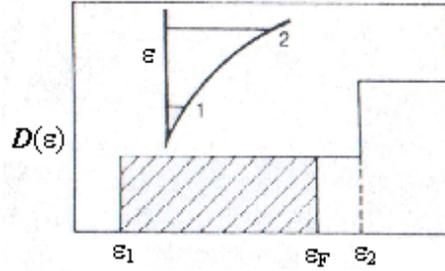


FIG. 1-5 – Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie en l'absence de confinement dans un champ magnétique nul. La partie hachurée représente un continuum d'états.

1.3.2 Systèmes confinés

Discutons la quantification des niveaux d'énergie due à un confinement géométrique et l'influence du champ magnétique sur des états confinés géométriquement.

Nous considérons ici un gaz d'électrons à deux dimensions confiné dans la direction y par un potentiel $V_c(y)$ et soumis à un champ magnétique perpendiculaire. L'Hamiltonien propre (1.19) sera remplacé dans ce cas par

$$h^0 = \frac{1}{2m^*} [(p_x + eBy)^2 + p_y^2] + V_c(y). \quad (1.26)$$

Comme le moment p_x commute avec h^0 , pour chaque valeur propre $\hbar k$ de p_x , l'Hamiltonien (1.26) a un spectre discret de valeurs propres $\varepsilon_n(k)$ (avec $n = 0, 1, \dots$) correspondant au fonctions propres (1.20). Cependant, la fonction transverse ne peut être exactement déterminée que si l'on connaît le type de confinement.

Généralement, les potentiels les plus fréquemment utilisés pour modéliser analytiquement un confinement latéral sont le potentiel parabolique et le potentiel puits carré [30, 32]. Dans le cas d'un potentiel de forme quelconque, il est difficile, voir impossible, d'établir une expression exacte des états et énergies propres.

Potentiel parabolique

Le potentiel parabolique constitue un très bon exemple pour décrire le confinement existant. Posons $V_c(y) = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2y^2$. On montre que ce confinement laisse la forme de l'équation (1.21)

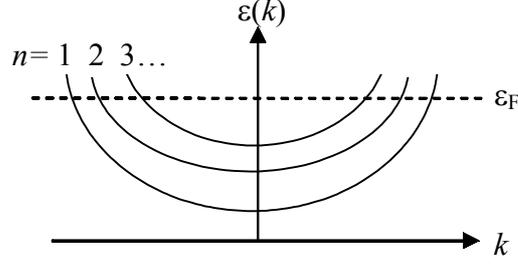


FIG. 1-6 – Spectre d'énergie dans un potentiel de confinement parabolique.

invariante en changeant ω_c en $\omega_{c0} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}$ et Y en $Y' = \frac{\omega^2}{\omega_{c0}^2} Y$. Par conséquent, les valeurs propres correspondantes ne sont plus dégénérées¹⁰ ; elles se présentent comme suit

$$\varepsilon_n(k) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(B)}, \quad (1.27)$$

où $m^*(B) = \frac{\omega_0^2}{\omega_{c0}^2} m^*$ et la vitesse de groupe $v_n(k)$ est non nulle : $v_n(k) = \frac{\hbar k}{m^*(B)}$. En terme de Y , l'énergie (1.27) dépend alors de la position du centre du cyclotron, d'où la levée de la dégénérescence.

On pourrait croire que l'effet du champ magnétique est simplement d'amplifier la masse par un facteur qui dépend des fréquences relatives ω_0 et ω_c . Dans un champ nul, la fréquence cyclotron est nulle et le spectre d'énergie est $\varepsilon_n(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. Cependant, si le champ magnétique est introduit (switched on), on montre qu'à chaque fois que celui-là croît, la fréquence cyclotron devient de plus en plus large et la masse croît. Conséquentment, le spectre de l'énergie devient plus comprimé [31] (Fig. 1-6) mais les niveaux d'énergies restent également espacés.

En ce sens, les fonctions transverses (1.22) seront remplacées par

$$\chi_{nk}(y) = \chi_n(y - Y') = \frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}} \ell_1 n!}} \exp\left(-\frac{(y - Y')^2}{2\ell_1^2}\right) H_n\left(\frac{\sqrt{2}(y - Y')}{\ell_1}\right), \quad (1.28)$$

où $\ell_1 = \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_{c0}}\right)^{\frac{1}{2}}$ est un nouveau rayon, interpolant entre $\ell_0 = \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_0}\right)^{\frac{1}{2}}$ et $\ell_B = \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_c}\right)^{\frac{1}{2}}$.

Une des particularités de ce confinement est le fait que son diamètre d'action n'est pas bien

¹⁰En ajustant le potentiel $V_c(y)$ à l'Hamiltonien libre h^0 , la dégénérescence des niveaux de Landau disparaît.

déterminé. Il est donné par la largeur de la région où la fonction d'onde est non nulle et dépend de l'énergie (à travers k). Ceci étant, le champ magnétique affecte aussi les fonctions en les changeants profondément.

Pour un bon aperçu sur la nature de la fonction d'onde en présence d'un champ magnétique, on a utilisé les trajectoires classiques qui s'avèrent plus visibles dans un confinement puits carré.

Potentiel puits carré

Dans ce cas, le potentiel de confinement est donné par¹¹,

$$V_c(y) = \begin{cases} 0 & \text{pour } \frac{-W}{2} \leq y \leq \frac{W}{2} \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}, \quad (1.29)$$

avec W la largeur de la structure confinée.

Dans un puits carré, le couplage du confinement et du champ magnétique n'est pas triviale. Elle a un effet très subtil sur le spectre d'énergie comme on peut le voir en considérant un système bi-dimensionnel (1.9) et en adoptant la jauge de Landau. Dans un puits carré, on a affaire à de nouvelles conditions aux limites : $\chi_n(-\frac{W}{2}) = \chi_n(\frac{W}{2}) = 0$.

Pour la commodité des calculs [30], l'introduction du changement de variables au niveau de (1.26) :

$$\xi = y \frac{\sqrt{2}}{\ell_B}, \quad \Lambda_y = W \frac{\sqrt{2}}{\ell_B}, \quad \xi_k = k \sqrt{2} \ell_B, \quad \epsilon = \frac{\epsilon}{\hbar \omega_c}, \quad (1.30)$$

de sorte que si la largeur du système est assez grande devant la longueur magnétique ℓ_B , $\Lambda_y \gg 1$, dans les régions où $|\xi_k| \ll \Lambda_y/2$ (appelée limite de Landau) ainsi que pour $|\xi_k| \approx \Lambda_y/2$ et $\xi_k^2 \rightarrow \infty$ (appelée limite de bords), a permis une simplification majeure du problème où une solution analytique approximative pour le spectre d'énergie était bien dérivable, Fig. 1-7.

En effet, dans la limite de Landau, on montre [30] que

$$\epsilon_{nk} = \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{n!} \left(\xi_k + \frac{\Lambda_y}{2}\right)^{2n+1} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\xi_k + \frac{\Lambda_y}{2}\right)^2\right), \quad (1.31)$$

¹¹Pour des petites valeurs de l'énergie le potentiel est toujours parabolique. Pour des énergies plus élevées, le mur du potentiel devient plus pointu définissant un puits carré.

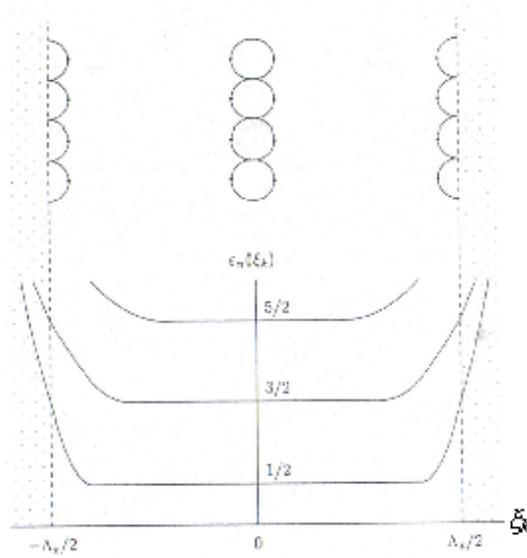


FIG. 1-7 – Mouvement cyclotron en présence d'un confinement puit carré et spectre d'énergie correspondant pour $\Lambda_y \gg 1$ [30].

avec le terme en exponentielle représente une simple correction à l'énergie (1.18) obtenue pour $\Lambda_y \rightarrow \infty$. Dans ce cas les états sont donnés par le polynôme d'Hermite (1.22).

Cependant, si ξ_k est tous près des bords du système, $|\xi_k| \approx \Lambda_y/2$, on montre que

$$\epsilon_{nk} = \left(2n + \frac{3}{2}\right) \pm \frac{\sqrt{2}}{\pi} \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2n+1}{n!} \left(\xi_k \mp \frac{\Lambda_y}{2}\right). \quad (1.32)$$

Ainsi les fonctions d'ondes correspondantes ont des amplitudes considérables près des bords, et donc près de $\pm\Lambda_y/2$. Ils sont appelés *états de bords*.

Enfin, dans la limite où $\xi_k^2 \rightarrow \infty$, on montre que

$$\epsilon_{nk} \approx \frac{\xi_k^2}{4}. \quad (1.33)$$

Ici les fonctions d'ondes sont fortement localisées près de $\pm\Lambda_y/2$. Lorsque $\xi_k > 0$, le vecteur d'onde dans la direction x est positif alors que pour $\xi_k < 0$, le vecteur d'onde est dans la direction opposée. Les états de bords ont la propriété de chiralité. Le champ magnétique permet une forte séparation spatiale des états énergiquement dégénérés. Pour un système vérifiant $\Lambda_y \gg 1$, les

états de bords localisés à $\pm\Lambda_y/2$ ne se mélangent pas.

Classiquement, la trajectoire peut être une orbite cyclotron, une orbite ouverte (Fig. 1-8a) ou simplement une trajectoire traversante (Fig. 1-8b) selon que l'électron n'interagit pas avec les deux bords de la structure, interagit avec un seul bord ou avec les deux.

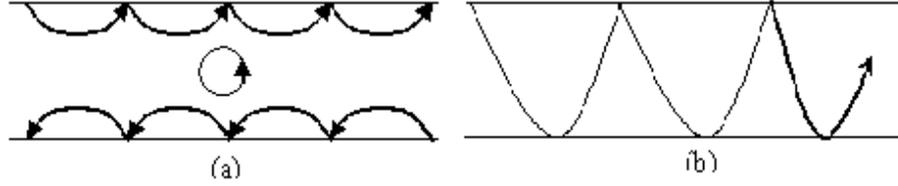


FIG. 1-8 – Mouvement du point de vue classique en présence de confinement : (a) orbites cyclotron et orbites ouvertes, (b) trajectoires traversantes dans les deux directions (ici une seule direction est montrée).

Ainsi, la limite de Landau correspond à des orbites cyclotrons fermés se trouvant à l'intérieur du système. Ils ont une vitesse de groupe nulle. Dans le cas intermédiaire avec $|\xi_k| \approx \Lambda_y/2$, l'orbite cyclotron commence à fuir au long des bords du système de façon opposée, Fig. 1-8a. Enfin, à la limite $\xi_k^2 \rightarrow \infty$, le nombre d'orbites participantes se réduit et les particules se propagent pratiquement au long des bords sans pénétrer le milieu du système (Fig. 1-8a).

Le spectre d'énergie présenté à la Fig. 1-7 montre que près du centre du système (avec $k \rightarrow 0$), les énergies sont indépendantes de k et les états sont approximativement des états de Landau. Alors que, les orbites ouvertes correspondent quantiquement aux états de bords séparés dans l'espace et interagissant avec un seul bord.

Cette étude, nous permet de constater l'importance du modèle de confinement puits carré. En effet, dans le cas du confinement parabolique, la séparation des états en des états de bords et massifs est impossible. Même pour $k \approx 0$, le spectre change de forme à cause du confinement et la distance entre énergies est égale $\hbar\sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}$ au lieu de $\hbar\omega_c$. En outre, pour $k \neq 0$ les états ayant des vecteurs d'ondes positifs et négatifs ne sont pas automatiquement séparés.

Cependant, un calcul plus général est toujours souhaité, chose que nous proposons dans les chapitres 2, 3, et 5.

Intensité du champ magnétique et trajectoires

Ayant admis le cas où la largeur du système est plus grande que sa longueur magnétique, la question qui se pose concerne la borne supérieure et inférieure du champ magnétique qui permet la formation de ces différents types de trajectoires? Pour y répondre, mentionnons d'abord qu'en l'absence d'un champ magnétique les échelles caractéristiques du système sont le libre parcours moyen et l'intensité du potentiel désordonné $1/k_F \ell$. Dans un champ magnétique non nul, le nombre d'ondes de Fermi n'a plus de sens ni même le libre parcours moyen. On parle maintenant de la longueur caractéristique ℓ_c et de l'échelle d'énergie caractéristique $\hbar\omega_c$. En effet, on montre que les orbites cyclotron ont un diamètre très petit devant la largeur du système $2\ell_c < W$ [23]. Mais en relation avec l'intensité du champ magnétique, celui-là doit vérifier¹²

$$2\ell_c < W \implies B > B_{crit} = \frac{2\hbar k_F}{eW}. \quad (1.34)$$

Cette limite est connue aussi sous le nom de limite de Landau puisque quantiquement $\varepsilon \sim \varepsilon_n = \hbar\omega_c (n + 1/2)$. En revanche, les orbites traversantes (interagissantes avec les deux bords, Fig. 1-9b) correspondent à un diamètre cyclotron plus large que W et par conséquent correspondent à $B < B_{crit}$. Dans le cas intermédiaire avec $2\ell_c \approx W$, les orbites commencent à s'échapper au long des bords dans des directions opposées comme pour les orbites cyclotrons.

En ce sens, on dit que le champ magnétique B est faible si $B < B_{crit}$ (Fig. 1-9a) et intense si $B \gtrsim B_{crit}$ (Fig. 1-9b).

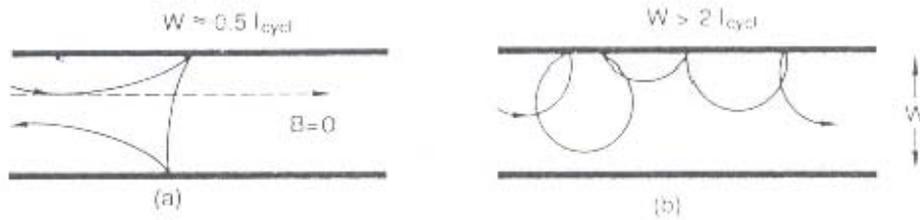


FIG. 1-9 – Trajectoire de l'électron en présence de confinement : (a) le champ magnétique est faible, (b) le champ magnétique est intense.

¹²Il est dérivé classiquement en admettant que la largeur W est plus grande que le diamètre cyclotron $2\hbar k_F/\omega_c$ (à l'énergie de Fermi).

Densité d'états

Dénotée par $\mathcal{D}_n^+(\varepsilon)$, la densité d'états d'un niveau n par unité de surface, avec $k > 0$, est donnée par

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_n^+(\varepsilon) &= 2 \frac{M}{2\pi\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{2M(\varepsilon - \varepsilon_n)} \right)^{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}_n^-(\varepsilon) \\ &= \frac{2}{\hbar v(k, B)},\end{aligned}\tag{1.35}$$

où le facteur 2 tient compte de la dégénérescence du spin. On a admis dans ce cas que le spectre d'énergie (indépendamment du type de confinement) est symétrique ($\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(-\mathbf{k})$) et que $\lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow \infty} \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \infty$. Dans ce cas, la densité d'états totale résultante s'écrit $\mathcal{D}(\varepsilon) = 2 \sum_n \mathcal{D}_n^+(\varepsilon)$, avec n dénote les états ayant $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, voir Fig. 1-10.

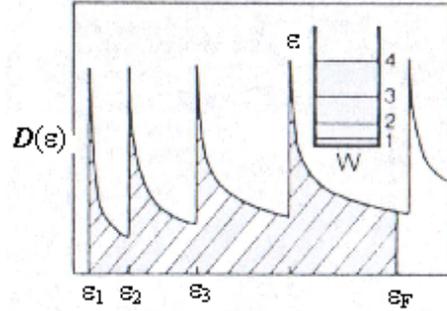


FIG. 1-10 – Variation de la densité d'états en fonction de l'énergie en présence de confinement et en l'absence de champ magnétique. Ici le confinement est du type puits carré.

A la limite où le champ magnétique B s'annule, la fréquence cyclotron s'annule et l'énergie totale de l'électron dans le nième niveau est donnée par $\varepsilon_n(k) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2}{2m^*}k^2$ avec $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ si le confinement est parabolique et $\varepsilon_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m^*W}$ si le confinement est du type puits carré. Conséquemment, la densité d'états $\mathcal{D}_n^+(\varepsilon)$ est globalement identique à (1.35) avec la seule différence est que M est remplacé par m^* , ou dans un autre sens la vitesse de groupe ne dépend plus du champ B ,

$$\mathcal{D}_n^+(\varepsilon) = 2 \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*(\varepsilon - \varepsilon_n)} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{2}{\hbar v(k)} = \mathcal{D}_n^-(\varepsilon).\tag{1.36}$$

En conclusion, dans un champ magnétique perpendiculaire, le confinement permet à la densité d'états d'évoluer graduellement de la forme effective zéro-dimension $(0d)^{13}$ de la Fig. 1-4 (équation (1.24)) à la forme uni-dimensionnelle (1d) de la Fig. 1-10 (équation (1.35)).

1.3.3 Confinement et désordre

Faisons le point sur le cas le plus réaliste d'un système désordonné (impuretés) immergé dans un champ magnétique \mathbf{B} . A faible température, l'Hamiltonien est donné par (1.2) où $V(\mathbf{r})$ définit le potentiel dû à l'interaction électron-impuretés et h^0 est donné par (1.26). On montre [33] que la dégénérescence des états avec différents (X, Y) est levée et le spectre d'énergie en présence de confinement carré se présente comme suit (Fig. 1-11).

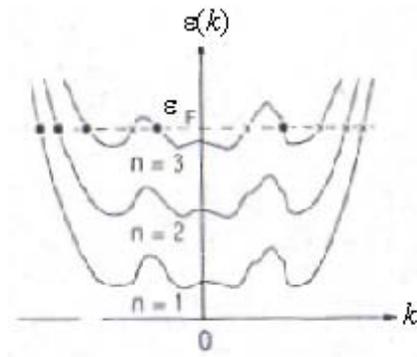


FIG. 1-11 – Spectre d'énergie : niveaux de Landau dans un confinement puits carré en présence de désordre.

Le potentiel aléatoire donne raison à l'élargissement des niveaux d'énergie. En ce sens, la densité d'états est proportionnelle à $\propto \text{Tr} \delta(h - \varepsilon)$, Fig. 1-12.

Cependant en présence d'impuretés la valeur de B_{crit} retrouvée au préalable, n'est plus valide. Comme la nature du transport dans un champ magnétique dépend, en présence de confinement, de l'intensité de ce dernier, l'échelle $2\ell_c/W$ examinée auparavant doit maintenant tenir compte de l'existence du désordre, et alors de la longueur caractéristique du désordre. Qualitativement, on associe aux impuretés la longueur ℓ appelée libre parcours moyen donnée par le produit de la vitesse de Fermi par le temps de relaxation, $\ell = v_F \tau$.

¹³0d en présence d'un champ magnétique définit une non éventration des pics.

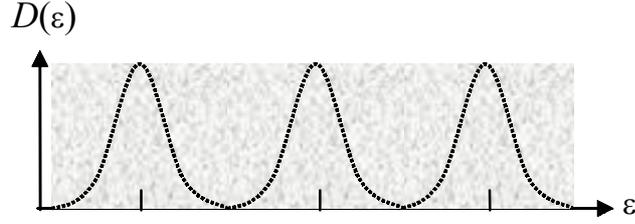


FIG. 1-12 – Densité d'états en présence de confinement et de désordre.

Ainsi, on montre que $2\ell_c/W$ est équivalente à considérer la quantité sans dimension $\omega_c\tau$ [23] de sorte que :

- Si $\omega_c\tau \gtrsim 1$, l'électron doit compléter ou parcourir un nombre moyen de rayons cyclotrons avant que son moment ne relaxe en raison de collisions avec les impuretés. Ceci étant, le processus de retour est supprimé (plus de détails dans chapitre 4), Fig. 1-13, et le nombre de niveaux de Landau $N \approx \frac{\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \approx k_F \frac{\ell_c}{2}$ diminue linéairement avec l'intensité du champ magnétique [23]. Ainsi $\omega_c\tau \gtrsim 1$ définit désormais la limite d'un champ magnétique intense [34].

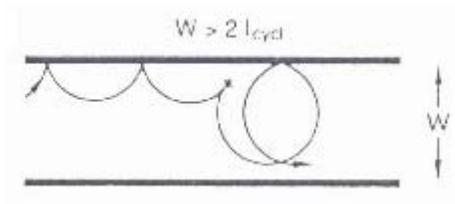


FIG. 1-13 – Trajectoire de l'électron dans un champ magnétique intense en présence d'impuretés.

- Si $\omega_c\tau < 1$: les électrons peuvent compléter seulement une petite partie de la trajectoire entre deux collisions. $\omega_c\tau < 1$ définit alors la limite d'un champ magnétique faible et/ou nul¹⁴, Fig. 1-14.

¹⁴Champ magnétique faible a un effet négligeable sur la densité d'états à l'énergie de Fermi [34].

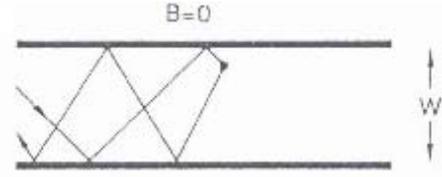


FIG. 1-14 – Trajectoire de l'électron dans un champ magnétique nul en présence d'impuretés.

1.4 Conduction

Après avoir mis le point sur les concepts régissant la réponse de l'électron dans un 2DEG, à un champ magnétique, nous nous intéresserons dans ce qui suit au phénomène de transport dans de tels systèmes. Nous examinerons en premier la théorie de conduction dans les métaux proposée par P. Drude [35] il y a plus d'un siècle. Par suite nous exposerons la vision de Landauer [10].

1.4.1 Modèle de Drude : Approche semi-classique

En s'appuyant sur la théorie cinétique des gazes neutres dilués, Drude en 1900 [35] fut le premier à décrire le phénomène de conduction électrique et thermique dans les métaux. L'idée était de considérer le métal comme un gaz d'électrons et conséquemment d'admettre que :

- Entre deux collisions, l'électron se comporte comme une particule classique soumise seulement à un champ ou forces extérieures comme l'incite la loi de Newton tout en négligeant les champs pouvant surgir des autres électrons ou ions : Voir approximation des électrons libres et des électrons indépendants.

- Les collisions par les défauts, comme dans la théorie cinétique, sont des événements instantanés qui changent brutalement la vitesse de l'électron. Drude admet que cette collision (de l'électron) se produit avec une probabilité $\frac{1}{\tau}$ par unité de temps¹⁵ avec τ est le temps moyen entre deux collisions (temps pendant lequel le champ agit librement sur les porteurs) ; dépendant fortement de la température [34].

- Les électrons sont supposés atteindre l'équilibre thermique avec l'entourage seulement à

¹⁵L'électron subit une collision dans un intervalle de temps dt avec une probabilité $\frac{dt}{\tau}$.

travers les collisions.

En testant ainsi sa théorie¹⁶ relativement à la loi d'Ohm $\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E}$, l'électron accéléré sous l'effet d'un champ électrique \mathbf{E} faible, entre deux collisions successives, acquière une vitesse \mathbf{v} . Drude montra, après quelques manipulations algébriques, que la conductivité électrique résultante est donnée par

$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m^*} \tau = \frac{e^2}{h} k_F^{d-1} \ell, \quad (1.37)$$

avec ℓ est le libre parcours moyen, n est la densité ou concentration en électrons (nombre d'électrons N par unité de surface), k_F est le vecteur d'onde de Fermi, et d est la dimension du système considéré.

Il est évident que le courant induit par le champ électrique appliqué est porté par les électrons de conduction (chacun acquière une vitesse moyenne). Néanmoins pour déterminer la conductivité, il suffit de considérer la réponse des électrons, proches du niveau de Fermi, au champ électrique. En effet, les états qui sont à l'énergie $k_B T$ au dessous de l'énergie de Fermi sont remplis. Par suite, en réponse à un champ électrique faible seule la distribution des électrons au long d'états proches de ε_F est modifiée par rapport à sa valeur à l'équilibre donnée par la distribution de Fermi-Dirac.

En présence d'un champ magnétique dans la théorie, le calcul de la conductivité σ est peu différent. Pour ce faire, Drude procéda ainsi : A l'instant t , la vitesse moyenne de l'électron est donnée par $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}(t)}{m^*}$ avec \mathbf{p} est la quantité de mouvement totale de chaque électron au même instant. Mais qu'elle serait cette quantité à un temps ultérieur $t + dt$?

Un électron pris au hasard à un temps t , peut subir une collision avant le temps $t + dt$ avec une probabilité $\frac{dt}{\tau}$, et survivre au temps $t + dt$ sans subir de collisions avec la probabilité $(1 - \frac{dt}{\tau})$. D'autre part, si l'électron ne subit pas de collisions, il évolue alors sous l'influence de la force totale $\mathbf{f}(t)$ (force moyenne par électron due au champ électrique et magnétique) et acquiert pendant le temps dt un moment $\mathbf{f}(t)dt + \mathcal{O}(dt)^2$.

Conséquemment, la contribution des électrons qui n'entrent pas en collision, dans l'intervalle $[t, t + dt]$, au moment par électron est donnée par le produit de $(1 - \frac{dt}{\tau})$ par le moment moyen par électron $[\mathbf{p}(t) + \mathbf{f}(t)dt + \mathcal{O}(dt)^2]$.

¹⁶C'est une théorie semi-classique, puisque le mouvement de l'électron, obéissant à la distribution Fermi-dirac, est traité classiquement.

En négligeant ainsi la contribution des électrons qui subissent des collisions entre t et $t + dt$, au moment $\mathbf{p}(t + dt)$, on a

$$\begin{aligned}\mathbf{p}(t + dt) &= \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) [\mathbf{p}(t) + \mathbf{f}(t)dt + \mathcal{O}(dt)^2] \\ &= \mathbf{p}(t) - \frac{dt}{\tau}\mathbf{p}(t) + \mathbf{f}(t)dt + \mathcal{O}(dt)^2,\end{aligned}\tag{1.38}$$

avec $\mathcal{O}(dt)^2$ est la correction d'ordre $(dt)^2$ due aux électrons qui ont subi des collisions dans l'intervalle $[t, t + dt]$.

En divisant (1.38) par dt qu'on fait tendre par la suite vers zéro, on obtient

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\frac{\mathbf{p}(t)}{\tau} + \mathbf{f}(t),\tag{1.39}$$

qui en terme de la variable position x , se présente comme suit

$$m^*\ddot{\mathbf{x}} + \frac{m^*}{\tau}\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t).\tag{1.40}$$

Ceci étant, les collisions ont pour rôle d'amortir le mouvement de l'électron; l'amortissement est traduit par le terme $\frac{\mathbf{p}(t)}{\tau}$ dans l'équation de moment et le terme $\frac{m^*}{\tau}\dot{\mathbf{x}}$ dans l'équation de mouvement.

1.4.2 Magnétotransport et effet Hall

L'effet Hall est un phénomène classique qui a été découvert par le physicien E. H. Hall en 1879 au moment où il cherchait à déterminer la force exercée par un courant parcourant un fil métallique en présence d'un champ magnétique \mathbf{B} [36].

Dans cette expérience, Hall considéra un barreau placé dans un champ électrique longitudinal E_x et un champ magnétique perpendiculaire $\mathbf{B} = B\hat{z}$, Fig. 1-15.

Le champ électrique appliqué entre les extrémités crée une densité de courant électrique le long du barreau. La vitesse d'entraînement juste après l'application du champ électrique est montrée en (b). La déviation dans la direction $-y$ est causée par le champ magnétique. Conséquemment, des électrons s'accumulent sur une face du barreau et un excès d'ions positifs s'établit sur l'autre face jusqu'à ce que le champ électrique transversal ou champ de Hall

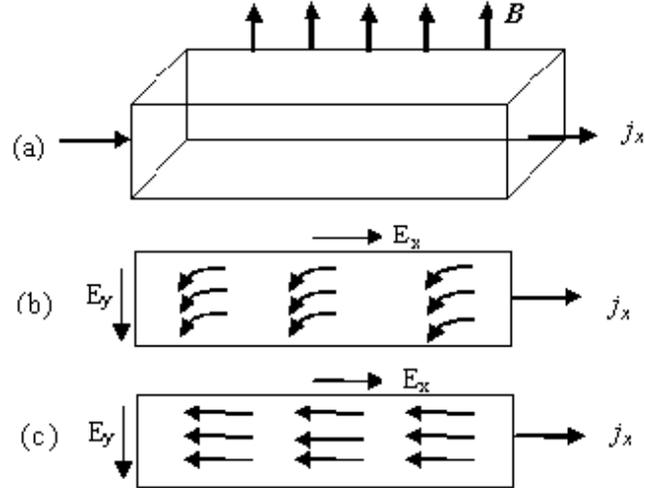


FIG. 1-15 – Géométrie standard de l'effet Hall : (a) le champ électrique est appliqué entre les extrémités ; (b) la déviation dans la direction $-y$ causée par le champ magnétique ; (c) le champ électrique transversal compense la force due au champ magnétique [25].

compense juste la force due au champ magnétique.

Hall s'est intéressé à connaître si la force de Lorentz est exercée sur le fil en entier ou seulement sur les électrons en mouvement à l'intérieur de ce fil. En appliquant le résultat de la théorie de Drude (1.39) pour $\mathbf{f}(t) = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ ¹⁷ force moyenne ressentie par chaque électron, appelée aussi force de Lorentz, on écrit

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{m^*}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{\mathbf{v}}{\tau}. \quad (1.41)$$

Une fois le régime stationnaire établi ($\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{0}$), (1.41) se réduit à

$$-e\mathbf{v} \times \mathbf{B} - \frac{m^*\mathbf{v}}{\tau} = e\mathbf{E}. \quad (1.42)$$

Pour que l'hypothèse de la réponse linéaire soit justifiée, le champ électrique appliqué doit être de faible intensité. En ce sens, le mouvement de l'ensemble des porteurs de charge se traduit

¹⁷Dans ce cas \mathbf{E} et \mathbf{B} sont perpendiculaires à la vitesse \mathbf{v} et le mouvement résultant est hélicoïdal [25, 34].

localement par le vecteur densité de courant donné par

$$\mathbf{j} = ne\mathbf{v} = \sigma\mathbf{E}, \quad (1.43)$$

où n est la densité de porteurs, σ est la conductivité décrite par la réponse de la densité de courant dans un champ magnétique au champ électrique. Comme le courant n'est plus dans la direction du champ électrique \mathbf{E} à cause de la force de Lorentz, la conductivité n'est plus un scalaire mais plutôt un tenseur :

$$j_\mu = \sum_\nu \sigma_{\mu\nu} E_\nu. \quad (1.44)$$

En représentation matricielle, (1.42) s'écrit

$$\begin{pmatrix} \frac{m^*}{e\tau} & -B \\ B & \frac{m^*}{e\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (1.45)$$

où v_x, v_y et E_x, E_y sont les composantes des vecteurs vitesse et champ électrique appliqué, respectivement. Sous forme plus appropriée en introduisant la densité de courant (1.44), (1.45) s'écrit

$$\begin{pmatrix} \frac{m^*}{e^2 n \tau} & \frac{-B}{en} \\ \frac{B}{en} & \frac{m^*}{e^2 n \tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (1.46)$$

où la matrice à gauche définit le tenseur résistivité dont les éléments diagonaux et non diagonaux sont

$$\rho_{xx} = \sigma_0^{-1} = \rho_{yy} = \frac{m^*}{ne^2\tau}, \quad \text{et} \quad \rho_{xy} = -\rho_{yx} = -\frac{B}{en}, \quad (1.47)$$

et σ_0 est la conductivité électrique en l'absence du champ magnétique (1.37). Ceci étant, dans ce modèle de friction, ρ_{xx} est indépendante du champ magnétique, alors que ρ_{xy} croît de façon monotone avec le champ magnétique. Autrement, la théorie de Drude montre que la résistivité longitudinale est indépendante du champ magnétique et en contre partie, que la résistivité Hall est indépendante de la friction mais dépendante du champ magnétique.

Sachant que le tenseur conductivité $\sigma_{\mu\nu}$ est relié au tenseur résistivité via $\sigma_{\mu\nu} = (\rho^{-1})_{\mu\nu}$, et

par conséquent

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}, \quad \text{et} \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}, \quad (1.48)$$

par substitution alors de (1.47) dans (1.48), on déduit que

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2}, \quad \text{et} \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{en}{B} \frac{(\omega_c \tau)^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} = \frac{en}{B} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau}. \quad (1.49)$$

Nous différons la discussion du cas $\omega_c \tau \geq 1$ au chapitre 4, alors que nous nous intéresserons dans le reste de ce chapitre au cas où $\omega_c \tau < 1$.

Remarquons que dans cette limite $\sigma_{xx} \simeq \sigma_0 \rightarrow \infty$ si $\tau \rightarrow \infty$. C'est à dire que la magnétoconductivité diagonale diverge en l'absence de collisions. C'est ainsi qu'il devient apparent que le modèle de friction permet l'obtention d'une conductivité diagonale non divergente à des champs nuls et aussi non nulle à des champs intenses.

Relations d'Onsager

Généralement les processus naturels sont irréversibles et seules les transformations infiniment lentes peuvent être réversibles [37]. Onsager [38] montra qu'une classe générale de relations de réciprocité peuvent être dérivées du principe de réversibilité microscopique. Exemple : les équations fondamentales gouvernant le mouvement de particules individuelles sont symétriques par rapport au futur et au passé ; c'est à dire invariantes par renversement du temps.

Un des plus importants résultats du travail d'Onsager concerne l'expression du tenseur conductivité électrique (quantité intrinsèque) en présence d'un champ magnétique statique extérieur. Cette relation définit qu'en chaque point d'un milieu matériel :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{B}) = [\boldsymbol{\sigma}(-\mathbf{B})]^t, \quad (1.50)$$

où t définit le transposé.

En effet, en revenant sur la définition des conductivités σ_{xx}, σ_{xy} (1.49) dans la structure de Hall (Fig. 1-15), il est apparent que la conductivité longitudinale et la conductivité Hall sont

bien invariantes, i.e. symétriques par renversement du champ magnétique

$$\sigma_{xx}(\mathbf{B}) = \sigma_{xx}(-\mathbf{B}) \quad \text{et} \quad \sigma_{xy}(\mathbf{B}) = \sigma_{yx}(-\mathbf{B}). \quad (1.51)$$

Cette symétrie se traduit par le fait que le système global est invariant par rotation.

1.4.3 Inconsistances de la théorie de Drude

Bien que la théorie de Drude ait été marquée d'un grand succès¹⁸ [39], il s'avère qu'elle souffre d'inconsistances en raison des hypothèses irréalistes admises :

- L'introduction de la masse effective est complètement artificielle puisqu'elle est utilisée sans en discuter l'origine.

- Le temps de relaxation τ entre deux collisions et la force $\mathbf{f}(t)$ sont automoyennants ; c'est à dire ils sont les mêmes pour tous les porteurs indépendamment de leurs énergies.

- Aussi τ est supposé être indépendant du champ \mathbf{B} . Cette approximation peut être justifiée pour des champs faibles mais non intenses.

- Certes la théorie de Drude a affirmé les observations de Hall concernant surtout la non dépendance de ρ_{xx} en le champ \mathbf{B} ($\rho_{xx}(\mathbf{B}) = \rho_{xx}(0) = \text{cte}$), l'expérience a souligné l'existence d'une variété de métaux où ρ_{xx} dépend de \mathbf{B} .

- La théorie de Drude décrit le magnéto-transport dans le cas où le champ magnétique est faible. Néanmoins, von Klitzing [19] observa un comportement tout à fait différent à des champs intenses. Ainsi, les résultats de Drude sont qualitativement corrects en dehors du régime de Hall quantique.

- Enfin, expérimentalement on mesure la conductance et non pas la conductivité puisque la différence entre eux est fondamentale. La conductivité est une grandeur locale qui relie la densité de courant au champ électrique en un point de l'échantillon, $j(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r})E(\mathbf{r})$. Alors que la conductance est une quantité globale qui relie le flux de courant à la chute du potentiel entre les bornes de l'échantillon $I = GV$.

En effet, dans les systèmes mésoscopiques, le transport demeure cohérent tout au long de la direction de propagation. Par conséquent, le comportement ohmique est brisé et la conductivité

¹⁸Le modèle de Drude est toujours utilisé comme un moyen pratique permettant d'avoir une idée rapide sur des problèmes qui exigent une analyse complexe et considérable.

n'est pas une quantité intrinsèque mais dépend de la taille du système [40]. Par ailleurs, la conductance peut être une quantité indépendante de la taille comme dans un échantillon balistique. C'est pourquoi, il n'existe pas en général de relation simple entre la conductivité et la conductance d'un échantillon mésoscopique. Cette dernière est alors calculée par une approche différente, qui fut initiée par Landauer [10].

1.5 Vision de Landauer : Approche heuristique

L'idée de Landauer est de considérer l'échantillon mésoscopique, avec toute sa complexité due à sa forme (peut être arbitraire) et à l'existence d'impuretés, comme une barrière de potentiel caractérisée par son pouvoir de transmission T et de réflexion R . La conductance ou la résistance de l'échantillon est alors exprimée en fonction de T , R et d'autres constantes universelles.

La fameuse formule proposée par Landauer [10, 41], qui prit son nom, est donnée par

$$\mathcal{G}^L = \frac{2e^2 T}{h R}, \quad (1.52)$$

avec e est la charge de l'électron et h est la constante de Planck. Cette formule est valide pour un échantillon unidimensionnel (1d) à température nulle traversé par un courant constant imposé I induisant une différence de potentiel ΔV entre ses bornes. Cependant, si pour le même échantillon on impose une différence de potentiel $\Delta\mu$ qui induit le même courant I , la conductance sera donnée par

$$\mathcal{G}^1 = \frac{2e^2}{h} T. \quad (1.53)$$

Ceci fut dérivé pour la première fois en 1981 par Economou-Soukoulis [42] à partir de la théorie de la réponse linéaire.

Les deux formules (1.53) et (1.52) coïncident à la limite d'une très faible transmission $T \simeq 0$, mais divergent à la limite balistique avec $T = 1$. Dans cette limite, (1.53) donne une conductance finie égale à $\frac{2e^2}{h}$ et (1.52) donne une conductance infinie. L'origine de cette différence est restée pour longtemps une énigme jusqu'à ce que Imry [13] lui suggère une interprétation plausible. Les électrons injectés par les réservoirs (voir section suivante) ont une probabilité non nulle d'être

réfléchis à l'intérieur avant d'être injectés dans les terminaux¹⁹. Cette réflexion se manifeste par une résistance supplémentaire, dite de contact, qui en série avec la résistance propre de l'échantillon résultante de (1.52), donne la résistance résultante de (1.53) :

$$\mathcal{R}^{\text{contact}} = \frac{h}{2e^2 T} - \frac{h}{2e^2} \frac{R}{T} = \frac{h}{2e^2}. \quad (1.54)$$

1.5.1 Formule de Landauer à deux terminaux

Dans cette section nous allons exposer en détail, la dérivation de la formule de la conductance proposée par Landauer pour un échantillon mésoscopique désordonné. Landauer considère le dispositif (1d) de la Fig. 1-16. L'échantillon mésoscopique, de forme quelconque, est attaché de part et d'autre à deux terminaux parfaits A et B connectés à leurs tours à deux réservoirs servant de source et évier du courant électrique²⁰. Le mouvement des électrons tout au long de la structure (échantillon+terminaux) est complètement cohérent. Ceci étant, les électrons ne subissent que des collisions élastiques à l'intérieur de l'échantillon désordonné (leur mouvement le long des terminaux est balistique). La brisure de la cohérence, due essentiellement aux collisions inélastiques, se produit à l'intérieur des réservoirs supposés demeurer en équilibre thermodynamique avec des potentiels chimiques μ_L (réservoir de gauche) et μ_R (réservoir de droite).

A la limite des basses températures ($T \simeq 0$) chaque réservoir injecte les électrons dans le terminal adjacent jusqu'à sa quasi énergie de Fermi μ_L ou μ_R (on admettra que $\mu_L > \mu_R$). Le courant total injecté dans le terminal A sera égal à la somme des courants induits par les électrons émis par le réservoir de gauche dans l'intervalle d'énergie $\Delta\mu = \mu_L - \mu_R$ ²¹. Si on se limite au transport linéaire, caractérisé par $\mu_L \gtrsim \mu_R$, tous les électrons émis à $T=0$ ont presque la même vitesse, qui est la vitesse de Fermi, $v_F = \hbar k_F / m^*$. Le courant qui leur est associé est alors donné par

$$I = 2ev_F \mathcal{D}(\varepsilon_F) \Delta\mu, \quad (1.55)$$

où $\mathcal{D}(\varepsilon_F)$ est la densité d'états à l'énergie de Fermi ε_F pour un échantillon de longueur unité

¹⁹cette réflexion peut être d'origine géométrique puisque les réservoirs sont plus larges que les terminaux.

²⁰ A et B servant pour la transmission du courant entre réservoirs.

²¹Le courant correspondant aux électrons d'énergies inférieures à μ_R émis par le réservoir de gauche est compensé par le courant des électrons de mêmes énergies émis par le réservoir de droite.

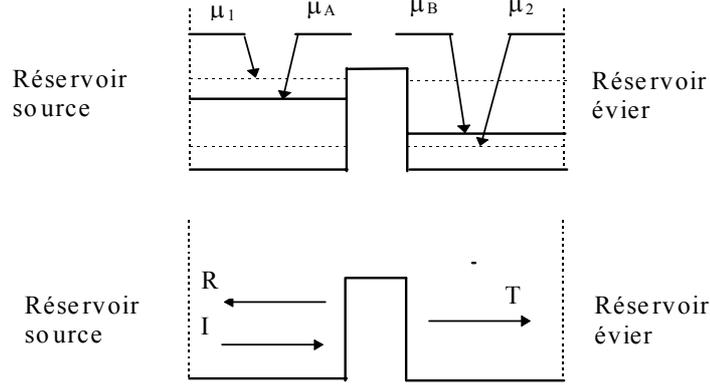


FIG. 1-16 – Echantillon mésoscopique entre deux réservoirs (modèle de Landauer).

(nombre d'états possibles par unité d'énergie se propageant de gauche à droite); le facteur 2 tient compte de la dégénérescence de spin. Puisque $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ et $\frac{1}{2\pi} dk = \mathcal{D}(\varepsilon) d\varepsilon$, il vient que $\mathcal{D}(\varepsilon_F) = \frac{1}{\hbar v_F}$. Par conséquent le courant total injecté dans le terminal A est donné par la formule simple

$$I = \frac{2e}{h} \Delta\mu. \quad (1.56)$$

Une fois arrivé au niveau de l'échantillon mésoscopique, ce courant sera scindé en une partie transmise et par conséquent absorbée par le réservoir de droite, et une partie réfléchie et réabsorbée par le réservoir de gauche. Si on dénote par T et R respectivement les probabilités de transmission et de réflexion de l'échantillon à $\mathbf{T} = 0$, le courant transmis dans le terminal B , noté I_B est donc donné par

$$I_B = \frac{2e}{h} T \Delta\mu. \quad (1.57)$$

De même, on montre que le courant circulant dans le terminal A est donné par

$$I_A = \frac{2e}{h} (1 - R) \Delta\mu. \quad (1.58)$$

La conservation du courant de part et d'autre de l'échantillon ($I_A = I_B$), qui est réalisée dans le régime stationnaire, entraîne que

$$T + R = 1. \quad (1.59)$$

Le courant circulant entre les réservoirs étant établi, il reste à connaître la différence de potentiel électrique ΔV entre les bornes de l'échantillon pour déterminer la conductance de ce dernier. C'est justement la définition de ce ΔV qui a été à l'origine d'une grande controverse durant les années quatre-vingt [14]. En effet, si l'on admet que la différence de potentiel est mesurée entre deux points à l'intérieur des réservoirs, alors $e\Delta V = \Delta\mu$ et donc la conductance sera simplement donnée par (1.53).

Par ailleurs, si la mesure des tensions est effectuée dans les terminaux, la conductance obtenue sera différente de (1.53). Dans le régime stationnaire, les terminaux A et B sont dans des états de quasi-équilibre caractérisés par des densités de charges n_L et n_R constantes. Par conséquent, leur différence de potentiel à température nulle peut être calculée par la relation d'Einstein généralisée [31] qui s'écrit

$$4\mathcal{D}(\varepsilon_F)(w_L - w_R) = n_L - n_R, \quad (1.60)$$

où le facteur 4 tient compte des deux directions de propagation et de la dégénérescence de spin, et w_L et w_R sont les potentiels mesurés à l'intérieur des terminaux A et B , respectivement.

Si on ignore les interférences, un nombre n d'électrons se propageant dans le même sens (dans un échantillon de longueur unité) avec une vitesse v leur correspond un courant $i = env$. Ainsi n_L et n_R sont données par

$$n_L = \frac{2e}{h\nu_F} \Delta\mu(1 + R), \quad n_R = \frac{2e}{h\nu_F} \Delta\mu T, \quad (1.61)$$

et

$$\Delta n = n_L - n_R = \frac{4e}{h\nu_F} R\Delta\mu. \quad (1.62)$$

à partir de (1.59). En combinant (1.60) et (1.62), il vient que

$$w_A - w_B = R\Delta\mu, \quad (1.63)$$

et par conséquent \mathcal{G}^L est donnée par (1.52).

1.5.2 Formules de généralisation à plusieurs canaux de transmission

Encouragés par les résultats (1.52) et (1.53), les auteurs se sont dirigés vers la généralisation de ces formules à plusieurs canaux²² ($d > 1$), afin de se rapprocher d'un système beaucoup plus réaliste.

Bien que la formule (1.53) exclue la limite balistique, sa généralisation à plusieurs canaux a connu un grand succès puisqu'elle a apporté une explication plausible aux fluctuations universelles de la conductance, observées expérimentalement [5]. La formule retrouvée est donnée par [15, 14, 12]

$$\mathcal{G}^F = \frac{2e^2}{h} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |t_{ij}|^2, \quad (1.64)$$

où t_{ij} est l'amplitude de transmission du canal (j) dans le canal (i).

En revanche, puisque dans cette limite balistique, la formule (1.52) vérifie l'intuition physique selon laquelle un système parfait ne doit pas avoir de résistance à température nulle, plusieurs formules ont été proposées pour sa généralisation à plusieurs canaux²³. Parmi celles-ci, la formule proposée d'abord par Azbel [43] et ensuite par Buttiker-Imry-Landauer-Pinha (BILP) [44], adoptée pendant longtemps, a été considérée comme la plus plausible.

Formule proposée par BILP [44]

Dans un cadre heuristique, ces auteurs avaient considéré un modèle similaire à celui adopté dans la dérivation de la formule de Landauer (section 1.5.1), mais tout en admettant que les terminaux A et B ont chacun une section finie pouvant contenir un nombre n de canaux. Conséquent, une onde dans un canal j , a une probabilité T_{ij} d'être transmise par l'échantillon mésoscopique (représenté par une barrière de potentiel) dans le canal i et une probabilité R_{ij} d'être réfléchi dans le même canal i .

L'hypothèse fondamentale faite par ces auteurs consiste à admettre que le courant est constant dans chaque canal. Ceci-étant, tous les canaux de transmission de gauche (droite), injectés par le réservoir de gauche (droite) ont le même potentiel électrochimique μ_L (μ_R).

²²modes transverses de propagation.

²³Pour plus de détails, nous recommandons sommairement de voir l'article [14].

Moyennant certaines considérations physiques [44], à température nulle BILP obtinrent

$$\mathcal{G}^{\text{BILP}} = \frac{2e^2}{h} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |t_{ij}|^2 \left[\frac{\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i} \left(1 + \sum_{j=1}^n |r_{ij}|^2 - \sum_{j=1}^n |t_{ij}|^2 \right)} \right]. \quad (1.65)$$

une formule explicitement dépendante des vitesses dans les canaux à l'énergie de Fermi. Cette formule interprétée comme une mesure à quatre terminaux, donne exactement à la limite où $n = 1$, la formule originale de Landauer (1.52).

Cependant, cette formule souffre de certaines inconsistances, à savoir :

- Si les canaux de propagation sont non couplés, $T_{ij} = T_j \delta_{ij}$ et $R_{ij} = R_j \delta_{ij}$, la formule (1.65) ne se réduit pas à la somme des conductances des n canaux, alors que celle-ci constitue une condition nécessaire pour l'applicabilité de toute formule généralisée.
- Elle ne tient pas compte de l'existence d'un champ magnétique, alors que peu après on a supposé [45] qu'elle demeure vérifiée même en présence de ce dernier.
- Cette formule est confrontée à un problème majeure de discontinuité au passage d'un nombre n de canaux à un nombre $n + 1$ [44]. En effet, si ε_F tend par des valeurs supérieures de l'énergie à laquelle le canal $(n + 1)$ est conducteur, la conductance est donnée par la formule à n canaux (1.65). Mais si ε_F tend par des valeur inférieures de cette énergie, la formule (1.53) se réduit à (1.65). Evidemment, ces deux conductances n'ont pas la même valeur à ε_F .
- Enfin ayant une dépendance très compliquée en l'énergie à $T \neq 0$, cette formule n'obéit pas à l'intuition physique selon laquelle les conductances correspondantes à différentes énergies doivent être sommées de la même manière que pour des canaux parallèles.

L'origine de ces inconsistances est liée au fait que dans leurs calculs ces auteurs partent de la moyenne du courant et non pas de sa vraie valeur dans chaque canal [18, 46, 47].

Ainsi, ces inconsistances seront exploitées dans les chapitres suivants afin de formuler à partir d'un calcul microscopique rigoureux, dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, l'approche de Landauer.

Chapitre 2

Opérateur densité dans le point de vue de Landauer : Champ magnétique arbitraire

2.1 Introduction

Le calcul du tenseur conductivité et ses corrections a suscité l'intérêt des théoriciens depuis longtemps. On trouve dans la littérature plusieurs travaux formulés dans ce contexte [48]-[51]. Généralement les auteurs partent de la fameuse formule de Kubo pour la conductivité [9] et la traitent perturbativement en suivant une recette proposée par Van Hove [52]. Dès lors, la théorie de Kubo avait marqué un grand succès dans la description des phénomènes de transport.

En effet, dans sa théorie, Kubo considère un système décrit par un Hamiltonien H_{tot} composé de deux parties $H_{\text{tot}} = H + H_{\text{ext}}(t)$. La première (H) représente l'Hamiltonien propre au solide pouvant inclure les énergies cinétiques de tous les constituants du système ainsi que les énergies potentielles résultantes des interactions mutuelles, comme l'interaction électrons-électrons, ions-ions, ions-électrons, etc... La deuxième partie $H_{\text{ext}}(t)$ représente l'interaction du système avec le milieu extérieur (champ électrique). H_{tot} est alors dépendant du temps par l'intermédiaire du champ électrique appliqué qu'on suppose assez faible pour que l'hypothèse de la réponse linéaire soit justifiée.

A cet Hamiltonien $H_{\text{tot}}(t)$, on associe l'opérateur densité statistique $\rho(t)$, dont l'évolution dans le temps est régie par une équation différentielle linéaire appelée équation de Von Neumann

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) + \frac{i}{\hbar}[H(t), \rho(t)] = 0. \quad (2.1)$$

La solution formelle de cette dernière donne $\rho(t)$ comme une fonctionnelle de $H_{\text{ext}}(t)$. Cependant, il est difficile de résoudre exactement cette équation et ceci demeure jusqu'à ce jour un grand défi pour les théoriciens. Heureusement pour le calcul des coefficients de transport, on a juste besoin de connaître la réponse du système à un champ très faible, et donc résolution de l'équation (2.1) à l'ordre le plus bas en $H_{\text{ext}}(t)$. Cette solution proposée par Kubo [9, 53] a pris le nom de solution linéaire ou solution dans le cadre de la réponse linéaire.

En admettant que la perturbation extérieure ait pris effet à l'instant $t_0 = -\infty$, la solution formelle de l'équation (2.1) est alors donnée par

$$\rho(t) = \rho_0(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t')} [H_{\text{ext}}(t'), \rho_0(t')] e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')}, \quad (2.2)$$

où $\rho_0(t)$ est l'opérateur densité à l'équilibre et donc en l'absence de toute perturbation extérieure. Il coïncide avec la distribution grand canonique.

En utilisant la solution (2.2) pour calculer la valeur moyenne du vecteur densité de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, Kubo dérivait sa formule célèbre du tenseur conductivité pour un champ électrique extérieur oscillant. Sa technique repose sur l'hypothèse adiabatique qui considère que le champ extérieur est appliqué au système de façon graduelle et adiabatique. Mathématiquement, ceci consiste à écrire la perturbation due au champ extérieur comme $H_{\text{ext}}(t) \rightarrow e^{-\varepsilon|t|} H_{\text{ext}}^0$ où ε est un paramètre positif qu'il faut prendre égal zéro à la fin des calculs. Le résultat est donné par la formule générale suivante

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \int_0^\beta \int_0^\infty e^{-i\omega t} \text{Tr}(\rho_0 j_\nu(0) j_\mu(t + i\hbar\lambda)) dt d\lambda, \quad (2.3)$$

où Tr est la trace prise sur tous les états propres de l'Hamiltonien H , et j_ν, j_μ sont les composantes de l'opérateur densité de courant. Cependant, puisque les états de H ne sont pas connus de manière exacte, la détermination de $\sigma_{\mu\nu}$ a nécessité l'utilisation de méthodes per-

turbatives pour l'exprimer en terme des paramètres caractéristiques de l'échantillon considéré [48, 49, 50, 51, 18, 39].

Simultanément avec le travail de Kubo, une autre alternative pour la description du transport linéaire est proposée par Landauer en 1957 [10]. Elle relie le transport au phénomène de collisions élastiques. Ce formalisme a connu un grand succès quelques années plus tard lors de la découverte du phénomène de *la localisation* par Anderson [54] et ultérieurement avec la découverte des systèmes *mésoscopiques* [20] (voir chapitre 1). L'étude et la réalisation de son approche, ont suscité l'intérêt des chercheurs autant sur les plans expérimental que théorique [22]. Théoriquement, plusieurs tentatives pour la dérivation de la formule de la conductance uni-dimensionnelle proposée par Landauer à partir d'un calcul microscopique ont connu le jour. Les auteurs se sont intéressés à la généralisation de la formule de Landauer à plusieurs canaux au début [44], à plusieurs terminaux quelques temps après [15, 14], à l'existence d'un champ magnétique dans la théorie subséquent [16, 12, 55, 56], et récemment à l'introduction des effets liés au spin [57].

Cependant, initialement, dans tous ces travaux proposés, les auteurs se sont limités à l'utilisation de la formule de Kubo en appréciant, en raison de sa taille réduite, le fait que l'échantillon mésoscopique est en contact avec des terminaux semi-infinis. Ainsi, le système global (échantillon + terminaux) est infini et donc correspond aux considérations de la théorie de Kubo [9].

En analysant de près ces deux points de vue, on montre qu'en fait Kubo traite le courant induit dans la structure comme le résultat de l'application d'une excitation extérieure entre les réservoirs, alors que Landauer considère le courant émis par les réservoirs comme la cause de l'induction d'une différence de potentiel de part et d'autre de l'échantillon. Par conséquent, l'approche de Kubo correspond à une mesure effectuée dans les réservoirs, et celle de Landauer correspond à une mesure effectuée à l'intérieur des terminaux. Il est maintenant évident que les contacts entre les réservoirs et les terminaux sont à l'origine de la différence entre les deux points de vue [13, 58].

Encouragés par l'étude microscopique [18] formulée en l'absence de champ magnétique, où seule la partie diagonale de l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer est pertinente, notre objectif dans ce chapitre est la dérivation de l'opérateur densité dans l'approche de Lan-

dauer en présence d'un champ magnétique arbitraire. Nous montrons relativement à ce travail, qu'en présence d'un champ magnétique, la partie non diagonale de l'opérateur densité est aussi pertinente. Nous déterminons ainsi l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer. Plus important, nous arrivons à établir la différence entre les approches de Landauer et Kubo au niveau de l'opérateur densité nécessaire pour le calcul de toutes les grandeurs physiques. Une discussion des résultats obtenus est proposée à la fin de ce chapitre.

2.2 Description

Considérons un échantillon mésoscopique désordonné de volume $\Omega_0 = L_0 S$ attaché de part et d'autre à deux terminaux parfaits identiques et semi infinis, liés à leurs tours à deux réservoirs de particules R et L (source et évier de courant) pour former le système total. L'existence des terminaux qui assurent la transition entre réservoirs et échantillon est indispensable et même indiscutable selon Landauer [41]. Le transport tout au long de la structure (échantillon mésoscopique + terminaux) est complètement cohérent. Cependant, la brisure de celui-ci se produit à l'intérieur des réservoirs, maintenus à des potentiels chimiques constants μ_R et μ_L respectivement.

Ici, nous n'allons pas suivre le même chemin que Kubo mais nous admettons qu'à $t < 0$, le système est en équilibre thermodynamique, décrit par l'opérateur densité ρ_0 correspondant au cas où les réservoirs sont maintenus au même potentiel chimique μ_R . Par la suite, l'application de l'excitation extérieure à $t = 0$ conduit le système vers un état hors équilibre en changeant le potentiel chimique du réservoir gauche de μ_R à μ_L de sorte que $\mu_L - \mu_R$ soit assez faible pour que l'hypothèse de la réponse linéaire soit justifiée. Un courant continue (dc) commence à parcourir le système jusqu'à atteindre le régime stationnaire après un temps très long¹.

A cause du désordre, un champ électrique additionnel se crée dans la structure en réponse au flux de courant [10, 41, 59, 60, 13]. En effet, une distribution de charges fixes² dans un référentiel crée un champ électrostatique. Ce champ exerce une force d'attraction sur les électrons donnant lieu à un surplus de charges négatives dans son voisinage. Le champ total est localement réduit,

¹Pour une réponse dc , le champ magnétique associé à l'excitation extérieure est négligeable.

²ici c'est les impuretés (ions de charges positives) rigidement figées mais de manière aléatoire aux sites du réseau cristallin.

ce qui signifie que la charge est alors localement masquée ou écrantée (screened) par les électrons. Le potentiel électrostatique résultant est celui produit par les charges positives et le nuage d'électrons de masquage induits [60, 75, 61, 62]. On dit que ce potentiel est un potentiel self-consistant ou que ce potentiel est le résultat d'une accumulation self-consistante de la charge induite proche de la barrière. Ce potentiel que nous dénotons par $w(\mathbf{r})$ s'étend sur une longueur écran (screening length) de part et d'autre de l'échantillon mésoscopique [60, 63, 12], d'où la création d'une différence de potentiel $\Delta w(\mathbf{r})$. $w(\mathbf{r})$ dépend de la position [64] et a une forme assez compliquée au voisinage immédiat et aussi à l'intérieur de la région désordonnée. Au delà de la longueur écran (screening length) et notamment dans les régions asymptotiques des terminaux (une fois le régime stationnaire établi), $w(\mathbf{r})$ prend des valeurs constantes.

C'est ainsi qu'il devient apparent, qu'outre la possibilité d'exprimer le courant traversant la structure en terme de la différence des potentiels chimiques des réservoirs (comme il a été stipulé dans tous les travaux optant pour l'approche de Kubo), la possibilité de le relier à la nouvelle quantité Δw s'impose. Pour être en bonne conformité avec le modèle de Landauer, l'étude microscopique doit se faire de manière self-consistante [65]. Ceci étant, nous avons à suivre Thouless [66] et Langreth-Abrahamas [65] dans cette supposition, mais avec une démarche différente. En effet, nous suivrons ici une théorie développée récemment en l'absence d'un champ magnétique [18], sur la base des travaux de C. M. Van Vliet [67, 68] concernant l'opérateur densité³. Cette théorie n'est pas perturbative, mais tient compte de l'effet intégral de l'interaction dans le cadre des théories de la réponse linéaire et de diffusion. Autrement, aucune condition n'est imposée ni sur l'intensité ni sur l'étendue du potentiel d'interaction électron-impuretés.

Compte-tenu de la spécificité du problème mésoscopique qui considère le mouvement des porteurs de charges cohérent⁴ tout au long de la structure, l'Hamiltonien total du système se réduit à un Hamiltonien à un corps $H_{tot} = \sum_i h_{tot}^i$. Cette remarque permet une simplification majeure éliminant les complications de la seconde quantification (chapitre 1).

La structure mésoscopique de volume $\Omega = LS$ (échantillon mésoscopique en plus des terminaux) est immergée dans un champ magnétique extérieur \mathbf{B} , uniforme et indépendant du temps, voir (Fig. 2-1).

³bien que celle-ci soit perturbative et développée dans le cadre de la limite de Van Hove.

⁴Les électrons ne subissent que des collisions élastiques avec les impuretés alors que celles inélastiques se produisent à l'intérieur des réservoirs supposés être en équilibre thermodynamique.

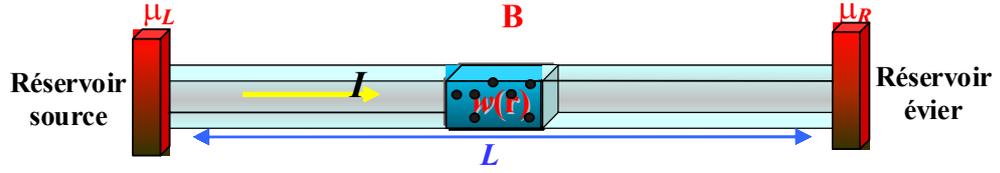


FIG. 2-1 – Echantillon mésoscopique en contact avec des terminaux liés à leur tour à des réservoirs. La structure est soumise à un champ magnétique \mathbf{B} uniforme.

Dans le même esprit de Landauer, l'Hamiltonien total du système s'écrit alors

$$h_{\text{tot}} = h + w(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

où $w(\mathbf{r})$ est le potentiel résultant de l'accumulation de charges défini auparavant et h est l'Hamiltonien effectif⁵ du système en l'absence de toute perturbation extérieure. Il s'écrit relativement au minimum de la bande de conduction comme

$$h = h^0 + V(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

$V(\mathbf{r})$ est le potentiel relatif au désordre qui représente le potentiel d'interaction entre tout électron i et les N impuretés (chapitre 1). En négligeant l'interaction avec les parois, $V(\mathbf{r})$ représente l'interaction causant les transitions aléatoires entre les états, donnant ainsi naissance à la dissipation. h^0 représente, dans l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien des électrons libres en présence du champ magnétique :

$$h^0 = \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V_c(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

où \mathbf{p} est l'opérateur moment, \mathbf{A} est le potentiel vecteur dont dérive le champ magnétique ; $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, et $V_c(\mathbf{r})$ représente le potentiel de confinement dû au caractère fini de la structure dans les directions $\mathbf{r} \equiv y, z$. Ici le degré de liberté lié au spin n'est pas pris en considération dans les calculs. Seul un facteur de dégénérescence 2 lié à ce dernier sera pris en compte à la

⁵Non perturbé par l'excitation extérieure.

fin des calculs.

Comme la structure de volume Ω est assez large, le spectre associé à h est continu. Les états propres de h^0 et de h que nous dénotons par $|\varphi_\xi\rangle$ et $|\Psi_\xi\rangle$, respectivement, forment séparément deux bases complètes et orthonormées :

$$\int d\mathbf{r} \varphi_\xi^*(\mathbf{r})\varphi_\beta(\mathbf{r}) = \delta(\xi - \beta), \quad \text{et} \quad \int d\xi \varphi_\xi^*(\mathbf{r})\varphi_\xi(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.7)$$

$$\int d\mathbf{r} \Psi_\xi^*(\mathbf{r})\Psi_\beta(\mathbf{r}) = \delta(\xi - \beta), \quad \text{et} \quad \int d\xi \Psi_\xi^*(\mathbf{r})\Psi_\xi(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.8)$$

où ξ dénote l'ensemble de tous les nombres quantiques nécessaires pour la description de la dynamique correspondante. Comme le système a un spectre continu, nous utilisons le symbole d'intégrale pour désigner à la fois l'intégration sur les nombres quantiques continus, indexant les énergies, et la sommation sur les nombres quantiques discrets caractérisant les canaux ainsi que la direction de propagation pour une énergie fixe.

2.3 Opérateur densité

En physique statistique à tout système quantique décrit par un Hamiltonien à un corps, on peut associer un opérateur densité statistique à un corps, qu'on notera $\rho(t)$. L'évolution de cet opérateur dans le temps est régie par l'équation différentielle linéaire de Von Neumann (2.1), qui s'écrit dans notre cas comme

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) + i\mathcal{L}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [w(\mathbf{r}), \rho(t)], \quad (2.9)$$

en lui conférant le caractère linéaire à l'aide du superopérateur de Liouville \mathcal{L} . L'action de ce dernier sur tout opérateur \bullet de l'espace de Liouville⁶ est définie par

$$\mathcal{L}\bullet = \frac{1}{\hbar} [h, \bullet]. \quad (2.10)$$

Dans l'approximation de la réponse linéaire, $\rho(t)$ à droite de l'équation (2.9), sera remplacé

⁶L'espace de Liouville est l'espace des opérateurs linéaires ou $\mathbb{H} \otimes \tilde{\mathbb{H}}$ avec \mathbb{H} et $\tilde{\mathbb{H}}$ représentant respectivement l'espace de Hilbert des états dynamiques et son dual.

par ρ_0 l'opérateur densité à l'équilibre thermodynamique. ρ_0 n'évolue pas, et est donné dans un traitement à un corps par la distribution de Fermi-Dirac

$$\rho_0 = \rho_0(\hbar) = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_F - \hbar)}}, \quad (2.11)$$

avec $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et k_B et T représentent respectivement la constante de Boltzmann et la température.

Comme il n'y a pas de flux de courant à l'équilibre, nous nous intéresserons dans ce qui suit à la déviation de $\rho(t)$ de sa valeur à l'équilibre qu'on notera $\varrho(t) = \rho(t) - \rho_0$; c'est à dire la partie résultante de l'application d'une différence de potentiel entre les réservoirs et qui s'exprime dans le point de vue de Landauer en terme du potentiel induit à l'intérieur des terminaux $w(\mathbf{r})$. En ce sens, puisque dans le cadre du mésoscopique nous avons besoin tout d'abord de la solution approchée à l'ordre un en $w(\mathbf{r})$, l'équation linéaire que vérifie $\varrho(t)$ est donnée par

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(t) + i\mathcal{L}\varrho(t) = \frac{-i}{\hbar} [w, \rho_0], \quad (2.12)$$

avec la condition initiale $\varrho(0) = 0$ à $t = 0$.

L'expérience nous enseigne que tout système macroscopique tend vers l'équilibre (courant électrique nul) s'il est laissé à lui-même, ou encore vers un état stationnaire (courant électrique constant) s'il est soumis à un champ électrique constant. Dans ce cas les fluctuations dépendantes du temps s'annulent et le courant devient spatialement uniforme comme s'il était en régime stationnaire.

Néanmoins, la dynamique des électrons de conduction à l'intérieur de l'échantillon est fortement influencée aussi par leurs interactions avec l'environnement, représenté ici par les réservoirs d'électrons attachés à l'échantillon. Quand on sépare la dynamique des réservoirs de celle de l'échantillon (représenté par les électrons de conduction), cette dernière aura un comportement réversible. Comme il a été mentionné au préalable, Kubo considère que le champ électrique extérieur (représente l'interaction entre les réservoirs et les électrons de conduction), agit de façon adiabatique sur l'échantillon. Par ailleurs, on montre que son idée est équivalente d'un point de vue technique à choisir l'origine de l'application de la perturbation extérieure à $t = 0$ et de procéder avec la transformée de Laplace-Carson qui est plus simple à manier.

Donc la solution de (2.12) dans le régime stationnaire est mieux élucidée en transformant tout d'abord cette dernière en une équation algébrique avec l'aide de la transformée de Laplace Carson.

Par définition [69], cette transformée associe à toute fonction $Y(t)$, dont le $|Y(t)|$ est d'ordre exponentiel nul, la transformée $\widehat{Y}(s)$, valable quelque soit $s \geq 0^+$:

$$\widehat{Y}(s) = s \int_0^{\infty} dt e^{-st} Y(t), \quad (2.13)$$

permettant de définir le régime stationnaire à partir de l'égalité suivante⁷ :

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \widehat{Y}(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} Y(t). \quad (2.14)$$

En effet, on se rend compte facilement du résultat en considérant la transformée de $f'(t)$ (dérivée de $f(t)$) en intégrant par partie :

$$\int_0^{\infty} dt e^{-st} \frac{d}{dt} f(t) = \widehat{f}(s) - f(0). \quad (2.15)$$

Par application de cette transformée à l'équation de Von Neumann (2.12), on obtient

$$s\widehat{\varrho}(s) + i\mathcal{L}\widehat{\varrho}(s) = \frac{-i}{\hbar} [w, \rho_0], \quad (2.16)$$

où le terme en $s\widehat{\varrho}(s)$ assure l'irréversibilité du système global comme nous allons le voir.

2.3.1 Opérateur densité du type Kubo

Avant la résolution de (2.16) dans le point de vue de Kubo, il convient ici de faire le point sur l'étude statistique proposée par Baranger-Stone [16] dans le cadre de la réponse linéaire. Baranger-Stone considèrent que l'échantillon mésoscopique est en contact avec des terminaux infinis auxquels une perturbation extérieure est appliquée : $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cos \omega t \exp(-\delta|t|)$ tel que $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$ est un champ électrique local. La seule restriction imposée à $V(\mathbf{r})$ est

⁷Physiquement, la transformée de Laplace-Carson définit une moyenne sur le temps ; d'ordre $\frac{1}{s}$.

qu'il prend des valeurs constantes V_n dans les régions asymptotiques des terminaux de sorte que les champs électriques correspondants s'annulent. Autrement dit, les V_n coïncident avec les potentiels des réservoirs adjacents. Les limites du régime stationnaire et statique (dc)⁸ sont pris à la fin des calculs.

En analysant de près leur démarche, on note que d'une part ces auteurs considèrent l'excitation extérieure $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ appliquée à toute la structure induisant ainsi l'écoulement d'un courant permanent, et d'autre part ce même champ est supposé être local (le potentiel ΔV est confiné à l'échantillon) et donc est induit par le courant circulant. Pour Baranger-Stone les contacts, à savoir la probabilité que l'électron soit réfléchi avant d'être transmis définissant une baisse de tension, sont inexistantes. Pourtant le concept des résistances de contact [26] est connu depuis le travail de Sharvin [70] sur les points de contact classiques⁹, et est aussi mis en évidence expérimentalement [71, 72]. (pour plus de détails voir [30]). Aussi, dire que les régions asymptotiques des terminaux ont le même comportement que les réservoirs est trop subtil, vu que ces derniers sont supposés être parfaits (absence de toute forme de collisions) et donc ne peuvent jamais atteindre l'équilibre thermodynamique.

C'est ainsi qu'on déduit qu'en fait Baranger-Stone effectuent les calculs dans les réservoirs (et donc en incluant les contacts) et recourent à la région asymptotique pour une solution dans le cadre de la théorie de diffusion.

Pour ce qui est de notre cas, afin de définir l'opérateur densité dans le point de vue de Kubo, la limite du régime stationnaire doit être considérée attentivement relativement à la situation physique étudiée. L'inverse d'un opérateur différentiel ne peut être déterminé qu'après avoir spécifié les conditions limites. Une manière pour procéder consiste à ajouter une partie imaginaire infinitésimale au Liouvillean \mathcal{L} . Dans notre cas, ceci correspond à considérer la limite du régime stationnaire au niveau de l'équation (2.16) après inversion de sorte que $\varrho^1 = \lim_{s \rightarrow 0^+} \widehat{\varrho}(s)$ converge (borné) :

$$\varrho^1 = \frac{-i}{\hbar} \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s + i\mathcal{L}} [w, \rho_0]. \quad (2.17)$$

Le terme is ajusté à \mathcal{L} définit les conditions aux limites (ici l'effet des réservoirs) qui se mani-

⁸Limite extrapolée à de faibles fréquences $\omega \rightarrow 0$ après avoir pris $\delta \rightarrow 0$. En effet, un circuit fonctionne en régime continu si les tensions sont indépendantes du temps.

⁹Ce dernier a défini le contact comme un trou qui se forme entre deux gazes de Fermi de densités différentes.

festent par les contacts [31]¹⁰. Ceci est équivalent d'un point de vue technique à l'introduction d'un terme en $s\widehat{\varrho}(s)$ d'amortissement à la main au niveau de l'équation de Von Neumann comme l'a suggéré Lax [73]. Celui-là schématisera l'effet des réservoirs sur l'échantillon et confèrera à ce dernier une évolution irréversible¹¹. En faisant de la sorte, il est évident que les grandeurs physiques de l'échantillon qu'on calculera, comme les coefficients de transport, tiendront compte de l'effet des contacts.

En revanche, si nous considérons la limite $s \rightarrow 0^+$ avant d'inverser (2.16), le terme en $s\widehat{\varrho}(s)$ s'annule et l'opérateur densité qui en découle :

$$\varrho = \frac{-i}{\hbar} \frac{1}{i\mathcal{L}} [w, \rho_0] = - \sum_{\alpha\beta} |\Psi_\alpha\rangle \langle \Psi_\beta| \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} [w, \rho_0]_{\alpha\beta}, \quad (2.18)$$

peut diverger pour des états de même énergie ou pour des états identiques ($|\Psi_\alpha\rangle = |\Psi_\beta\rangle$) car le commutateur $[w, \rho_0]_{\alpha\beta}$ ne s'annule jamais en présence d'un champ magnétique (voir sections suivantes). Pour y remédier et éviter la divergence de ϱ^1 , la limite du régime stationnaire doit donc être prise après avoir inversé. Ceci diffère de l'hypothèse de la non dégénérescence des états [50, 52] qui assure l'élimination des états de même énergie en considérant le bon ordre des limites, régime stationnaire et système très grand à chaque fois qu'il est nécessaire. Cependant, ici la divergence est éliminée en incorporant les conditions aux limites (traduisant l'effet des contacts), i.e. en inversant l'opérateur $is + \mathcal{L}$ avant de prendre la limite du régime stationnaire.

Ainsi par ϱ^1 , (2.17), nous définissons l'opérateur densité du type Kubo et non pas l'opérateur densité Kubo puisqu'il est exprimé en terme du potentiel induit à l'intérieur des terminaux et l'effet des réservoirs y est inclu. En effet, quantitativement, les contacts ne peuvent être maniés comme en heuristique car la théorie de diffusion incite un développement dans les régions asymptotiques des terminaux. C'est pourquoi Baranger-Stone [16] et d'autres [14, 15, 55] ont opté pour l'idée qu'un terminal infini est équivalent à un réservoir, alors que Landauer stipule que quelque soit sa longueur un terminal ne peut jamais représenter un réservoir [41]. Ainsi nous déduisons que Baranger-Stone ont en fait tenu compte des contacts dans leurs calculs ce

¹⁰L'inverse d'un opérateur différentiel ne peut être spécifié qu'après avoir tenu compte des conditions aux limites imposées. Une manière d'incorporer ses conditions dans l'équation Von Neumann elle même incite d'ajuster une partie imaginaire infinitésimale is à \mathcal{L} , i.e. $\mathcal{L} + is$.

¹¹autrement, au niveau de l'équation (2.16), Laplace-Carson où Kubo avec une perturbation graduelle sont équivalentes d'un point de vue technique à l'idée de Lax.

qui leur a permis de dériver une formule de magnétoconductance du type (1.64).

2.4 Opérateur densité dans l'approche de Landauer

Comme il a été stipulé au préalable, selon Landauer la mesure s'effectue à l'intérieur des terminaux en excluant les contacts. Pour éliminer les contacts du calcul de l'opérateur densité solution de (2.16), sans négliger le rôle des réservoirs dans l'établissement du régime stationnaire et l'assurance de la dissipation [60] conformément à Landauer, nous devons être plus vigilants puisque l'ordre des limites pose problème dans tous calcul microscopique.

Pour cette fin, nous utiliserons une technique basée sur la projection de l'opérateur densité sur l'espace engendré par les états propres de l'Hamiltonien libre.

2.4.1 Technique de projection

Puisque le potentiel électrochimique $w(\mathbf{r})$ est directement lié à l'existence des impuretés, et donc à $V(\mathbf{r})$ potentiel borné, il est borné.

C'est cette seconde propriété du potentiel électrochimique $w(\mathbf{r})$ va nous permettre d'appliquer la technique de projection. Celle-ci consiste à séparer tout opérateur borné en la somme d'une partie diagonale et d'une autre non diagonale [74, 64, 18]. Elle a été utilisée dans plusieurs domaines de la physique statistique et constitue un outil mathématique très puissant pour séparer les équations différentielles régissant l'évolution de la dynamique complète d'un système en l'évolution d'une partie jugée pertinente et une autre non pertinente [67]. En ce qui nous concerne, comme le montre l'Hamiltonien du système, le but est de chercher l'opérateur densité régissant la statistique des électrons de conduction en présence d'un champ magnétique uniforme dans le point de vue de Landauer.

Donc, soit M un opérateur défini et borné dans un espace de Hilbert, et $\{|\phi_i\rangle\}$ une certaine base de cet espace. En utilisant la relation de fermeture $\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = 1$, M peut être représenté par

$$M \equiv \sum_{i,j} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|M|\phi_j\rangle\langle\phi_j|. \quad (2.19)$$

En séparant la double somme en une somme sur les indices identiques et une autre sur les indices

différents, i.e. $\sum_{ij} = \sum_{i=j} + \sum_{i \neq j}$, l'opérateur M est alors séparé en deux opérateurs, diagonal M_d et non diagonal M_{nd} dans la base $\{|\phi_i\rangle\}$, tels que

$$M_d = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|M_{ii} \quad \text{et} \quad M_{nd} = \sum_{i \neq j} |\phi_i\rangle\langle\phi_j|M_{ij}. \quad (2.20)$$

Ainsi $\widehat{\varrho}(s)$ (opérateur borné) peut être représenté dans la base propre de l'Hamiltonien h^0 comme suit

$$\widehat{\varrho}(s) = \widehat{\varrho}_d(s) + \widehat{\varrho}_{nd}(s), \quad (2.21)$$

avec les indices d et nd désignent respectivement les abréviations diagonale et nondiagonale, tels que

$$\widehat{\varrho}_d(s) = \mathcal{P}\widehat{\varrho}(s) = \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle\langle\varphi_{\xi}| \langle\varphi_{\xi}| \widehat{\varrho}(s) |\varphi_{\xi}\rangle, \quad (2.22)$$

$$\widehat{\varrho}_{nd}(s) = \mathcal{Q}\widehat{\varrho}(s) = \sum_{\xi \neq \xi'} |\varphi_{\xi}\rangle\langle\varphi_{\xi'}| \langle\varphi_{\xi}| \widehat{\varrho}(s) |\varphi_{\xi'}\rangle. \quad (2.23)$$

La procédure est accomplie avec l'aide des superopérateurs de projection \mathcal{P} et \mathcal{Q} , respectivement. Ces derniers agissent, dans l'espace de Liouville total, sur ce qui est à leur droite, et réduisent tout opérateur de cet espace à sa partie diagonale et non diagonale, respectivement. \mathcal{P} et \mathcal{Q} satisfont les propriétés suivantes :

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}, \quad \mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}, \quad \mathcal{P}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{P} + \mathcal{Q} = \mathcal{I}, \quad (2.24)$$

et \mathcal{I} est le superopérateur identité.

La projection de (2.16) sur l'espace de Liouville diagonal et non diagonal, nous permet d'obtenir les deux équations couplées suivantes

$$s\widehat{\varrho}_d(s) + i\mathcal{P}\mathcal{L}^1\widehat{\varrho}_d(s) + i\mathcal{P}\mathcal{L}^1\widehat{\varrho}_{nd}(s) + i\mathcal{P}\mathcal{L}^0\widehat{\varrho}_d(s) + i\mathcal{P}\mathcal{L}^0\widehat{\varrho}_{nd}(s) = \frac{-i}{\hbar}\mathcal{P}[w, \rho_0], \quad (2.25)$$

$$s\widehat{\varrho}_{nd}(s) + i\mathcal{Q}\mathcal{L}^0\widehat{\varrho}_d(s) + i\mathcal{Q}\mathcal{L}^0\widehat{\varrho}_{nd}(s) + i\mathcal{Q}\mathcal{L}^1\widehat{\varrho}_d(s) + i\mathcal{Q}\mathcal{L}^1\widehat{\varrho}_{nd}(s) = \frac{-i}{\hbar}\mathcal{Q}[w, \rho_0], \quad (2.26)$$

avec \mathcal{L}^0 et \mathcal{L}^1 sont les superopérateurs de Liouville associés respectivement à h^0 et V , i.e.

$$\mathcal{L}^0 \bullet = \frac{1}{\hbar} [h^0, \bullet], \quad \mathcal{L}^1 \bullet = \frac{1}{\hbar} [V, \bullet], \quad \text{tels que } \mathcal{L}^0 + \mathcal{L}^1 = \mathcal{L}. \quad (2.27)$$

Les équations (2.25) et (2.26) peuvent être simplifiées davantage. En effet, puisque $\widehat{\varrho}(s)$ est borné, $\mathcal{L}^0 \widehat{\varrho}(s)$ est forcément non diagonal. D'autre part puisque $V(\mathbf{r})$ est borné, $\mathcal{L}^1 \widehat{\varrho}_d(s)$ et $\mathcal{L}^0 \widehat{\varrho}_{nd}(s)$ sont non diagonaux. De là, on déduit que

$$\mathcal{L}^0 \widehat{\varrho}_d(s) = 0, \quad \mathcal{P} \mathcal{L}^0 \widehat{\varrho}(s) = 0, \quad \mathcal{Q} \mathcal{L}^1 \widehat{\varrho}_d(s) = \mathcal{L}^1 \widehat{\varrho}_d(s) \quad \text{et} \quad \mathcal{Q} \mathcal{L}^0 \widehat{\varrho}_{nd}(s) = \mathcal{L}^0 \widehat{\varrho}_{nd}(s). \quad (2.28)$$

En combinant (2.28) avec (2.25) et (2.26), ces dernières se mettent sous une forme plus appropriée comme :

$$s \widehat{\varrho}_d(s) + i \mathcal{P} \mathcal{L}^1 \widehat{\varrho}_{nd}(s) = \frac{-i}{\hbar} \mathcal{P} [w, \rho_0], \quad (2.29a)$$

$$s \widehat{\varrho}_{nd}(s) + i (\mathcal{L}^0 + \mathcal{Q} \mathcal{L}^1) \widehat{\varrho}_{nd}(s) = -i \mathcal{L}^1 \widehat{\varrho}_d(s) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{Q} [w, \rho_0]. \quad (2.29b)$$

La combinaison des équations (2.29a) et (2.29b) ensemble, permet de déduire que $\widehat{\varrho}_{nd}(s)$ vérifie

$$\widehat{\varrho}_{nd}(s) = \frac{-1}{s + i \mathcal{L}} \left\{ (s + i \mathcal{L}^1) \widehat{\varrho}_d(s) + \frac{i}{\hbar} [w, \rho_0] \right\}, \quad (2.30)$$

et se simplifie davantage dans la limite du régime stationnaire en

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \widehat{\varrho}_{nd}(s) = - \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s + i \mathcal{L}} \left\{ i \mathcal{L}^1 \widehat{\varrho}_d(s) + \frac{i}{\hbar} [w, \rho_0] \right\}, \quad (2.31)$$

après avoir pris $\lim_{s \rightarrow 0^+} s \widehat{\varrho}_d(s) = 0$. Cependant, en suivant le même raisonnement que pour l'opérateur densité ϱ^1 (2.17), le terme $s \widehat{\varrho}_{nd}(s)$ dans (2.31) doit être conservé avant d'inverser et donc avant de prendre la limite du régime stationnaire et ceci afin d'assurer la convergence de la partie non diagonale de l'opérateur densité. Ceci traduit, conformément à l'idée de Landauer, l'importance des réservoirs dans l'établissement de la dissipation, et conséquemment le régime stationnaire et l'irréversibilité¹². Ainsi, on conclut à ce niveau que la condition de convergence qu'il faut dégager à chaque fois qu'il est nécessaire, consiste à ajuster un terme en is à \mathcal{L} pour

¹²L'existence des réservoirs est un concept essentiel dans les arguments de Landauer [60].

pouvoir définir l'inverse de ce dernier [31].

Quant à la nullité du terme en $s\widehat{\varrho}_d(s)$ dans la limite du régime stationnaire, en relation avec la formule de la conductance déterminée en l'absence d'un champ magnétique [64], nous estimons que c'est ce terme qui traduit quantitativement l'effet des contacts. L'élimination de celui-là en régime stationnaire est équivalente à travailler avec l'approche de Landauer.

En régime stationnaire $\widehat{\varrho}_d(s)$ et $\widehat{\varrho}_{nd}(s)$ convergent vers $\lim_{s \rightarrow 0^+} \widehat{\varrho}_d(s) = \varrho_d^L$ et $\lim_{s \rightarrow 0^+} \widehat{\varrho}_{nd}(s) = \varrho_{nd}^L$, respectivement, définissant ainsi les parties diagonale et non diagonale de l'opérateur densité dans l'approche de Landauer. De ce fait, il vient que

$$\varrho_{nd}^L = - \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{i}{s + i\mathcal{L}} \left\{ \mathcal{L}^1 \varrho_d^L + \frac{1}{\hbar} [w, \rho_0] \right\}, \quad (2.32a)$$

$$\mathcal{P} \mathcal{L}^1 \varrho_{nd}^L = -\frac{1}{\hbar} \mathcal{P} [w, \rho_0]. \quad (2.32b)$$

La combinaison de ces deux là, permet de définir l'équation maîtresse décrivant l'opérateur densité diagonal

$$\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L = -\frac{i}{\hbar} \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathcal{P} \left\{ 1 - i\mathcal{L}^1 \frac{1}{s + i\mathcal{L}} \right\} [w, \rho_0]. \quad (2.33)$$

$\mathbf{\Lambda}$ représente le superopérateur Master (collisionnel) exprimé en terme du Liouvillien total \mathcal{L} comme suit

$$\mathbf{\Lambda} = \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathcal{P} \mathcal{L}^1 \frac{1}{s + i\mathcal{L}} \mathcal{L}^1 \mathcal{P}. \quad (2.34)$$

L'action de $\mathbf{\Lambda}$ sur tout opérateur diagonal X se traduit par

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda} X &= \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| (\mathbf{\Lambda} X)_{\xi\xi} \\ &= \sum_{\xi\zeta} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| (\mathbf{\Lambda})_{\xi\xi/\zeta\zeta} X_{\zeta\zeta}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

avec $(\mathbf{\Lambda})_{\xi\xi/\zeta\zeta}$ est la représentation tétradratique du superopérateur Master $\mathbf{\Lambda}$ [18, 39].

Nous avons donc obtenu une équation maîtresse indépendante décrivant la partie diagonale de l'opérateur densité et une équation dépendante décrivant la partie non diagonale de l'opérateur densité, dans l'approche de Landauer, respectivement. Avant la résolution des équations (2.32a) et (2.33) pour obtention des opérateurs densité diagonal et non diagonal tous deux pertinent en présence d'un champ magnétique, nous montrons qu'il est possible de procéder

autrement pour mieux simplifier les calculs.

En effet, en s'appuyant sur les résultats précédents, ϱ_{nd}^L dans (2.32a) peut s'écrire en terme de l'opérateur densité ϱ^1 , (2.17), comme

$$\varrho_{nd}^L = \varrho^1 - \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{i}{s + i\mathcal{L}} \mathcal{L}^1 \varrho_d^L. \quad (2.36)$$

En sus, puisque dans le régime stationnaire ϱ^L est donné par la somme des parties diagonale et non diagonale,

$$\varrho^L = \varrho_d^L + \varrho_{nd}^L, \quad (2.37)$$

en ajustant alors un ϱ_d^L de part et d'autre à l'équation (2.36), nous déduisons que l'opérateur densité total dans le point de vue de Landauer est donné par

$$\varrho^L = \varrho^1 + \varrho^{SC}, \quad (2.38)$$

où

$$\varrho^{SC} = \varrho_d^L - \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{i}{s + i\mathcal{L}} \mathcal{L}^1 \varrho_d^L. \quad (2.39)$$

Le *superscript* (SC) signifie que ϱ^L est calculé de manière self-consistante, rendant ainsi l'opérateur densité total dans l'approche de Landauer (2.38) self-consistant.

Physiquement, ϱ^{SC} traduit l'effet des contacts qui devrait être supprimé de ϱ^1 de sorte que ϱ^L correspondra réellement au point de vue de Landauer [75, 76, 77] (voir chapitres 3 et 5).

Ce résultat éminent est au coeur de ce travail. En effet, nous montrons pour la première fois que la différence fondamentale (liée aux contacts) entre l'approche de Kubo et celle de Landauer se manifeste au niveau de l'opérateur densité, lui-même, nécessaire pour l'évaluation de toute grandeur physique.

Cependant, l'évaluation de ϱ^L nécessite d'explicitier le terme en ϱ^{SC} , exprimé à son tour en fonction de ϱ_d^L . Mais comme $\mathbf{\Lambda}$ ou $\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L$ dépendent du Liouvillien \mathcal{L} , et par conséquent dépendent à la fois des états propres de h et h^0 , le calcul de ϱ_d^L s'avère difficile dans ce cas.

Heureusement, dans notre cas la solution est possible. En effet, comme il a été stipulé, un bon modèle pour les systèmes mésoscopiques doit tenir compte de leurs caractéristiques essentielles; en particulier, il faut faire ressortir la propriété du transport par transmission [10].

Pour ceci, nous allons transformer les équations (2.33), (2.38) et (2.39), pour les adapter à la théorie de diffusion.

Théorie de diffusion

Rappelons d'abord quelques résultats essentiels de la théorie de diffusion [78, 79] que nous allons adopter au long de notre développement.

Puisque nous nous intéressons à la diffusion par l'échantillon désordonné, où les électrons seront transmis ou réfléchis, mais jamais capturés, nous supposons que $V(\mathbf{r})$ ne possède pas d'états liés. Ainsi à chaque état propre $|\varphi_\xi\rangle$ de l'Hamiltonien libre h^0 correspond un état de diffusion $|\psi_\xi^\pm\rangle$ de même énergie ε_ξ tel que :

$$h^0|\varphi_\xi\rangle = \varepsilon_\xi|\varphi_\xi\rangle, \quad h|\psi_\xi^\pm\rangle = \varepsilon_\xi|\psi_\xi^\pm\rangle. \quad (2.40)$$

$|\psi_\xi^+\rangle$ et $|\psi_\xi^-\rangle$ représentent respectivement les états de diffusion entrant et sortant qui forment deux bases complètes orthonormées :

$$\langle\psi_\xi^\pm|\psi_{\xi'}^\pm\rangle = \delta_{\xi\xi'}, \quad \text{et} \quad \sum_\xi |\psi_\xi^\pm\rangle\langle\psi_\xi^\pm| = 1. \quad (2.41)$$

On montre que les $|\psi_\xi^\pm\rangle$ sont reliés aux $|\varphi_\xi\rangle$ par les relations de Lippmann-Schwinger [79] :

$$|\psi_\xi^+\rangle = |\varphi_\xi\rangle + G_\xi^{0+}V|\psi_\xi^+\rangle, \quad (2.42a)$$

$$|\psi_\xi^-\rangle = |\varphi_\xi\rangle + G_\xi^{0-}V|\psi_\xi^-\rangle, \quad (2.42b)$$

ou de manière équivalente par

$$|\psi_\xi^+\rangle = |\varphi_\xi\rangle + G_\xi^+V|\varphi_\xi\rangle, \quad (2.43a)$$

$$|\psi_\xi^-\rangle = |\varphi_\xi\rangle + G_\xi^-V|\varphi_\xi\rangle, \quad (2.43b)$$

où G_ξ^\pm et $G_\xi^{0\pm}$ sont les opérateurs de Green usuels¹³, avancées (-) et retardées (+), correspon-

¹³la fonction de Green décrit la propagation d'un électron entre deux sites à l'intérieur d'un conducteur.

dants aux Hamiltoniens h and h^0 . Ces opérateurs sont définis respectivement par

$$G_\xi^\pm = \frac{1}{\varepsilon_\xi - h \pm i0^+}, \quad (2.44)$$

$$G_\xi^{0\pm} = \frac{1}{\varepsilon_\xi - h^0 \pm i0^+}, \quad (2.45)$$

et vérifient

$$G_\xi^\pm = G_\xi^{0\pm} + G_\xi^{0\pm} V G_\xi^\pm, \quad (2.46)$$

tel que $(G_\xi^\pm)^\pm = G_\xi^\mp$.

2.4.2 Expression explicite de ϱ^{SC}

Pour une forme plus explicite de (2.39), considérons tout d'abord le second terme à droite de l'équation (2.39) et dénotons le par ϱ' :

$$\varrho' = -i \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s + i\mathcal{L}} \mathcal{L}^1 \varrho_d^L. \quad (2.47)$$

Sachant que $\varrho_d^L = \sum_\xi |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \varrho_{\xi\xi}^L$ (en utilisant la définition (2.22)) et $\mathcal{L}^1 X = \frac{1}{\hbar} [V, X]$, il vient que

$$\varrho' = -\frac{1}{\hbar} \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mathcal{L} - is} [V, \sum_\xi |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \varrho_{\xi\xi}^L]. \quad (2.48)$$

En utilisant les états de diffusion comme les états propres de h (2.40), la décomposition spectrale du commutateur $[V, \sum_\xi |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \varrho_{\xi\xi}^L]$ s'écrit dans la base des états de diffusion sortant comme $\sum_{\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+| \langle \Psi_\alpha^+| [V, \sum_\xi |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \varrho_{\xi\xi}^L] |\Psi_\beta^+\rangle$. D'autre part, en représentation tétradique, le superopérateur \mathcal{L} , (A.6), s'écrit

$$\mathcal{L}_{\alpha\beta|\xi\xi'} = \frac{1}{\hbar} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \delta_{\alpha\xi} \delta_{\beta\xi'}, \quad (2.49)$$

tel que par itération, on a

$$\frac{1}{0^+ + i\mathcal{L}} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+| = -i\hbar \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+|. \quad (2.50)$$

Par substitution de cette égalité dans (2.48), ϱ' s'écrit dans la base des états de diffusion sortant comme

$$\varrho' = - \sum_{\xi\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+| \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} \varrho_{\xi\xi}^L \left[\langle \Psi_\alpha^+ | V | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | \Psi_\beta^+ \rangle - \langle \Psi_\alpha^+ | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | V | \Psi_\beta^+ \rangle \right]. \quad (2.51)$$

Parmi les techniques proposées pour la simplification de termes semblables, on a choisi de procéder ainsi.

En effet, comme $\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} |\Psi_\beta^+\rangle = G_\alpha^- |\Psi_\beta^+\rangle$, avec G_α^- est la fonction de Green retardée $G_\alpha^- = \frac{1}{\varepsilon_\alpha - h - i0^+}$, en déplaçant le facteur $\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+}$ aux endroits appropriés dans (2.51), il découle que

$$\varrho' = - \sum_{\xi\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+| \varrho_{\xi\xi}^L \left[\langle \Psi_\alpha^+ | V | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle - \langle \Psi_\alpha^+ | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | V G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle \right]. \quad (2.52)$$

En utilisant maintenant l'identité (2.46) ($G_\alpha^- = G_\alpha^{0-} + G_\alpha^{0-} V G_\alpha^-$) tout en l'insérant dans le premier terme en facteur de $\varrho_{\xi\xi}^L$ à droite de (2.52), sachant que G_α^{0-} commute avec le projecteur $|\varphi_\xi\rangle\langle\varphi_\xi|$, il vient que

$$\begin{aligned} \langle \Psi_\alpha^+ | V | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle &= \langle \Psi_\alpha^+ | V | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | G_\alpha^{0-} | \Psi_\beta^+ \rangle + \langle \Psi_\alpha^+ | V | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | G_\alpha^{0-} V G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle \\ &= \langle \Psi_\alpha^+ | V G_\alpha^{0-} | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | \Psi_\beta^+ \rangle + \langle \Psi_\alpha^+ | V G_\alpha^{0-} | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | V G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle. \end{aligned} \quad (2.53)$$

En reportant (2.53) dans (2.51), on obtient

$$\begin{aligned} \varrho' &= - \sum_{\xi\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+| \varrho_{\xi\xi}^L \left\{ \langle \Psi_\alpha^+ | V G_\alpha^{0-} | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | \Psi_\beta^+ \rangle \langle \Psi_\alpha^+ | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | V G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle \Psi_\alpha^+ | V G_\alpha^{0-} | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | V G_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Compte-tenu de l'identité $\langle \Psi_\alpha^+ | V G_\alpha^{0-} - \langle \Psi_\alpha^+ | = \langle \varphi_\alpha |$, la sommation du second et dernier

terme dans l'équation (2.54) donne

$$\begin{aligned}
\{(2\text{ème}) + (3\text{ème})\} \text{ termes dans (2.54)} &= [\langle \Psi_\alpha^+ | VG_\alpha^{0-} - \langle \Psi_\alpha^+ |] |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi | VG_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle \\
&= -\langle \varphi_\alpha | \varphi_\xi \rangle \langle \varphi_\xi | VG_\alpha^- | \Psi_\beta^+ \rangle \\
&= -\delta_{\alpha\xi} \langle \varphi_\xi | V | \Psi_\beta^+ \rangle \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} \\
&= -\delta_{\alpha\xi} \langle \varphi_\xi | V | \Psi_\beta^+ \rangle \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} \\
&= \langle \varphi_\xi | \varphi_\alpha \rangle \langle \varphi_\xi | G_\beta^{0+} V | \Psi_\beta^+ \rangle, \tag{2.55}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé la définition de G_α^- , le fait que $\langle \varphi_\xi | \varphi_\alpha \rangle = \delta_{\xi\alpha}$ et conséquemment $\delta_{\xi\alpha} \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} = \delta_{\xi\alpha} \frac{1}{\varepsilon_\xi - \varepsilon_\beta - i0^+}$. En substituant enfin (2.55) dans (2.54), nous obtenons

$$\varrho' = - \sum_\xi \varrho_{\xi\xi}^L |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi | \sum_{\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\alpha^+ | \Psi_\beta^+\rangle \langle \Psi_\beta^+ | + \sum_\xi \varrho_{\xi\xi}^L \sum_{\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+ | \delta_{\xi\alpha} \delta_{\xi\beta}, \tag{2.56}$$

qui s'écrit encore sous forme plus compacte comme

$$\varrho' = -\varrho_d^L + \sum_\xi |\Psi_\xi^+\rangle \langle \Psi_\xi^+ | \varrho_{\xi\xi}^L. \tag{2.57}$$

La combinaison de (2.57) et (2.39), permet de déduire que

$$\varrho^{SC} = \sum_\xi |\Psi_\xi^+\rangle \langle \Psi_\xi^+ | \varrho_{\xi\xi}^L, \tag{2.58}$$

est une projection des éléments diagonaux de l'opérateur densité ϱ^L (dans la base de h^0) sur l'espace des états de diffusion sortant.

2.4.3 Expression finale de ϱ^L

Revenons sur l'équation de départ (2.38). Par substitution de (2.58) dans cette dernière, nous obtenons l'équation qui est au coeur de ce travail

$$\varrho^L = \varrho^1 + \sum_\xi |\Psi_\xi^+\rangle \langle \Psi_\xi^+ | \varrho_{\xi\xi}^L, \tag{2.59}$$

où les éléments $\varrho_{\xi\xi}^L$ vérifient (2.33), dont l'expression explicite sera déterminée tout de suite.

Ainsi, (2.59) définit l'expression de l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer ϱ^L en présence d'un champ magnétique uniforme statique et d'intensité arbitraire [80]¹⁴.

2.5 Expression explicite de ϱ_d^L

Nous nous intéresserons ici à la dérivation des expressions explicites de l'opérateur densité ϱ_d^L et du superopérateur \mathbf{A} dans la base des états de diffusion en présence d'un champ magnétique \mathbf{B} . En fait, ces deux-là garderont, comme nous allons le voir, la même forme dérivée en l'absence du champ magnétique [64], avec la seule différence que maintenant les états de h et h^0 dépendent de \mathbf{B} . Nous présenterons brièvement dans cette section les étapes essentielles du calcul. Pour ce faire rappelons d'abord l'expression de l'opérateur densité de courant en présence d'un champ magnétique.

2.5.1 Opérateur densité de courant

A cause de l'existence des impuretés, le mouvement des électrons à l'intérieur de l'échantillon mésoscopique n'est pas invariant par translation. L'opérateur densité de courant en un point \mathbf{r}' du volume $\Omega = LS$ en présence d'un champ magnétique s'écrit

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}') = \frac{e}{2m^*} [(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\mathbf{p} - e\mathbf{A})]. \quad (2.60)$$

Introduisons, afin de simplifier la notation, l'opérateur différentiel (gauge-invariant) $\mathbf{D} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$. L'élément de matrice de la densité de courant dans toute base $\{|\alpha\rangle\}$, s'écrit

$$\mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{2m^*i} \langle \alpha | \mathbf{r} | \overleftarrow{\mathbf{D}} | \beta \rangle, \quad (2.61)$$

où $\overleftarrow{\mathbf{D}}$ est un opérateur antisymétrique de dérivée à droite et à gauche défini pour deux fonctions arbitraires $f(\mathbf{r})$ et $g(\mathbf{r})$ par

$$f(\mathbf{r}) \overleftarrow{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \mathbf{D} g(\mathbf{r}) - g(\mathbf{r}) \mathbf{D}^* f(\mathbf{r}) = -g(\mathbf{r}) \overleftarrow{\mathbf{D}}^* f(\mathbf{r}). \quad (2.62)$$

¹⁴Le champ magnétique peut être faible (voir chapitre 3) [81] ou intense (voir chapitre 5).

Par ailleurs, la divergence de $\mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ est donnée par :

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{2m^*i} \nabla \cdot [\langle \alpha | \mathbf{r} \rangle \overleftrightarrow{\mathbf{D}} \langle \mathbf{r} | \beta \rangle]. \quad (2.63)$$

Dans la base des états propres de h^0 , on montre que la divergence (2.63) s'écrit

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{e}{i\hbar} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}), \quad (2.64)$$

et dans la base des états de diffusion, elle s'écrit

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}^\pm(\mathbf{r}) = \frac{e}{i\hbar} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) (\Psi_\alpha^\pm(\mathbf{r}))^* \Psi_\beta^\pm(\mathbf{r}). \quad (2.65)$$

2.5.2 Expression formelle de ϱ_d^L

En suivant un calcul semblable à celui adopté dans la dérivation de ϱ^{SC} dans la base des états de diffusion, on a de prime abord $[w, \varrho_0] = \sum_{\alpha\beta} |\Psi_\alpha^+\rangle \langle \Psi_\beta^+| \langle \Psi_\alpha^+| [w, \rho_0] |\Psi_\beta^+\rangle$. On montre, après quelques manipulations algébriques [64], que

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathcal{P} \left\{ 1 - i\mathcal{L}^1 \frac{1}{s + i\mathcal{L}} \right\} [w, \rho_0] &= \sum_{\xi} |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \sum_{\alpha\beta} [w, \rho_0]_{\alpha\beta} \left\{ \langle \varphi_\xi | \Psi_\alpha^+ \rangle \langle \Psi_\beta^+ | \varphi_\xi \rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i0^+} \left[\langle \varphi_\xi | V | \Psi_\alpha^+ \rangle \langle \Psi_\beta^+ | \varphi_\xi \rangle - \langle \varphi_\xi | \Psi_\alpha^+ \rangle \langle \Psi_\beta^+ | V | \varphi_\xi \rangle \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

En adoptant les mêmes techniques élucidées au préalable, le membre de droite peut être simplifié davantage [64] en :

$$\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L = -\frac{i}{\hbar} \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathcal{P} \left\{ 1 - i\mathcal{L}^1 \frac{1}{s + i\mathcal{L}} \right\} [w, \rho_0] = \sum_{\xi} |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \langle \Psi_\xi^- | [w, \rho_0] | \Psi_\xi^- \rangle. \quad (2.67)$$

En outre, utilisons la technique de la décomposition spectrale de $\rho_0(h)$, qui à l'aide de la distribution δ de Dirac, $\rho_0(h)$ peut s'écrire sous forme d'une décomposition spectrale comme suit

$$\rho_0(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \delta(\varepsilon - h), \quad (2.68)$$

ou comme suit

$$\rho_0(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tau}{2\pi} e^{i(\varepsilon-h)\tau}. \quad (2.69)$$

Par ailleurs, l'utilisation de l'identité de Kubo, qui définit le commutateur d'un opérateur quelconque (ici $w(\mathbf{r})$) avec e^{-iht} en terme de ce même commutateur avec l'Hamiltonien h [9] :

$$[w, e^{-iht}] \equiv i \int_0^\tau dt e^{ih(t-\tau)} [h, w] e^{-iht}, \quad (2.70)$$

permet après quelques manipulations algébriques, d'exprimer l'élément de matrice de ce commutateur comme suit

$$[w, \rho_0]_{\alpha\beta} = -\frac{\rho_0(\varepsilon_\alpha) - \rho_0(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} [h, w]_{\alpha\beta}. \quad (2.71)$$

Mais puisque $V(\mathbf{r})$ et $w(\mathbf{r})$ commutent entre eux (puisqu'ils sont tous les deux fonction de la position) de même que $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $w(\mathbf{r})$, on montre que

$$\begin{aligned} [h, w] &= \frac{1}{2m^*} [(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot [\mathbf{p}, w] + [\mathbf{p}, w] \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A})] \\ &= \frac{-i\hbar}{2m^*} [(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot \nabla w + \nabla w \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A})]. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Par ailleurs, l'opérateur $\nabla w(\mathbf{r})$ peut être exprimé comme : $\nabla w(\mathbf{r}) = \int_\Omega d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla' w(\mathbf{r}')$ avec $w(\mathbf{r}')$ est la valeur propre de l'opérateur potentiel électrique au point \mathbf{r}' et Ω est le volume total de la structure (échantillon + terminaux). Par Substitution de cette expression dans (2.72), et en utilisant la définition de l'opérateur densité de courant (2.60), on montre que

$$\begin{aligned} [h, w] &= -\frac{i\hbar}{2m^*} \int_\Omega d\mathbf{r}' \nabla' w(\mathbf{r}') \cdot [(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(\mathbf{p} - e\mathbf{A})] \\ &= -\frac{i\hbar}{e} \int_\Omega d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.73)$$

En reportant (2.73) dans (2.71), on déduit que le commutateur $[w, \rho_0]_{\alpha\beta}$ est défini en terme de l'élément de matrice de l'opérateur densité de courant (2.61) comme suit

$$[w, \rho_0]_{\alpha\beta} = -\frac{i\hbar}{e} \frac{\rho_0(\varepsilon_\alpha) - \rho_0(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \int_\Omega d\mathbf{r}' \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}'). \quad (2.74)$$

Puisque dans (2.67) $|\Psi_\alpha\rangle = |\Psi_\beta\rangle = |\Psi_\xi^-\rangle$, on conclut que

$$\Lambda \varrho_d^L = -\frac{1}{e} \sum_\xi |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi | \rho'_0(\varepsilon_\xi) \int_\Omega d\mathbf{r}' \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}'), \quad (2.75)$$

avec $\rho'_0(\varepsilon_\xi) = \frac{\partial \rho_0(\varepsilon_\xi)}{\partial \varepsilon_\xi}$ est la dérivée par rapport à l'énergie ε_ξ de la fonction de distribution de Fermi-Dirac $\rho'_0(\varepsilon_\xi)$ et $\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}')$ est l'élément de matrice diagonal de l'opérateur densité de courant dans la base des états de diffusion entrant ; i.e.

$$\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') = \langle \Psi_\xi^- | \mathbf{j}(\mathbf{r}') | \Psi_\xi^- \rangle. \quad (2.76)$$

L'intégrale de volume à droite de (2.75) peut être transformée en une intégrale de surface selon le théorème de Green Ostogradski. En effet,

$$\int_\Omega d\mathbf{r}' \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}') = \int_\Omega d\mathbf{r}' \nabla' \cdot (\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') w(\mathbf{r}')) - \int_\Omega d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') (\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}')). \quad (2.77)$$

Mais comme $\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') = 0$ (nous pouvons le vérifier à partir de (2.65)), il découle

$$\int_\Omega d\mathbf{r}' \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}') = \oint_{S'} d\mathbf{S}' \cdot (\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}') w(\mathbf{r}')), \quad (2.78)$$

où S' est la surface engendrant le volume Ω .

Par substitution de (2.78) dans (2.75), on déduit que ϱ_d^L vérifie en régime stationnaire l'équation maîtresse formelle :

$$\Lambda \varrho_d^L = -\frac{1}{e} \sum_\xi |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi | \rho'_0(\varepsilon_\xi) \oint_S d\mathbf{S} \cdot (\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}) w(\mathbf{r})), \quad (2.79)$$

valide pour une structure à deux terminaux.

2.5.3 Evaluation du Superopérateur Master Λ dans le cadre de la théorie de diffusion

Il convient ainsi de connaître la forme explicite de l'action du superopérateur Λ (dont les propriétés sont présentées dans l'annexe B) sur un opérateur diagonal X . En effet, on montre

après un calcul fastidieux dans la base des états de diffusion [18, 67], que dans la limite du régime stationnaire $\mathbf{\Lambda}$ s'écrit en représentation tétradique comme

$$(\Lambda)_{\alpha\alpha/\zeta\zeta} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\xi} \delta(\varepsilon_{\xi} - \varepsilon_{\alpha}) |\langle \varphi_{\xi} | V | \Psi_{\alpha}^+ \rangle|^2 [\delta_{\zeta\alpha} - \delta_{\xi\zeta}], \quad (2.80)$$

où V est le potentiel d'interaction avec le désordre. Parmi ses propriétés (voir annexe B) citons que le superopérateur $\mathbf{\Lambda}$ est défini semi-positif. Ceci étant, la valeur propre zéro n'est pas exclue de son spectre ¹⁵.

Dans la théorie de diffusion, l'élément de matrice du potentiel d'interaction électrons-impuretés entre un état $|\varphi\rangle$ de h^0 et un état $|\Psi^+\rangle$ de h définit l'opérateur de transition dénoté \mathbf{T} . Les éléments de matrice de ce dernier sont donnés par

$$\mathbf{T}_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \mathbf{T} | \varphi_{\beta} \rangle = \langle \varphi_{\alpha} | V | \Psi_{\beta}^+ \rangle. \quad (2.81)$$

Comme la forme de V n'est pas explicite, dans le calcul de $\mathbf{T}_{\alpha\beta}$ on a juste besoin d'utiliser le fait que V est donné par la différence entre l'Hamiltonien h et h^0 : $V = h - h^0$. Ainsi l'élément de matrice (2.81) s'écrit

$$\langle \varphi_{\alpha} | V | \Psi_{\beta}^+ \rangle = \varepsilon_{\beta} \langle \varphi_{\alpha} | \Psi_{\beta}^+ \rangle - \langle \varphi_{\alpha} | h^0 | \Psi_{\beta}^+ \rangle, \quad (2.82)$$

car $h|\Psi_{\beta}^+\rangle = \varepsilon_{\beta}|\Psi_{\beta}^+\rangle$. Par application du théorème de Green au niveau de $\langle \varphi_{\alpha} | h^0 | \Psi_{\beta}^+ \rangle$, on montre après quelques manipulations algébriques que

$$\mathbf{T}_{\alpha\beta} = (\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\alpha}) \langle \varphi_{\alpha} | \Psi_{\beta}^+ \rangle + \frac{\hbar^2}{2m^*} \oint_S d\mathbf{S} \cdot \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \overleftrightarrow{\mathbf{D}} \Psi_{\beta}^+(\mathbf{r}). \quad (2.83)$$

\oint_S est l'intégrale étendue sur toute la surface S de la structure, i.e. $\oint_S = \int_{S_R} - \int_{S_L}$, où S_R et S_L sont les surfaces des terminaux droit et gauche, respectivement. Cependant, les contraintes sur les fonctions d'onde liées au confinement assurent que seules les surfaces perpendiculaires à

¹⁵Dans un calcul perturbatif de l'inverse de cet opérateur, on suppose souvent travailler dans un sous espace de Liouville ne contenant pas l'état propre correspondant à la valeur propre zéro de sorte que $\mathbf{\Lambda}$ est toujours défini positif [39].

l'axe x (axe de propagation du courant), contribuent aux régions asymptotiques¹⁶.

Pour des énergies égales $\varepsilon_\beta = \varepsilon_\alpha = \varepsilon$, (2.83) se réduit à

$$\mathbb{T}_{\alpha\beta}^\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} \oint_S d\mathbf{S} \cdot (\varphi_\alpha^\varepsilon)^*(\mathbf{r}) \overleftrightarrow{\mathbf{D}} \Psi_\beta^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}), \quad (2.84)$$

où on indexe par ε les transitions qui s'effectuent entre états de même énergie.

Ainsi, en insérant (2.84) dans (2.80), $\Lambda_{\alpha\alpha/\beta\beta}$ peut s'écrire en terme de l'élément de matrice de l'opérateur de transition $\mathbb{T}_{\alpha\beta}$ comme

$$\Lambda_{\alpha\alpha/\beta\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\xi \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\mathbb{T}_{\xi\alpha}|^2 [\delta_{\beta\alpha} - \delta_{\xi\beta}]. \quad (2.85)$$

En sus, en utilisant (2.35) pour X coïncidant avec ϱ_d^L , il vient que

$$\Lambda \varrho_d^L = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| \sum_\xi \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\mathbb{T}_{\xi\alpha}|^2 \left[(\varrho_d^L)_{\alpha\alpha} - (\varrho_d^L)_{\xi\xi} \right]. \quad (2.86)$$

2.6 Valeur moyenne de la densité de courant

Dans le régime stationnaire et dans l'approche de Landauer, la valeur moyenne de la densité de courant en un point \mathbf{r} en présence d'un champ magnétique est donnée par la trace du produit de l'opérateur densité de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ par l'opérateur densité ϱ^L :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \text{Tr} \varrho^L \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}^1(\mathbf{r}) + \mathbf{J}^{\text{SC}}(\mathbf{r}). \quad (2.87)$$

La séparation en $\mathbf{J}^1(\mathbf{r})$ et $\mathbf{J}^{\text{SC}}(\mathbf{r})$ est introduite uniquement pour la simplification des calculs (voir chapitres ultérieurs). Les valeurs moyennes de ceux-ci sont données par

$$\mathbf{J}^1(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \varrho_{\alpha\beta}^1 \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}), \quad (2.88a)$$

$$\mathbf{J}^{\text{SC}}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \varrho_{\alpha\beta}^{\text{SC}} \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_\xi \varrho_{\xi\xi}^L \mathbf{j}_{\xi\xi}^+(\mathbf{r}). \quad (2.88b)$$

¹⁶dans ces régions les ondes évanescentes s'annulent.

2.6.1 Conditions de conservation

Pour déterminer les conditions de conservation du courant électrique dans le cas statique (dc), nous avons à montrer que la valeur moyenne de la densité de courant en présence d'un champ magnétique \mathbf{B} , est constante dans l'espace et alors que $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0$.

De prime abord, (2.65) définit que la divergence des éléments diagonaux du vecteur densité de courant dans la base des états de diffusion sortant est nulle : $\nabla \cdot \mathbf{j}_{\xi\xi}^+(\mathbf{r}) = 0$. Ainsi, (2.88b) permet de conclure que la divergence de $\mathbf{J}^{\text{SC}}(\mathbf{r})$ est nulle : $\nabla \cdot \mathbf{J}^{\text{SC}}(\mathbf{r}) = 0$ et par conséquent que

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{J}^1(\mathbf{r}). \quad (2.89)$$

Donc reste à montrer que $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{J}^1(\mathbf{r}) = 0$. Pour ce faire explicitons (en suivant la même démarche de Barnger-Stone [16]) l'expression de $\mathbf{J}^1(\mathbf{r})$ (2.88a) en effectuant la trace dans la base de h définie par (2.8). Pour ceci, dans le régime stationnaire $\varrho_{\alpha\beta}^1$ est donné par

$$\varrho_{\alpha\beta}^1 = \frac{-i}{\hbar} \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)} [w, \rho_0]_{\alpha\beta}, \quad (2.90)$$

qui s'écrit sous forme plus explicite en tenant compte de (2.74) comme

$$\varrho_{\alpha\beta}^1 = -\frac{1}{e} \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)} \frac{\rho_0(\varepsilon_\alpha) - \rho_0(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' (\mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}')), \quad (2.91)$$

Par substitution de (2.91) dans (2.88b), la valeur moyenne de l'opérateur densité de courant, reliée au champ électrique $e\mathbf{E}(\mathbf{r}') = -\nabla' w(\mathbf{r}')$ par l'intermédiaire de la conductivité non locale $\overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, s'écrit

$$\mathbf{J}^1(\mathbf{r}) = \frac{1}{e} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \nabla' w(\mathbf{r}'), \quad (2.92)$$

avec

$$\overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \lim_{s \rightarrow 0^+} \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{s + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)} \frac{\rho_0(\varepsilon_\alpha) - \rho_0(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}), \quad (2.93)$$

est symétrique par permutation de \mathbf{r} et \mathbf{r}' . Sachant que dans la limite du régime stationnaire :

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s \pm \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)} = \pi\delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \mp iP\left(\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\right), \quad (2.94)$$

où $P\left(\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\right)$ définit la fonction partie principale, il vient que

$$\overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \sum_{\alpha\beta} \left[\pi\delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) - iP\left(\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\right) \right] \frac{\rho_0(\varepsilon_\alpha) - \rho_0(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}). \quad (2.95)$$

Il est important de souligner à ce niveau que la conductivité (2.95) est du type Kubo-Greenwood [82] mais généralisée¹⁷. Elle est définie en terme des éléments de matrice de l'opérateur densité de courant à l'équilibre et par conséquent des propriétés du système à l'équilibre. En particulier, en l'absence d'un champ magnétique dans la théorie ($\mathbf{B} = \mathbf{0}$), la densité de courant change de signe par renversement de temps : $\mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = -\mathbf{j}_{\tau_\alpha\tau_\beta}(\mathbf{r}')$ où τ_α est l'état obtenu à partir de α par renversement de temps. Mais comme $\mathbf{j}(\mathbf{r}')$ est hermitique, il vient que la partie principale (résultante de $\lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{1}{s + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)}$) est identiquement nulle. En ce sens, la conductivité est définie en terme de la fonction δ -Dirac sur les énergies de sorte qu'à la limite d'une température nulle, celle-ci est donnée par les états à l'énergie de Fermi [15].

Ainsi, la divergence de la densité de courant se présente comme suit

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{e} \lim_{s \rightarrow 0^+} \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{s + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \nabla \cdot \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' \nabla' w(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}'), \quad (2.96)$$

avec Ω est le volume à l'intérieur duquel le champ $e\mathbf{E}(\mathbf{r}') = -\nabla' w(\mathbf{r}')$ est non nul. Ce dernier s'annule dans les régions asymptotiques auxquelles on a associé la définition des potentiels constants w_i .

Par suite, l'intégrale de volume dans (2.96) peut être explicitée en

$$- \int_{\Omega} d\mathbf{r}' (\nabla' w(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')) = - \int_{\Omega} d\mathbf{r}' \nabla' \cdot (w(\mathbf{r}') \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')) + \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') (\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')). \quad (2.97)$$

¹⁷Comme il a été mentionné auparavant, en plus du terme en δ -dirac sur les énergies, dans un champ magnétique dans la théorie, la conductivité dépend aussi de la fonction partie principale sur les énergies.

Pour le même argument utilisé dans la formule (2.77), la première intégrale peut-être transformée selon le théorème de Green Ostogradski en une intégrale de surface (voir [16]) :

$$\int_{\Omega} d\mathbf{r}' \nabla' \cdot (w(\mathbf{r}') \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')) = \sum_{n=1}^2 (w_n) \int_{S_i} dS_i \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}'_n) \cdot \hat{\mathbf{x}}_i, \quad (2.98)$$

tel que $\hat{\mathbf{x}}_i$ s'étend à l'infini afin de modéliser les régions asymptotiques. (Moyennant certaines considérations mathématiques en relation avec la théorie des distributions, Baaranger-Stone (annexe B dans [16]), ont montré qu'aux régions asymptotiques avec \mathbf{B} champ magnétique arbitraire :

$$\lim_{\mathbf{x}_i \rightarrow \infty} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \int_{S_i} dS_i \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_i) \cdot \hat{\mathbf{x}}_i = 0, \quad (2.99)$$

tel que $\hat{\mathbf{x}}_i$ est le vecteur unité parallèle au terminal $i = L$ ou R , S_i est la section des terminaux gauche ou droit au point $\hat{\mathbf{x}}_i$, et Ω est la région finie bornée par S_i . Autrement dit, (2.98) ne contribue pas dans (2.97).

Il convient à ce niveau de souligner que le calcul des deux intégrales (2.77) et (2.97) semble à première vue posé problème. Il se trouve que le terme de surface s'annule dans (2.77) et non pas dans (2.97) [83]. Ce problème est en fait lié à l'ordre des limites considéré. Les limites du régime stationnaire ($s \rightarrow 0^+$) et thermodynamique (système très grand $\Omega \rightarrow \infty$) doivent être prises attentivement. En effet, dans le terme de surface dans (2.77), la limite $\Omega \rightarrow \infty$ est prise avant la limite du régime stationnaire d'où la nullité de ce dernier. Quant au même terme dans (2.97), la limite stationnaire est plutôt prise avant la limite $\Omega \rightarrow \infty$; c-à-d l'inverse [84].

Ainsi, en combinant les équations (2.96), (2.97), (2.98) et (2.99) ensemble, il vient que

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{e} \lim_{s \rightarrow 0^+} \sum_{\alpha\beta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{1}{s + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)} \nabla \cdot \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') (\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')). \quad (2.100)$$

Tenant compte de (2.94), et de la définition de $\nabla \cdot \mathbf{j}_{\beta\alpha}(\mathbf{r})$, (2.63), à la limite du régime stationnaire $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r})$ s'écrit

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{e} \sum_{\alpha\beta} [\pi \hbar \delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) - iP(\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta})] [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)] \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') (\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')). \quad (2.101)$$

A cause du facteur $[f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)]$, le terme en produit de $\delta(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)$ s'annule immédiatement, et seule la partie principale reste pertinente

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{i}{e} \sum_{\alpha\beta} [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)] P\left(\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\right) \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') (\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')). \quad (2.102)$$

En insérant encore une autre fois l'expression de $\nabla' \cdot \mathbf{j}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')$ dans cette dernière équation, on obtient

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha\beta} [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)] P\left(\frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}\right) \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \Psi_\beta(\mathbf{r}') (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta) \\ &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha\beta} [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)] \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \Psi_\beta(\mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (2.103)$$

où $xP\left(\frac{1}{x}\right) = 1$.

Enfin, la permutation des indices de sommation β et α dans le terme en facteur de $f(\varepsilon_\beta)$, permet de montrer que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha,\beta} f(\varepsilon_\alpha) \\ &\quad \left\{ \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \Psi_\beta(\mathbf{r}') - \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \Psi_\beta(\mathbf{r}) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') \Psi_\beta^*(\mathbf{r}') \Psi_\alpha(\mathbf{r}') \right\} \\ &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} f(\varepsilon_\alpha) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') \int d\beta \{ \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \Psi_\beta(\mathbf{r}') - \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \Psi_\beta(\mathbf{r}) \Psi_\beta^*(\mathbf{r}') \Psi_\alpha(\mathbf{r}') \}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

après avoir effectué la limite continue sur $\beta : \sum_{\beta} \rightarrow \int d\beta$. Comme l'intégration sur β donne un terme en $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ (voir relations de fermeture (2.8)), il vient que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} f(\varepsilon_\alpha) \int_{\Omega} d\mathbf{r}' w(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \{ \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') - \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}') \} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.105)$$

C'est à dire que la valeur moyenne de la densité de courant dans le régime stationnaire en

présence d'un champ magnétique uniforme dans la théorie est conservatrice dans le point de vue de Landauer.

De là, on peut facilement déduire d'un calcul explicite, les contraintes que doit satisfaire la conductivité électrique non locale en présence d'un champ magnétique une fois le régime stationnaire établi. En effet, de (2.89) et (2.92), il est possible d'écrire

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = - \int_{\Omega} d\mathbf{r}' \left(\nabla \cdot \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \nabla' \right) w(\mathbf{r}') - \sum_n w_n \nabla \cdot \int_{S_n} dS'_n \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{r}}_n = 0. \quad (2.106)$$

Conséquemment, deux contraintes découlent :

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \nabla' = 0, \quad \nabla \cdot \int_{S_i} dS'_i \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{r}}_i = 0, \quad \text{avec } i = L, R. \quad (2.107)$$

Rappelons ici qu'en l'absence d'un champ \mathbf{B} , le tenseur conductivité non locale est contraint de vérifier les conditions

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \nabla' \cdot \overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \quad (2.108)$$

différentes et plus subtiles que celles dérivées en présence du champ magnétique \mathbf{B} .

2.7 Valeur moyenne du flux de courant

La valeur moyenne du flux de courant définit à travers une section arbitraire \mathbf{S} par

$$i = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (2.109)$$

s'écrit dans l'approche de Landauer et pour la simplification des calculs qui suivront comme

$$I = \text{Tr} \rho^L i = I^1 + I^{SC}. \quad (2.110)$$

Ici, le courant I calculé dans l'approche de Landauer coïncide exactement avec celui qu'on calcul par l'approche de Kubo en utilisant les potentiels des réservoirs (voir discussion à la fin du chapitre suivant). En d'autres termes, le courant reste constant dans les deux approches mais les potentiels mesurés diffèrent. Cependant, I^1 du type Kubo dans (2.110) coïncide effectivement

avec la formule de courant dérivée par Fisher-Lee [15] à partir des potentiels induits dans les régions asymptotiques mais qui tient implicitement compte de l'effet des contacts avec les réservoirs adjacents. Dans un champ magnétique arbitraire, I^1 se présente comme suit :

$$I^1 = \frac{1}{e} \sum_{i=L,R} \eta_i \int_{S'_i} \int_S d\mathbf{S}'_i \cdot \left(\overleftrightarrow{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_i) w(\mathbf{r}'_i) \right) \cdot d\mathbf{S}, \quad (2.111)$$

où $\eta_L = 1$ et $\eta_R = -1$. D'autre part, $I^{\mathcal{SC}}$ s'écrit

$$I^{\mathcal{SC}} = \sum_{\xi} \rho_{\xi\xi}^L(i^+)_{\xi\xi}. \quad (2.112)$$

La prochaine étape consiste à expliciter les expressions des courants $I^{\mathcal{SC}}$ et I^1 . En sus, comme les intégrales de surface peuvent être choisies de manière arbitraire, il est alors possible (comme nous l'avons signalé au préalable) de les considérer dans les régions asymptotiques. Par suite, pour discuter le comportement asymptotique des états de diffusion entrant et/ou sortant donnés par (2.42a)-(2.43b), nous sommes contraint de travailler dans une jauge bien particulière.

2.8 Conclusion

Une théorie microscopique permettant la description de l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer en présence d'un champ magnétique uniforme arbitraire est formulée. Plus principalement, une solution concrète traduisant quantitativement l'effet des contacts entre terminaux et réservoirs est proposée.

En effet, en adoptant la technique de projection, nous montrons que le terme en $s\widehat{\varrho}(s)$ dans l'expression de l'opérateur densité ϱ^1 traduit l'effet des contacts, d'où ϱ^1 est du type Kubo puisqu'il est exprimé en terme du potentiel induit de part et d'autre de l'échantillon mésoscopique. En revanche, la nullité du terme $s\widehat{\varrho}_d(s)$, en régime stationnaire, permet la définition du traitement self-consistant (qui néglige l'effet des contacts) et par conséquent de définir l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer.

Ainsi, l'expression décrivant l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer (2.38)

en présence d'un champ magnétique arbitraire est très spectaculaire. Celle-ci nous a permis de déceler la différence entre l'approche de Kubo et celle de Landauer au niveau de l'opérateur densité, nécessaire pour le calcul de toute grandeur physique. Cette différence qui se manifeste dans le terme ϱ^{SC} (lié au traitement self-consistant) confirme, entre autre, l'idée de Landauer selon laquelle un terminal ne peut jamais remplacer un réservoir quelque soit sa longueur [59].

Nous concluons ainsi qu'une théorie de la réponse linéaire self-consistante est bien incontestable à l'opposé des prédictions de Baranger-Stone [16]. Mais, puisque ces auteurs proclament le cas réaliste d'une structure mésoscopique à plusieurs terminaux, il nous est possible de montrer que l'expression de l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer (2.38) reste crédible. Cependant, dans ce cas l'opérateur densité Landauer diagonal vérifiera l'équation maîtresse

$$\Lambda \varrho_d^I = -\frac{1}{e} \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| \rho'_0(\varepsilon_{\xi}) \sum_{i=1}^n \int_{S_i} d\mathbf{S}_i \cdot \left(\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}_i) w(\mathbf{r}_i) \right), \quad (2.113)$$

avec i est l'indice du terminal. C'est à dire qu'un traitement self-consistant est fiable indépendamment du nombre de terminaux considéré.

Chapitre 3

Magnétoconductance dans le point de vue de Landauer : Champ magnétique faible

3.1 Introduction

On trouve dans la littérature plusieurs tentatives de généralisation des conductances de Landauer (1.52) [10] et d'Economou-Soukoulis (1.53) [42] à plusieurs terminaux et à l'existence d'un champ magnétique. Les techniques adoptées par les différents auteurs se limitaient surtout à l'approche heuristique (méthode de comptage) dans la généralisation de la formule (1.52) [44], et aussi à l'approche par la théorie de la réponse linéaire dans la dérivation de (1.53) [55, 84, 17, 85].

Pour ce qui est de la formule (1.53) généralisée à plusieurs terminaux de n canaux en présence d'un champ magnétique, nous mentionnons le calcul probabiliste de Büttiker [86] et la réponse linéaire de Baranger-Stone [16] proposés tous deux à la fin des années 80.

Dans leur travail intitulé "Electrical linear response theory in an arbitrary magnetic field : A new Fermi surface formulation", Baranger-Stone suggèrent qu'une théorie de la réponse linéaire self-consistante n'est pas du tout souhaitée s'il s'agit d'une structure à plusieurs terminaux. En définissant les potentiels chimiques développés aux régions asymptotiques des terminaux comme

étant ceux des réservoirs adjacents, Baranger-Stone estiment avoir généralisé la formule (1.53) à plusieurs terminaux et plusieurs canaux de transmission en présence d'un champ magnétique et obtention alors de la formule Landauer-Büttiker (1.64) [12].

En parallèle avec la généralisation de la formule (1.53) dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, d'autres auteurs se sont intéressés à la généralisation de celle de Landauer. Thouless [66] et Langreth-Abrahamas [65] ont pu dériver à partir de la réponse linéaire une formule de conductance implicite mais assez complexe des coefficients de transmission et de réflexion. Celle-ci a le privilège de se réduire à la formule de Landauer dans la limite d'un seul canal de propagation. Cependant, seule la formule proposée par Büttiker-Imry-Landauer et Pinha (1.65) dans un cadre heuristique [44] a pu généraliser dans le temps la formule de Landauer à plusieurs canaux. Une formule certe généralisée mais souffrant de plusieurs inconsistances (section 1.4.3) [44, 64]. Aussi, il semble du point de vue de Büttiker¹, que ce résultat et notamment ce travail, est complètement erroné puisque seule la formule (1.53) est mesurable expérimentalement. Plus particulièrement, en analysant l'invariance de la formule BILP's par renversement du champ magnétique, Büttiker-Imry [45] ont montré que celle-ci est asymétrique (même en présence d'un flux du type Aharonov-Bohm). Néanmoins, Altshuler-Spivak, en s'appuyant sur l'approche par la localisation faible, ont montré qu'en l'absence d'impuretés magnétiques (sont à l'origine de l'asymétrie) les relations d'Onsager (1.50), pour la conductance, doivent en fait être toujours vérifiées [3, 31].

C'est ainsi que nous pouvons confirmer que toutes les tentatives pour la dérivation dans le cadre de la réponse linéaire d'une formule de la conductance à la Landauer généralisée même en l'absence d'un champ magnétique, ont échoué et ce jusqu'à l'apparition du travail de Benamira [18, 64]. Ce travail a permis la dérivation d'une formule plus générale de la conductance dans le cadre de l'approche de Landauer qui à énergie ε est donnée par

$$\mathcal{G}(\varepsilon) = \frac{2e^2}{h} \sum_a^\varepsilon \left\{ \frac{[(\mathbf{t}^L)^\dagger \mathbf{t}^L]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^R|^2 - |t_{ab}^L|^2)} + \frac{[(\mathbf{t}^R)^\dagger \mathbf{t}^R]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^L|^2 - |t_{ab}^R|^2)} \right\}, \quad (3.1)$$

¹Lors de sa rencontre à l'école pré-doctorale de physique mésoscopique des Houches en septembre 2001 en France.

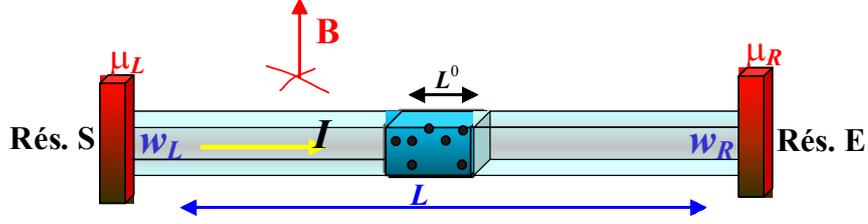


FIG. 3-1 – Echantillon mésoscopique en contact avec des terminaux liés à leur tour à des réservoirs. La structure est soumise à un champ magnétique $B\hat{z}$ faible.

avec v_a est la vitesse de propagation dans le canal a . La formule de Büttiker-Imry-Landauer-Pinha [44] représente un simple cas particulier correspondant à supposer qu'une fois le régime stationnaire établi, le courant qui circule dans chaque canal est constant.

Comme nous l'avons mentionné à la fin du chapitre 2, pour rendre accessible la discussion du comportement asymptotique des états de diffusion, nous nous limiterons ici au cas où le champ magnétique est faible ($\omega_c\tau < 1$, chapitre 1), de direction définie $\mathbf{B} = B\hat{z}$ et considérerons la jauge de Landau.

Pour une forme plus explicite de l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer (2.38), nous nous intéresserons en premier à résoudre, de manière exacte, l'équation décrivant l'opérateur densité diagonal. Pour ce faire, nous adopterons la théorie de collisions permettant d'exprimer les états de diffusion dans les régions asymptotiques en terme des coefficients de transmission et de réflexion. Dès lors, une nouvelle formule généralisée de la magnétoconductance dans l'approche de Landauer est dérivée. Une comparaison de celle-ci avec celle de Büttiker *et al* [12] est établie, l'invariance de cette dernière par renversement de \mathbf{B} est démontrée, et la limite où le champ magnétique s'annule est déduite. Pour terminer, une discussion des résultats obtenus est exposée à la fin de ce chapitre.

3.2 Description

Nous considérons la structure mésoscopique (échantillon + terminaux) soumise à l'action d'un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = B\hat{z}$ (Fig. 3-1) et travaillons dans la jauge de Landau telle que $\mathbf{A} = -By \mathbf{i}$. Dans cette jauge les états propres de h^0 sont donnés par le produit des ondes

planes dans la direction de propagation \hat{x} et des fonctions transverses décrivant le confinement dans les directions perpendiculaires y et z (chapitre 1) :

$$\varphi_\xi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm i k_a x} \chi_\xi(y, z). \quad (3.2)$$

L est la longueur totale de la structure, et ξ dénote : le vecteur d'onde longitudinale positif k_a , le canal de transmission a , et la direction de propagation $\sigma = \pm$, i.e. $\xi \equiv (a k_a \sigma)$. La fonction $\chi_\xi(y, z) \equiv \chi_{a k_a \sigma}(y, z)$ dépendante explicitement du vecteur d'onde k_a en présence d'un champ magnétique, définit la fonction transverse solution de l'équation de Schrodinger réduite

$$\left[\frac{1}{2m^*} (\pm \hbar k_a + e B y)^2 + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + V_c(y, z) \right] \chi_\xi(y, z) = \varepsilon_\xi \chi_\xi(y, z). \quad (3.3)$$

La forme explicite de $\chi_\xi(y, z)$ dépend du choix du potentiel de confinement $V_c(y, z)$ que nous n'explicitons pas ici. Celui-là sera pris en considération dans les calculs en admettant qu'aucun flux net du courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ ne parcourt les surfaces S_y et S_z perpendiculaires à la direction de propagation \hat{x} :

$$\int_{S_y, S_z} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.4)$$

Les fonctions transverses $\chi_\xi(y, z)$ sont supposées être normées $\int dy dz |\chi_{a, \pm}^{\varepsilon}(y, z)|^2 = 1$, mais elles ne sont pas orthogonales puisque l'Hamiltonien réduit dépend du vecteur d'onde k_a . ε_ξ dans (3.3) représente l'énergie propre à \hbar^0 correspondante au vecteur propre $|\varphi_\xi\rangle$. Par conséquent, les relations d'orthonormalisation et de fermeture sont données dans ce cas par

$$\frac{L}{2\pi} \langle \varphi_\xi | \varphi_\beta \rangle = \delta(k_a - k_b) \delta_{ab} \delta_{\sigma\sigma'}, \text{ et } \frac{L}{2\pi} \int d\xi \varphi_\xi^*(\mathbf{r}) \varphi_\xi(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.5)$$

Nous nous limiterons ici à appliquer l'opérateur densité (2.38) au calcul de la magnétoconductance dans un champ faible. Défini par le rapport entre courant circulant I , équation (2.110), à la différence entre les potentiels électrochimiques développés dans les régions asymptotiques $\frac{\Delta w}{e}$, la magnétoconductance dans l'approche de Landauer est alors donnée par

$$\mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = \mathcal{G}^1(\mathbf{B}) + \mathcal{G}^{SC}(\mathbf{B}). \quad (3.6)$$

La séparation de $\mathcal{G}^L(\mathbf{B})$ en une somme de deux conductances est introduite uniquement pour la simplification des calculs (comme il a été mentionné au préalable)². $\mathcal{G}^1(\mathbf{B})$, défini à partir des potentiels induits dans les régions asymptotiques, est identique à la formule Landauer-Büttiker qui demeure vérifiée même en présence d'un champ magnétique [16, 55, 84]. Cependant, $\mathcal{G}^{SC}(\mathbf{B})$ qui définit la partie de la conductance résultante du traitement self-consistant, sa détermination à partir de (2.112) exige la résolution de (2.79) et donc dérivation de ϱ_d^L . Une fois établie et après substitution dans (2.58), nous pouvons déduire l'expression explicite de I^{SC} et conséquemment celle de \mathcal{G}^{SC} .

Soulignons que $\mathcal{G}^{L, 1, SC}$ peuvent s'écrire sous forme d'intégrale sur l'énergie comme

$$\mathcal{G}^{L, 1, SC}(\mathbf{B}) = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \mathcal{G}^{L, 1, SC}(\varepsilon, \mathbf{B}), \quad (3.7)$$

telles que $\mathcal{G}^{L, 1, SC}(\varepsilon, \mathbf{B})$ définissent les magnetoconductances à énergie ε .

3.3 Expression de ϱ_d^L

Dans le cas d'un champ magnétique faible, l'intégrale dans (2.79) se réduit à

$$\oint_S d\mathbf{S} \cdot (\mathbf{j}^-(\mathbf{r})w(\mathbf{r}))_{\xi\xi} = \Delta w \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}) = \Delta w i_{\xi\xi}^-, \quad (3.8)$$

où $i_{\xi\xi}^-$ définit l'élément de matrice de l'opérateur flux de courant dans la base des états de diffusion entrant :

$$i_{\xi\xi}^- = \langle \Psi_\xi^- | i | \Psi_\xi^- \rangle = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r}), \quad (3.9)$$

et $\Delta w = w_L - w_R$ où w_L et w_R sont les valeurs du potentiel $w(\mathbf{r})$ dans les régions asymptotiques tels que $w_L \neq \mu_L$ et $w_R \neq \mu_R$ ³. Le potentiel électrochimique induit dans une structure soumise à un champ magnétique faible est indépendant de l'état dans lequel se trouve l'électron. Cette remarque très fondée traduit que le potentiel mesuré ici est un potentiel moyenné. En outre, la première égalité dans (3.8) résulte du fait que seules les surfaces transversales à \hat{x} contribuent

²L'idée de séparation des termes a été adoptée dans plusieurs travaux [14, 16, 77], indépendamment de l'observable considérée.

³à la limite balistique $w(\mathbf{r})$ est partout constant : $w_L = w_R = \text{constant}$.

car le courant s'annule sur les faces latérales. Comme le champ électrique est supposé nul à l'extérieur de Ω , les surfaces transversales peuvent être choisies arbitrairement en dehors de Ω .

Par substitution de (3.8) dans (2.79), on déduit que dans le régime stationnaire l'opérateur densité ϱ_d^L vérifie l'équation maîtresse formelle donnée par

$$\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L = -\frac{\Delta w}{e} (i^-) \rho'_0(h), \quad (3.10)$$

valide pour une structure à deux terminaux si le champ magnétique appliqué est faible.

Afin de résoudre (3.10), il faudrait simplifier tout d'abord l'expression de l'action du super-opérateur $\mathbf{\Lambda}$ sur l'opérateur densité ϱ_d^L , déterminer les éléments de matrice de $\mathbf{\Lambda}$ en représentation tétradratique, traduire ces éléments ainsi que les éléments du vecteur courant électrique en terme des éléments de la matrice de collision S , et enfin définir l'inverse de $\mathbf{\Lambda}$ pour déduire l'expression désirée.

Pour ce faire, rappelons d'abord l'expression de l'action de $\mathbf{\Lambda}$ sur $X = \varrho_d^L$, dont l'élément de matrice dans la base de h^0 s'écrit

$$(\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L)_{\xi\xi} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \delta(\varepsilon_{\xi} - \varepsilon_{\alpha}) |\mathbf{T}_{\xi\alpha}|^2 \{ \varrho_{\xi\xi}^L - \varrho_{\alpha\alpha}^L \}, \quad (3.11)$$

où \mathbf{T} représente l'opérateur de transition défini par (2.83).

Comme il est appaant, à cause de la fonction δ -Dirac, la sommation sur $\alpha \equiv (bk_b\sigma')$ dans (3.11) est réstrainte aux états d'énergie $\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_{\xi} = \varepsilon$. Dans ce cas la somme sur α est représentée par une double sommation sur les canaux et la direction de propagation et sur la composante longitudinale du vecteur d'onde de sorte qu'à la limite continue :

$$\sum_{\alpha} \equiv \sum_{k_b b \sigma'} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{L}{h} \sum_b \sum_{\sigma' = \pm} \int_{\varepsilon'_b}^{\infty} \frac{1}{v_b} d\varepsilon'. \quad (3.12)$$

ε'_b est l'énergie minimale au-dessus de laquelle le canal b devient conducteur [84], et

$$\begin{aligned} v_b &= \left. \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon_{\alpha}}{dk_b} \right|_{\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon'} = \frac{-i\hbar}{2m^*} \int_S ds \varphi_{b+}^*(\mathbf{r}) \overleftrightarrow{D}_x \varphi_{b+}(\mathbf{r}) \Big|_{\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon'} \\ &= \frac{\hbar}{m^*} \left(\sigma' k_b + \frac{e}{\hbar} B \int \chi_{b,\sigma'}^{\varepsilon'}(y,z) y \chi_{b,\sigma'}^{\varepsilon'}(y,z) dy dz \right), \end{aligned} \quad (3.13)$$

est, à énergie fixée, la vitesse de propagation dans le canal b . $v_b > 0$ est dépendante du champ magnétique [55, 16] mais indépendante de la direction de propagation puisque nous supposons le spectre d'énergie symétrique par rapport au point d'origine $B = 0$ (chapitre 1). Ainsi, en tenant compte de (3.12), il vient que

$$(\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L)_{(ak_a\sigma)(ak_a\sigma)} = \frac{L}{\hbar^2} \sum_b \sum_{\sigma'=\pm\sigma} \int \frac{1}{v_b} d\varepsilon_\alpha \delta(\varepsilon - \varepsilon_\alpha) \left| \mathbb{T}_{(ak_a\sigma)(bk_b\sigma')} \right|^2 \left\{ (\varrho_d^L)_{(ak_a\sigma)(ak_a\sigma)} - (\varrho_d^L)_{(bk_b\sigma')(bk_b\sigma')} \right\}. \quad (3.14)$$

Dénotons désormais par $\varphi_{a\pm}^\varepsilon(\mathbf{r})$ les fonctions propres de h^0 à énergie fixe $\varepsilon_\xi = \varepsilon$, qui se propagent dans le canal a dans les directions positive (+) et négative (-), et par $\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,\pm}(\mathbf{r})$ les états de diffusion entrant et sortant (de même énergie ε) qui résultent de la diffusion par les impuretés. En adoptant cette nouvelle notation, l'intégration sur l'énergie ε_α (k_a) dans (3.14) permet d'avoir

$$(\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \frac{L}{\hbar^2} \sum_b^{\varepsilon_\alpha=\varepsilon} \frac{1}{v_b} \left\{ \left| \mathbb{T}_{(a\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon \right|^2 \left[(\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon - (\varrho_d^L)_{(b\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon \right] + \left| \mathbb{T}_{(a\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon \right|^2 \left[(\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon - (\varrho_d^L)_{(b,-\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon \right] \right\}, \quad (3.15)$$

avec $\mathbb{T}_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} \oint d\mathbf{S} \cdot (\varphi_{a\sigma}^\varepsilon(\mathbf{r}))^* \overleftrightarrow{\mathbf{D}} \Psi_{b\sigma'}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r})$ et $(\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \langle \varphi_{a\sigma}^\varepsilon | \varrho_d^L | \varphi_{a\sigma}^\varepsilon \rangle$.

Puisque la description du transport dans les systèmes mésoscopiques se fait à travers la connection avec la théorie de collisions, comme il a été innové par Landauer [10], l'étape suivante consiste à formuler les résultats obtenus par la réponse linéaire en terme des éléments de la matrice de collision S .

Pour faire la connexion avec les coefficients de transmission et de réflexion relatifs à l'échantillon désordonné (définissant la matrice de collisions S), la surface S (sur laquelle on intègre) doit être prise dans une des régions asymptotiques gauche ou droite du système. Dans ces régions, nous aurons besoin de connaître seulement le comportement asymptotique des états de diffusion $\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,\pm}(\mathbf{r})$. Ils seront formés par une simple superposition des états propres de h^0 . En effet, dans chaque région, une fonction d'onde $\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,\pm}(\mathbf{r})$ originaire de cette région est donnée par la somme de la fonction d'onde incidente et d'une combinaison linéaire des ondes réfléchies. Si

par contre, elle est originaire de la région opposée, elle sera formée par une superposition des ondes transmises. Nous pouvons donc écrire les $\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,\pm}(\mathbf{r})$ de cette manière en introduisant les coefficients (amplitudes) de transmission et de réflexion de gauche à droite et vice versa.

Cependant, il s'avère que la condition de la conservation du flux de courant qui devrait assurer l'unitarité de la matrice de collision S est insuffisante lorsqu'il s'agit d'une structure de section finie (annexe E). Donc, pour y remédier, il est plutôt préférable de définir ces coefficients, non pas à partir des $\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,\pm}(\mathbf{r})$ et $\varphi_{a\pm}^{\varepsilon}(\mathbf{r})$ mais plutôt d'autres fonctions qui leurs sont proportionnelles, définies de telle sorte que le flux de particules incidentes soit égal à l'unité dans la direction de propagation. Pour ceci, dénotons par $\overline{\Psi}_{a\pm}^{\pm,\varepsilon}(\mathbf{r})$ les nouveaux états de diffusion renormalisés (entrant ou sortant) à énergie fixe ε résultant des états $\overline{\varphi}_{a\pm}^{\varepsilon}(\mathbf{r})$ et se propageant dans le canal a dans les directions positive (index $+$) et négative (index $-$), respectivement. Les fonctions d'ondes $\overline{\varphi}_{a\pm}^{\varepsilon}(\mathbf{r})$ sont définies ainsi

$$\begin{aligned}\overline{\varphi}_{a\pm}^{\varepsilon}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{L}{v_a}} \varphi_{a\pm}^{\varepsilon}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{v_a}} e^{\pm i k_a x} \chi_{a,\pm}(y, z).\end{aligned}\tag{3.16}$$

Conséquemment, à partir des équations de Lippmann-Schwinger (2.42a)-(2.43b), on a

$$\overline{\Psi}_{a\pm}^{\pm,\varepsilon}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{L}{v_a}} \Psi_{a\pm}^{\pm,\varepsilon}(\mathbf{r}).\tag{3.17}$$

Les états $\overline{\Psi}_{a\pm}^{\pm,\varepsilon}(\mathbf{r})$ vérifient la condition d'orthonormalisation et forment un espace d'Hilbert complet⁴. Ceci étant, il nous est possible de remplacer directement les états propres de h par les états de diffusion (comme il a été défini au chapitre 2). Notons que cette technique est bien équivalente à celle qui utilise le développement en terme des fonctions de Green [85]⁵.

On montre que dans les régions asymptotiques, et pour une énergie fixe, les états de diffusion

⁴Un choix judicieux de la normalisation [137] conduit à l'orthogonalité même dans une structure à plusieurs canaux [16].

⁵Nous analysons le comportement asymptotique des états de diffusion et non pas celui des fonctions de Green, comme il a été considéré dans les travaux précédents [15, 16, 14, 84, 55].

sortant $\overline{\Psi}_{a\pm}^{\varepsilon,\pm}(\mathbf{r})$ sont donnés en terme des fonctions d'ondes $\overline{\varphi}_{a\pm}^{\varepsilon}(\mathbf{r})$ par

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} t_{ba}^L \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L^0 \quad (3.18a)$$

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \overline{\varphi}_{a+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \sum_b^{\varepsilon} r_{ba}^L \overline{\varphi}_{b-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \ll 0 \quad (3.18b)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \overline{\varphi}_{a-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \sum_b^{\varepsilon} r_{ba}^R \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L^0 \quad (3.18c)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} t_{ba}^R \overline{\varphi}_{b-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}). \quad x \ll 0 \quad (3.18d)$$

De même les états de diffusion entrant et se propageant dans les deux directions positive et négative sont facilement déduit de ceux sortant par renversement du temps :

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} (t_{ab}^R)^* \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L^0 \quad (3.19)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) = \overline{\varphi}_{a-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \sum_b^{\varepsilon} (r_{ab}^L)^* \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \ll 0 \quad (3.20)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) = \overline{\varphi}_{a+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \sum_b^{\varepsilon} (r_{ab}^R)^* \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L^0 \quad (3.21)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} (t_{ab}^L)^* \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}). \quad x \ll 0 \quad (3.22)$$

Ces expressions ont été dérivées la première fois en l'absence d'un champ magnétique [15, 14, 18], mais on montre qu'elles demeurent aussi vérifiées en présence d'un champ magnétique uniforme [16]. t_{ba}^L (t_{ba}^R) est le coefficient de transmission du canal a du terminal gauche (droit) dans le canal b du terminal droit (gauche) et r_{ba}^L (r_{ba}^R) est le coefficient de réflexion du canal a dans le canal b du terminal gauche (droit). Ces coefficients définissent la matrice carrée S d'ordre $2n$, appelée matrice de diffusion

$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{r}^L & \mathbf{t}^R \\ \mathbf{t}^L & \mathbf{r}^R \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

avec \mathbf{r}^L , \mathbf{r}^R , \mathbf{t}^L , \mathbf{t}^R sont les sous matrices de réflexion et de transmission à droite R et à gauche L , respectivement. Par ailleurs, on montre en considérant la nouvelle normalisation des fonctions

d'ondes que la conservation du courant mène à l'unitarité de la matrice S (annexe E)⁶ :

$$SS^+ = S^+ S = 1, \quad (3.24)$$

Ainsi, les contraintes de conservation imposées par la conservation du courant sur les amplitudes de transmission et réflexion dans le régime stationnaire, se présentent comme suit

$$\mathbf{r}^L(\mathbf{r}^L)^+ + \mathbf{t}^R(\mathbf{t}^R)^+ = 1, \quad (3.25a)$$

$$\mathbf{r}^R(\mathbf{r}^R)^+ + \mathbf{t}^L(\mathbf{t}^L)^+ = 1, \quad (3.25b)$$

$$\mathbf{r}^L(\mathbf{t}^L)^+ + \mathbf{t}^R(\mathbf{r}^R)^+ = 0, \quad (3.25c)$$

et

$$(\mathbf{r}^L)^+ \mathbf{r}^L + (\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L = 1, \quad (3.26a)$$

$$(\mathbf{r}^R)^+ \mathbf{r}^R + (\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R = 1, \quad (3.26b)$$

$$(\mathbf{r}^L)^+ \mathbf{t}^R + (\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{r}^R = 0. \quad (3.26c)$$

Conséquemment, en utilisant la nouvelle renormalisation, (3.15) s'écrit

$$\begin{aligned} (\mathbf{\Lambda} \varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon &= \frac{v_a}{\hbar^2 L} \sum_b^\varepsilon \left\{ \left| \overline{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon \right|^2 \left[(\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon - (\varrho_d^L)_{(b\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon \right] \right. \\ &\quad \left. + \left| \overline{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon \right|^2 \left[(\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon - (\varrho_d^L)_{(b,-\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

où les $\overline{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon$ sont liés aux éléments de matrice de l'opérateur de transition \mathbb{T} par

$$\overline{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon = \sqrt{\frac{L}{v_a}} \sqrt{\frac{L}{v_b}} \mathbb{T}_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon. \quad (3.28)$$

Etant donné que la forme des états de diffusion sortant et entrant dans les régions asymptotiques est maintenant explicite, reste ainsi à calculer les éléments de matrice de l'opérateur de transition $\overline{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon$ (aussi des composantes du vecteur flux de courant $(i^\pm)_{(a\sigma)(a\sigma)}$ dont on aura besoin

⁶Avec la normalisation au flux unité, la conservation de la probabilité est équivalente à l'unitarité de la matrice S.

ultérieurement). Comme la condition de la conservation des éléments de matrice du vecteur densité de courant (D.5) reste vérifiée même dans $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ (avec $\overleftrightarrow{\mathbf{D}}$ remplacé par $\overleftrightarrow{\nabla}$) de même que les expressions des états de diffusion dans les régions asymptotiques (3.18a-h), il s'ensuit que les $\overline{\mathbf{T}}_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon$ coïncident avec ceux dérivés en l'absence d'un champ magnétique [64] :

$$\overline{\mathbf{T}}_{(a+)(b+)}^\varepsilon = -i \hbar (\delta_{ab} - t_{ab}^L), \quad (3.29a)$$

$$\overline{\mathbf{T}}_{(a+)(b-)}^\varepsilon = i \hbar r_{ab}^R, \quad (3.29b)$$

$$\overline{\mathbf{T}}_{(a-)(b-)}^\varepsilon = -i \hbar (\delta_{ab} - t_{ab}^R), \quad (3.29c)$$

$$\overline{\mathbf{T}}_{(a-)(b+)}^\varepsilon = i \hbar r_{ab}^L. \quad (3.29d)$$

D'autant plus, on peut montrer que les éléments de matrice de l'opérateur flux de courant dans la base des états de diffusion entrant ou sortant, $i^\pm = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}^\pm(\mathbf{r})$, sont donnés par

$$(i^+)_{(a+)(a+)}^\varepsilon = \frac{e}{L} v_a [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} = \frac{e}{L} v_a (\mathbf{\Pi}^+)_{(a+)(a+)}^\varepsilon, \quad (3.30a)$$

$$(i^+)_{(a-)(a-)}^\varepsilon = -\frac{e}{L} v_a [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} = \frac{e}{L} v_a (\mathbf{\Pi}^+)_{(a-)(a-)}^\varepsilon, \quad (3.30b)$$

$$(i^-)_{(a+)(a+)}^\varepsilon = \frac{e}{L} v_a [\mathbf{t}^L (\mathbf{t}^L)^+]_{aa} = \frac{e}{L} v_a (\mathbf{\Pi}^-)_{(a+)(a+)}^\varepsilon, \quad (3.30c)$$

$$(i^-)_{(a-)(a-)}^\varepsilon = -\frac{e}{L} v_a [\mathbf{t}^R (\mathbf{t}^R)^+]_{aa} = \frac{e}{L} v_a (\mathbf{\Pi}^-)_{(a-)(a-)}^\varepsilon. \quad (3.30d)$$

Les $\pm \frac{e}{L} v_a$ définissent les éléments de matrice du vecteur flux de courant $i_{(a\pm)(a\pm)}^\varepsilon$ dans la base de h^0 , et $(\mathbf{\Pi}^\pm)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon$ définissent les éléments du vecteur colonne $\mathbf{\Pi}^\pm$ que nous introduisons pour la simplification des calculs qui suivront. Ce vecteur permet d'écrire sous forme compacte à énergie donnée

$$i^\pm = \frac{e}{L} v \mathbf{\Pi}^\pm, \quad (3.31)$$

où v est, à énergie ε , l'opérateur vitesse diagonal dont les éléments sont les vitesses des canaux de transmission. Les éléments non diagonaux de l'opérateur vitesse (nuls dans notre cas) ont une contribution assez importante lorsqu'il s'agit d'états portés à des énergies différentes [56].

Partant de ces définitions, (3.27) conduit à

$$(\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a+)(a+)}^\varepsilon = \frac{v_a}{\hbar^2 L} \sum_b^\varepsilon \left\{ [|\overline{\mathbf{T}}_{a+b+}^\varepsilon|^2 + |\overline{\mathbf{T}}_{a+b-}^\varepsilon|^2] (\varrho_d^L)_{a+a+}^\varepsilon - |\overline{\mathbf{T}}_{a+b+}^\varepsilon|^2 (\varrho_d^L)_{b+b+}^\varepsilon - |\overline{\mathbf{T}}_{a+b-}^\varepsilon|^2 (\varrho_d^L)_{b-b-}^\varepsilon \right\}, \quad (3.32a)$$

$$(\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a-)(a-)}^\varepsilon = \frac{v_a}{\hbar^2 L} \sum_b^\varepsilon \left\{ [|\overline{\mathbf{T}}_{a-b+}^\varepsilon|^2 + |\overline{\mathbf{T}}_{a-b-}^\varepsilon|^2] (\varrho_d^L)_{a-a-}^\varepsilon - |\overline{\mathbf{T}}_{a-b+}^\varepsilon|^2 (\varrho_d^L)_{b+b+}^\varepsilon - |\overline{\mathbf{T}}_{a-b-}^\varepsilon|^2 (\varrho_d^L)_{b-b-}^\varepsilon \right\}. \quad (3.32b)$$

En utilisant les résultats précédents (3.29a-d), (3.32a) se simplifie en

$$\begin{aligned} (\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a+)(a+)}^\varepsilon &= \frac{v_a}{L} \sum_b^\varepsilon [\delta_{ab} - t_{ab}^L]^2 + |r_{ab}^R|^2 (\varrho_d^L)_{a+a+}^\varepsilon - [\delta_{ab} - t_{ab}^L]^2 (\varrho_d^L)_{b+b+}^\varepsilon - |r_{ab}^R|^2 (\varrho_d^L)_{b-b-}^\varepsilon \\ &= \frac{v_a}{L} \sum_b^\varepsilon [\delta_{ab} + |t_{ab}^L|^2 + |r_{ab}^R|^2] (\varrho_d^L)_{a+a+}^\varepsilon - [\delta_{ab} + |t_{ab}^L|^2] (\varrho_d^L)_{b+b+}^\varepsilon - |r_{ab}^R|^2 (\varrho_d^L)_{b-b-}^\varepsilon, \end{aligned} \quad (3.33)$$

puisque la fonction δ -kronecker rend le terme $-\delta_{ab}(t_{ab}^L + t_{ab}^{L*})(\varrho_d^L)_{a+a+}^\varepsilon + \delta_{ab}(t_{ab}^L + t_{ab}^{L*})(\varrho_d^L)_{b+b+}^\varepsilon$ nul. Cependant, en utilisant les contraintes (3.25a-c), on montre après quelques manipulations algébriques que

$$(\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a+)(a+)}^\varepsilon = \frac{v_a}{L} \sum_b^\varepsilon [\delta_{ab} - |t_{ab}^L|^2] (\varrho_d^L)_{(b+)(b+)}^\varepsilon - |r_{ab}^R|^2 (\varrho_d^L)_{(b-)(b-)}^\varepsilon. \quad (3.34)$$

En identifiant ce résultat avec la définition

$$(\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a+)(a+)}^\varepsilon = \sum_b^\varepsilon (\mathbf{\Lambda})_{(a+)(a+)|(b+)(b+)}^\varepsilon (\varrho_d^L)_{(b+)(b+)}^\varepsilon + (\mathbf{\Lambda})_{(a+)(a+)|(b-)(b-)}^\varepsilon (\varrho_d^L)_{(b-)(b-)}^\varepsilon, \quad (3.35)$$

nous déduisons alors que

$$(\mathbf{\Lambda})_{(a+)(a+)|(b+)(b+)}^\varepsilon = \frac{v_a}{L} [\delta_{ab} - |t_{ab}^L|^2], \quad (\mathbf{\Lambda})_{(a+)(a+)|(b-)(b-)}^\varepsilon = -\frac{v_a}{L} |r_{ab}^R|^2. \quad (3.36)$$

De la même manière, (3.32b) permet de montrer que

$$(\mathbf{\Lambda})_{(a-)(a-)|(b+)(b+)}^\varepsilon = \frac{v_a}{L} [\delta_{ab} - |t_{ab}^R|^2], \quad (\mathbf{\Lambda})_{(a-)(a-)|(b-)(b-)}^\varepsilon = -\frac{v_a}{L} |r_{ab}^L|^2. \quad (3.37)$$

Il nous est maintenant possible d'écrire $(\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon$ sous forme plus compacte comme

$$(\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \frac{1}{L} v_a \sum_b \sum_{\sigma'=\pm\sigma}^\varepsilon [\Gamma]_{(a\sigma)(a\sigma)|(b\sigma')(b\sigma')}^\varepsilon (\varrho_d^L)_{(b\sigma')(b\sigma')}^\varepsilon, \quad (3.38)$$

où $[\Gamma]_{(a\sigma)(a\sigma)|(b\sigma')(b\sigma')}^\varepsilon$ donnés par

$$\begin{aligned} (\Gamma)_{(a+)(a+)|(b+)(b+)}^\varepsilon &= \delta_{ab} - |t_{ab}^L|^2, \\ (\Gamma)_{(a+)(a+)|(b-)(b-)}^\varepsilon &= -|r_{ab}^R|^2, \\ (\Gamma)_{(a-)(a-)|(b-)(b-)}^\varepsilon &= \delta_{ab} - |t_{ab}^R|^2, \\ (\Gamma)_{(a-)(a-)|(b+)(b+)}^\varepsilon &= -|r_{ab}^L|^2, \end{aligned} \quad (3.39)$$

définissent à énergie ε la nouvelle matrice, sans dimension, $\mathbf{\Gamma}$ (matrice $(2n \times 2n)$) :

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} \left[\delta_{ab} - |t_{ab}^L|^2 \right]_{n \times n} & \left[-|r_{ab}^R|^2 \right]_{n \times n} \\ \left[-|r_{ab}^L|^2 \right]_{n \times n} & \left[\delta_{ab} - |t_{ab}^R|^2 \right]_{n \times n} \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

$\mathbf{\Gamma}$ a pour déterminant zéro à cause des contraintes de conservation (3.25a-f)⁷.

Formellement, (3.38) s'écrit à énergie ε comme

$$\mathbf{\Lambda}\varrho_d^L = \left[\frac{1}{L} v \mathbf{\Gamma} \right] \varrho_d^L. \quad (3.41)$$

Celle-ci combinée avec (3.10) et (3.31), permet d'écrire à énergie ε

$$\left[\frac{1}{L} v \mathbf{\Gamma} \right] \varrho_d^L = -\frac{\Delta w}{e} \rho'_0(\varepsilon) i^- = -\frac{\Delta w}{L} \rho'_0(\varepsilon) (v \mathbf{\Pi}^-). \quad (3.42)$$

Puisque l'expression de départ (3.10) est simplifiée et $\mathbf{\Gamma}$ et i^- sont exprimés en terme des probabilités de transmission et réflexion, il est maintenant possible de retrouver ϱ_d^L solution de (3.10) ou de (3.42). Pour ce faire, calculons en premier l'inverse de $\mathbf{\Gamma}$.

⁷En effet, comme la somme des éléments de matrice de chaque ligne et de chaque colonne est nulle, on montre que $\det \mathbf{\Gamma} = 0$ [135].

3.3.1 Inverse de Γ

En raison des contraintes physiques (3.25a-f), la matrice Γ et par conséquent Λ n'est pas inversible.

Comme Λ a la dimension de l'inverse d'un temps, la première alternative proposée pour le calcul de son inverse, en l'absence d'un champ magnétique dans la théorie, s'est reposée sur l'hypothèse de l'existence d'un temps de relaxation globale (voir annexe F)⁸ [18]. Cette hypothèse admet qu'il existe une fonction τ_α dépendante essentiellement de l'énergie de sorte que l'action de l'inverse de Λ sur l'opérateur densité de courant se présente comme suit

$$[\Lambda \mathbf{j}(\mathbf{r})]_{\alpha\alpha} = \tau_\alpha^{-1} \mathbf{j}_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}), \quad (3.43)$$

d'où par itération⁹ :

$$[\Lambda^{-1} \mathbf{j}(\mathbf{r})]_{\alpha\alpha} = \tau_\alpha \mathbf{j}_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}). \quad (3.44)$$

C'est en procédant ainsi que Benamira [18] a pu dériver une formule générale de la conductance de Landauer qui ne souffre d'aucune inconsistance. Cependant, cette formule dérivée en l'absence d'un champ magnétique, dépendante explicitement des vitesses de propagation des canaux, s'avère non exacte.

Par ailleurs, nous n'allons pas suivre ce chemin, mais nous allons plutôt nous intéresser au calcul de l'inverse du superopérateur (sans dimension) Γ de manière exacte. En effet, après un calcul laborieux (voir annexes B et C), nous avons conclu que pour une structure mésoscopique à deux terminaux avec n canaux de propagation, la matrice non inversible Γ peut être remplacée par la matrice inversible $\tilde{\Gamma}$ définie par

$$\tilde{\Gamma} = \Gamma - \theta \Sigma, \quad (3.45)$$

avec θ est une constante non nulle arbitraire et Σ est la matrice dont les éléments sont tous égaux à un; i.e. $(\Sigma)_{(a\sigma)(b\sigma')} = 1$.

⁸On montre que cette solution est exacte pour les diffusions élastiques et constitue souvent une très bonne approximation pour les diffusions inélastiques [68].

⁹Dans ce travail, on suppose que l'inverse de Λ existe seulement après soustraction de la valeur propre nulle du spectre.

Par itération, $\tilde{\Gamma}$ appliquée à un vecteur quelconque X , donne

$$[\frac{1}{L}v\tilde{\Gamma}]^{-1}X = L\tilde{\Gamma}^{-1}v^{-1}X, \quad (3.46)$$

puisque v est non nulle et l'inverse du produit est donné par le produit des inverses. Autrement, on associe à Λ l'inverse $\tilde{\Lambda}^{-1}$ dont l'action sur i^- se réduit à

$$\tilde{\Lambda}^{-1}i^- = L\tilde{\Gamma}^{-1}v^{-1}i^- = e\tilde{\Gamma}^{-1}\mathbf{\Pi}^-, \quad (3.47)$$

une expression explicitement indépendant des vitesses¹⁰.

En combinant les équations (3.47) et (3.42) ensemble, à énergie ε les éléments de matrice de l'opérateur densité diagonal dans l'approche de Landauer solution de (3.42), se présentent comme suit

$$(\varrho_d^L)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \Delta w [-f'(\varepsilon)] (\tilde{\Gamma}^{-1}\mathbf{\Pi}^-)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon, \quad (3.48)$$

ou formellement, à cette énergie, comme suit

$$\varrho_d^L = \Delta w [-f'(\varepsilon)] (\tilde{\Gamma}^{-1}\mathbf{\Pi}^-). \quad (3.49)$$

En tenant compte de (3.40) et de (3.30a-d), il devient apparent de (3.49) que ϱ_d^L est une fonction assez complexe des coefficients de transmission et réflexion, mais explicitement indépendante des vitesses de propagation, ce qui est un fait tout à fait remarquable comme on va le voir.

Par substitution de ce résultat dans (2.58) et (2.57), il est important de souligner qu'en terme de probabilité de transmission, ϱ^1 est d'ordre zéro en le coefficient de transmission t , alors que ϱ_d^L est d'ordre un. Ceci étant, à la limite d'une faible transmission, ϱ_d^L et par conséquent ϱ^{SC} sont insignifiants devant ϱ^1 . Ainsi, l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer ϱ^L dans (2.57) coïncidera avec celui du type Kubo ϱ^{11} . Ce résultat est très encourageant puisque nous vérifions un des critères importants pour la fiabilité du formalisme de Landauer pour le transport mais au niveau cette fois-ci de l'opérateur densité.

Après résolution de (3.42) et établissement alors de l'expression de ϱ_d^L pour une énergie don-

¹⁰ v produit v^{-1} définit l'opérateur identité.

née ε , il est maintenant possible de déterminer l'expression explicite de la partie self-consistante de la conductance à partir de (2.112).

3.4 Evaluation de \mathcal{G}^{SC} en terme des coefficients de transmission et réflexion

Ayant montré à la limite d'un champ magnétique faible perpendiculaire au flux de courant, que l'opérateur densité $\varrho_{\alpha\alpha}^L$ est donné par (3.49), la substitution de celui-là dans (2.112), permet d'écrire

$$\begin{aligned} I^{SC} &= \sum_{\alpha} \varrho_{\alpha\alpha}^L(i^+)_{\alpha\alpha} \\ &= \frac{\Delta w}{e} \sum_{\alpha} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] (i^+)_{\alpha\alpha} (\tilde{\mathbf{\Lambda}}^{-1} i^-)_{\alpha\alpha} \\ &= \Delta w \sum_{\alpha} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}) (i^+)_{\alpha\alpha} (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{\Pi}^-)_{\alpha\alpha}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

où $(i^+)_{\alpha\alpha} = \langle \varphi_{\alpha} | i^+ | \varphi_{\alpha} \rangle = \langle \Psi_{\alpha}^+ | i | \Psi_{\alpha}^+ \rangle$. Ainsi à énergie ε , la conductance qui en découle est donnée par

$$\mathcal{G}^{SC}(\varepsilon, \mathbf{B}) = e \sum_{\alpha} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}) (i^+)_{\alpha\alpha} (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{\Pi}^-)_{\alpha\alpha}. \quad (3.51)$$

En tenant compte maintenant de (3.12), $\mathcal{G}^{SC}(\varepsilon, \mathbf{B})$ s'écrit comme

$$\mathcal{G}^{SC}(\varepsilon, \mathbf{B}) = e \sum_{a\sigma} \int_{\varepsilon_a}^{\infty} d\varepsilon_{\alpha} \frac{1}{v_a} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}) (i^+)_{\alpha\alpha} (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{\Pi}^-)_{\alpha\alpha}. \quad (3.52)$$

Après intégration sur l'énergie ε_{α} , et utilisation encore une fois de la définition (3.49), il vient que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{SC}(\varepsilon, \mathbf{B}) &= \frac{e^2}{L} \frac{L}{2\pi\hbar} \sum_{a\sigma}^{\varepsilon} (\mathbf{\Pi}^+)_{(a\sigma)(a\sigma)} (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{\Pi}^-)_{(a\sigma)(a\sigma)} \\ &= \frac{e^2}{h} \sum_{a\sigma}^{\varepsilon} \sum_{b\sigma'}^{\varepsilon} (\mathbf{\Pi}^+)_{(a\sigma)(a\sigma)} [\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1}]_{(a\sigma)|(b\sigma')} (\mathbf{\Pi}^-)_{(b\sigma')(b\sigma')}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Autrement dit, la conductance résultante des effets liés à la self-consistance est explicitement indépendante des vitesses. Formellement, à énergie fixe ε , cette conductance s'écrit

$$\mathcal{G}^{\text{sc}}(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{h} (\mathbf{\Pi}^+) \cdot (\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{\Pi}^-), \quad (3.54)$$

où $\frac{e^2}{h}$ est la quantité universelle ayant la mesure d'une conductance, et le produit scalaire (\cdot) est défini de telle sorte que pour X et Y deux vecteurs quelconques : $X \cdot Y = X^t Y = Y^t X$ avec t définit le transposé.

3.5 Evaluation de $\mathcal{G}^1(\mathbf{B})$

La formule de la conductance, avec une mesure effectuée à l'intérieur des réservoirs, a été dérivée quantitativement dans la littérature en présence d'un champ magnétique. Parmi ces travaux, citons celui de Fisher-Lee [15], de Szafer-Stone [14], de Baaranger-Stone [16], de Nöckel *et al* [84], etc. ...

En raison de l'intérêt tout particulier que fournit cette formule à notre travail, nous proposons dans cette section d'exposer, brièvement, les traits majeurs qui ont été notamment suivis par Nöckel *et al* [84] pour aboutir à la formule souhaitée.

La valeur moyenne du flux de courant à travers une section arbitraire \mathbf{S} est définie par la trace du produit de l'opérateur densité (2.13) par l'opérateur flux de courant ($i = \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r})$). Cette trace se réduit après quelques manipulations algébriques à

$$\begin{aligned} I^1 &= \text{Tr} \varrho^1 i = \text{Tr} \left[\varrho^1 \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) \right] = \sum_{\alpha\beta} \varrho_{\alpha\beta}^1(i)_{\beta\beta} \\ &= \frac{i\hbar}{e} \sum_{\alpha\beta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{1}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha - i0^+} \int dS \langle \Psi_\alpha^+ | \mathbf{j}(\mathbf{r}) | \Psi_\beta^+ \rangle \oint_{S'} dS' \langle \Psi_\beta^+ | \mathbf{j}(\mathbf{r}') | \Psi_\alpha^+ \rangle w(\mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (3.55)$$

après avoir tenu compte des conditions de conservation (3.25a-f). I^1 s'écrit aussi sous forme plus compacte (relativement à (2.111)) en terme du tenseur conductivité non locale à champ

faible comme

$$I^1 = \frac{1}{e} \sum_{i=L,R} \eta_i w_i \int_{S'_i} \int_S d\mathbf{S}'_i \cdot \vec{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.56)$$

Puisque la surface d'intégration peut être choisie de manière arbitraire, on considère les régions asymptotiques pour lesquelles les potentiels électrochimiques correspondants sont constants. Par conséquent, même les états de diffusion seront aussi développés dans les régions asymptotiques (voir équations (3.18a)-(3.20)).

En utilisant la technique de l'intégration dans le plan complexe [84], les auteurs obtinrent après quelques manipulations algébriques l'expression

$$I^1 = \frac{1}{2} \Delta w \sum_{\xi} [-f'(\varepsilon_{\xi})] (i^+)_{\xi\xi}, \quad (3.57)$$

avec $f'(\varepsilon_{\xi}) = \frac{\partial f(\varepsilon_{\xi})}{\partial \varepsilon_{\xi}}$. Puisque I^1 peut aussi s'écrire sous forme d'une intégrale sur l'énergie comme

$$I^1 = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] I^1(\varepsilon), \quad (3.58)$$

il s'ensuit que la conductance qui en découle s'écrit

$$\mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{I^1(\varepsilon)}{\Delta w/e} = \frac{e}{2} \sum_{\xi} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\xi}) (i^+)_{\xi\xi}. \quad (3.59)$$

En utilisant la notation (3.31) introduite précédemment et en tenant compte de (3.12), telle que

$$\mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{2} \frac{1}{L\hbar} \sum_{a\sigma}^{\varepsilon} \int d\varepsilon_{\xi} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\xi}) (\Pi^+)_{(a\sigma)(a\sigma)}^{\varepsilon}, \quad (3.60)$$

on montre après intégration sur ε_{ξ} , que cette magnétoconductance s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B}) &= \frac{e^2}{2\hbar} \sum_{a\sigma}^{\varepsilon} \sigma (\Pi^+)_{(a\sigma)(a\sigma)} \\ &= \frac{e^2}{2\hbar} (\mathbf{\Pi}^+) \cdot \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (3.61)$$

où $\mathbf{1}$ est le vecteur dont les composantes sont $(\mathbf{1})_{(a\pm)} = \pm 1$. En explicitant les éléments de $\mathbf{\Pi}^+$,

\mathcal{G}^1 s'écrit sous forme plus explicite en terme des coefficients de transmission L et R comme

$$\mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{2h} \sum_a^\varepsilon \left\{ \left[(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L \right]_{aa} + \left[(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R \right]_{aa} \right\}. \quad (3.62)$$

Cette formule est connue sous le nom de formule Landauer-Büttiker [12] généralisée à l'existence d'un champ magnétique [15, 14, 16, 84, 55].

3.6 Expression générale de la magnéto-conductance $\mathcal{G}^L(\mathbf{B})$

La combinaison de (3.6), (3.54) et (3.61), permet de déduire qu'à énergie fixe ε la magnéto-conductance de Landauer est donnée par

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{h} \sum_{a\sigma}^\varepsilon \sum_{b\sigma'}^\varepsilon (\Pi^+)_{(a\sigma)(a\sigma)} (\tilde{\Gamma}^{-1})_{(a\sigma)|(b\sigma')} (\Pi^-)_{(b\sigma')(b\sigma')} + \frac{e^2}{2h} \sum_{a\sigma}^\varepsilon (\Pi^+)_{(a\sigma)(a\sigma)}. \quad (3.63)$$

Formellement, (3.63) s'écrit

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{h} \left\{ \mathbf{\Pi}^+ \cdot (\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) + \frac{1}{2} (\mathbf{\Pi}^+ \cdot \mathbf{1}) \right\}. \quad (3.64)$$

Ce résultat peut être simplifié davantage en utilisant les propriétés de la matrice $\tilde{\Gamma}$. En effet, comme $\tilde{\Gamma}$ est inversible ($\tilde{\Gamma}^{-1} \tilde{\Gamma} = \tilde{\Gamma} \tilde{\Gamma}^{-1} = \mathbf{1}$ avec $\mathbf{1}$ définit la matrice unité $(2n \times 2n)^{12}$), (3.64) s'arrange aussi en

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) &= \frac{e^2}{h} (\mathbf{\Pi}^+) \cdot \left[(\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) + \frac{1}{2} (\tilde{\Gamma}^{-1} \tilde{\Gamma}) \mathbf{1} \right] \\ &= \frac{e^2}{h} (\mathbf{\Pi}^+) \cdot \left[\tilde{\Gamma}^{-1} \left\{ \mathbf{\Pi}^- + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma} \mathbf{1} \right\} \right]. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Par ailleurs, en tenant compte des définitions (3.40) et (3.30a-d), et des contraintes physiques (3.25a-f), nous montrons que

$$\mathbf{\Pi}^- + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma} \mathbf{1} = \mathbf{1}. \quad (3.66)$$

¹²Au superopérateur identité \mathcal{I} défini au préalable (2.24), on associe la matrice unité $\mathbf{1}$ d'ordre $(2n \times 2n)$.

Ainsi, sous forme plus convenable, la magnétoconductance (3.65) se présente comme

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{h} (\mathbf{\Pi}^+) \cdot [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}], \quad (3.67)$$

avec $\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}$ définit un vecteur colonne dont les éléments sont indépendants de la constante θ (voir (3.45)) :

$$[\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a\sigma)}^\varepsilon = \sum_b^\varepsilon \sum_{\sigma'=\pm\sigma} [\tilde{\Gamma}^{-1}]_{(a\sigma)|(b\sigma')}^\varepsilon (1)_{(b\sigma')(b\sigma')}. \quad (3.68)$$

Finalement, en terme des coefficients de transmission et réflexion, nous montrons que la formule de la magnéto-conductance dans le point de vue de Landauer s'écrit [87]

$$\mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = 2\frac{e^2}{h} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^\varepsilon \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)}^\varepsilon + [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (3.69)$$

ou aussi

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = & 2\frac{e^2}{h} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_{ab}^\varepsilon \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} \left[(\tilde{\Gamma}^{-1})_{a+|b+}^\varepsilon - (\tilde{\Gamma}^{-1})_{a+|b-}^\varepsilon \right] + \right. \\ & \left. [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} \left[(\tilde{\Gamma}^{-1})_{a-|b-}^\varepsilon - (\tilde{\Gamma}^{-1})_{a-|b+}^\varepsilon \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

en tenant compte de la dégénérescence de spin. Ce résultat est au coeur de ce chapitre. En effet, il généralise la formule de la conductance de Landauer [88] à plusieurs canaux et à l'existence d'un champ magnétique dans la théorie.

De prime abord, la généralité de notre formule est liée au fait qu'elle est explicitement indépendante des vitesses de propagation dans les canaux. Ceci est un fait tout à fait remarquable car aucune des formules retrouvées dans la littérature, parmi celles qui estiment avoir généralisé la formule de Landauer [44, 64], n'a présenté cet aspect et sachant notamment que cette dépendance des vitesses est aussi absente dans la formule du type Landauer-Büttiker généralisée¹³ (1.64). En conséquence, le problème lié à la possibilité de discontinuité, si un des canaux devient non conducteur ($v_a = 0$) au passage d'un nombre $n + 1$ de canaux à un nombre n [44], est maintenant indiscutable.

¹³Ceci pourrait former une des raisons de son succès dans l'interprétation des mesures expérimentales effectuées à l'intérieur des réservoirs.

En outre, en variant le champ magnétique ou la concentration du désordre, la magnétoconductance oscille contrairement aux prédictions classiques de la théorie de Drude (chapitre 1).

3.7 Discussion

Comme toute formule généralisée, (3.70) doit vérifier certaines limites que les traitements quantitatif et qualitatif imposent. Ceux-là permettent de connaître l'étendue de son application et surtout sa fiabilité vis à vis des cas limite.

De prime abord, nous montrons qu'à la limite d'une transmission totale (limite balistique), la magnétoconductance (3.70) vérifie l'intuition physique selon laquelle la résistance d'un échantillon parfait est nulle¹⁴. En outre, à la limite d'une très faible transmission, \mathcal{G}^L s'annule de même que la magnétoconductance Landauer-Büttiker (3.62).

Par suite, considérons le cas où les canaux de propagation sont non corrélés. Dans ce cas $|t_{ab}^{L(R)}|^2 = T_a \delta_{ab}$ et $|r_{ab}^{L(R)}|^2 = R_a \delta_{ab}$ (δ fonction de Kronecker) et $\tilde{\Gamma}$ sera défini par (C.16) (annexe C). Nous montrons, après inversion de $\tilde{\Gamma}$ et substitution dans (3.70) que celle-ci se réduit à

$$\mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = 2 \frac{e^2}{h} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^{\varepsilon} \frac{T_a}{R_a}, \quad (3.71)$$

la somme de n conductances de Landauer [10]. Cependant, (3.71) est plus générale puisque la limite $T = 0$ définit un cas particulier correspondant à prendre $f'(\varepsilon) = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$ où ε_F est l'énergie de Fermi. Ce résultat est très encourageant puisqu'il nous permet de dériver la formule heuristique de Landauer à partir de la théorie de la réponse linéaire. Ceci étant, nous sommes arrivé à mettre en évidence l'approche de Landauer dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire.

Notons aussi que dans cette limite de canaux non corrélés, le courant I^1 et la conductance correspondante sont donnés par

$$I^1 = 2 \frac{e}{h} \Delta w \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^{\varepsilon} T_a \Rightarrow \mathcal{G}^1 = \frac{I^1}{\Delta w/e} = 2 \frac{e^2}{h} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^{\varepsilon} T_a. \quad (3.72)$$

¹⁴Nous négligeons ici la réflexion par les parois.

3.7.1 Limite d'une structure unidimensionnelle

A ce niveau, une comparaison des résultats obtenus avec ceux dérivés heuristiquement s'impose. En heuristique (chapitre 1), pour une structure unidimensionnelle, la différence de potentiel induite de part et d'autre de l'échantillon mésoscopique et notamment dans les régions asymptotiques est donnée par $\Delta w = R\Delta\mu$ [60, 44], où R est le coefficient de réflexion et $\Delta\mu$ est la différence de potentiel établie entre les réservoirs. Toutefois, celle-ci est impossible à déterminer dans le cadre d'une théorie self-consistante où la théorie de diffusion adoptée incite de travailler dans les régions asymptotiques des terminaux ; impossible d'introduire les potentiels des réservoirs.

Néanmoins, si nous admettons que la relation $\Delta w = R\Delta\mu$ établie heuristiquement demeure vérifiée dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire pour une structure à un seul canal de propagation, le courant $I^1 = TR\Delta\mu$ alors que \mathcal{G}^1 est différente de la formule Landauer-Büttiker (3.62). En revanche, c'est la formule du courant I qui s'écrit dans ce cas comme $I = T\Delta\mu$ qui permet l'obtention de la formule en T .

En analysant de près ces résultats, on déduit que le problème est lié aux définitions de I^1 et I séparément. En effet, la formule du courant I , (3.63), définie en terme des potentiels induits est une formule qui exclut les contacts. Mais comme la relation heuristique $\Delta w = R\Delta\mu$ y tient compte¹⁵, celle-ci, combinée avec (3.63), définit la formule Landauer-Büttiker (T). Par contre elle ne peut être appliquée à la formule du courant I^1 , (3.72), définie en terme des potentiels induits dans les régions asymptotiques des terminaux. Celle-ci tient déjà compte des contacts (apparents dans le terme $s\widehat{\varrho}(s)$)¹⁶. Cette remarque s'étend aussi au cas où les canaux sont corrélés.

De ce fait, nous affirmons notre conclusion déjà établie au chapitre précédent selon laquelle une fois le régime stationnaire établi, le courant total demeure constant indépendamment du point de vue adopté¹⁷. Par conséquent, on définit par I^1 le courant du type Kubo.

¹⁵dans un sens elle introduit les contacts et dans l'autre elle les élimine.

¹⁶Ceci confirme une autre fois que le courant ainsi que la magnétoconductance déterminés par Baranger et Stone [16] sont du type Kubo et non pas du type Landauer [10].

¹⁷L'idée d'un potentiel constant avec un courant qui diffère d'une approche à une autre, a été adoptée récemment [77].

3.7.2 Invariance par renversement de \mathbf{B}

En raison de l'importance des relations d'Onsager dans la description de la réversibilité microscopique (chapitre 1), nous nous proposons d'examiner l'invariance de la formule de la magnétoconductance (3.69) (et/ou (3.70)) par renversement du champ magnétique.

En effet, on sait que renverser le champ magnétique est équivalent à transposer la matrice de diffusion S (3.23) [38, 12] :

$$S(-\mathbf{B}) = S^t(\mathbf{B}), \quad (3.73)$$

tels que ses éléments de matrice vérifient

$$r_{aa}^{L(R)}(\mathbf{B}) = r_{aa}^{L(R)}(-\mathbf{B}) \quad \text{et} \quad t_{ba}^{L(R)}(\mathbf{B}) = t_{ab}^{R(L)}(-\mathbf{B}). \quad (3.74)$$

Pour ce faire revenons sur la définition (3.6). Nous montrons en premier que $\mathcal{G}^{SC}(\varepsilon, \mathbf{B})$ peut se mettre sous la forme

$$\mathcal{G}^{SC}(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{2h} \left\{ (\mathbf{\Pi}^+) \cdot (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) + (\mathbf{\Pi}^-) \cdot ([\tilde{\mathbf{\Gamma}}^+]^{-1} \mathbf{\Pi}^+) \right\}, \quad (3.75)$$

étant donné que

$$(\mathbf{\Pi}^+) \cdot (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) = (\mathbf{\Pi}^-) \cdot ([\tilde{\mathbf{\Gamma}}^+]^{-1} \mathbf{\Pi}^+), \quad (3.76)$$

et que $\mathbf{\Gamma}^\dagger$ à énergie ε s'écrit en représentation matricielle¹⁸, comme :

$$\mathbf{\Gamma}^\dagger = \mathbf{\Gamma}^t = \begin{pmatrix} \left[\delta_{ab} - |(t_{ab}^L)^t|^2 \right]_{n \times n} & \left[-|(r_{ab}^L)^t|^2 \right]_{n \times n} \\ \left[-|(r_{ab}^R)^t|^2 \right]_{n \times n} & \left[\delta_{ba} - |(t_{ab}^R)^t|^2 \right]_{n \times n} \end{pmatrix}. \quad (3.77)$$

D'autre part, la permutation des indices de sommation dans la formule de la conductance

¹⁸ $\mathbf{\Gamma}^\dagger$ correspond à un temps asymptotiquement négatif. Ainsi, pour évaluer sa représentation tétradique, nous avons à suivre les mêmes étapes développées dans la dérivation de $\mathbf{\Gamma}$ mais en remplaçant les états de diffusion sortant par les états de diffusion entrant.

$\mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B})$, nous permet d'écrire

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B}) &= \frac{e^2}{h} \mathbf{\Pi}^+ \cdot \mathbf{1} = \frac{e^2}{h} \mathbf{\Pi}^- \cdot \mathbf{1} \\ &= \frac{e^2}{2h} \{ \mathbf{\Pi}^+ \cdot \mathbf{1} + \mathbf{\Pi}^- \cdot \mathbf{1} \}.\end{aligned}\quad (3.78)$$

C'est à dire que $\mathcal{G}^1(\varepsilon, \mathbf{B})$ est symétrique par renversement du champ magnétique.

Ainsi, la sommation des termes (3.75) et (3.78) permet de réécrire (3.67) comme une somme de deux termes, en tenant compte de la dégénérescence de spin, comme

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) &= 2\frac{e^2}{h} (\mathbf{\Pi}^+) \cdot [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}] = 2\frac{e^2}{h} (\mathbf{\Pi}^-) \cdot [(\tilde{\Gamma}^t)^{-1} \mathbf{1}] \\ &= \frac{e^2}{h} \left\{ (\mathbf{\Pi}^+) \cdot [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}] + (\mathbf{\Pi}^-) \cdot [(\tilde{\Gamma}^t)^{-1} \mathbf{1}] \right\},\end{aligned}\quad (3.79)$$

et sous forme un peu plus explicite comme

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) &= \frac{e^2}{h} \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [(\tilde{\Gamma}^{-1})_{a+|b+}^{\varepsilon} - (\tilde{\Gamma}^{-1})_{a+|b-}^{\varepsilon}] + \right. \\ &\quad [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [(\tilde{\Gamma}^{-1})_{a-|b-}^{\varepsilon} - (\tilde{\Gamma}^{-1})_{a-|b+}^{\varepsilon}] + [\mathbf{t}^L (\mathbf{t}^L)^+]_{aa} [(\tilde{\Gamma}^t)^{-1}_{a+|b+}^{\varepsilon} - (\tilde{\Gamma}^t)^{-1}_{a+|b-}^{\varepsilon}] \\ &\quad \left. + [\mathbf{t}^R (\mathbf{t}^R)^+]_{aa} [(\tilde{\Gamma}^t)^{-1}_{a-|b-}^{\varepsilon} - (\tilde{\Gamma}^t)^{-1}_{a-|b+}^{\varepsilon}] \right\}.\end{aligned}\quad (3.80)$$

Cependant, en s'appuyant sur la définition du superopérateur $\tilde{\Gamma}$, (3.40), et $\tilde{\Gamma}^t$, (3.77), tout en tenant compte de (3.74), on montre qu'en renversant le champ magnétique dans (3.80), le premier terme change en le dernier terme et le second terme change en le troisième terme et vice versa. De là, nous déduisons que la formule générale de la magnétoconductance, (3.70), est invariante par renversement du champ magnétique [38] :

$$\mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = \mathcal{G}^L(-\mathbf{B}), \quad (3.81)$$

et par conséquent que l'approche de Landauer est en bon accord avec le principe de réversibilité microscopique [37]¹⁹. Cette conclusion nous permet aussi de déduire qu'en fait même $\mathcal{G}^{\mathcal{SC}}(\varepsilon, \mathbf{B})$

¹⁹nous montrons aussi dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation que la magnétoconductance

est symétrique par renversement du champ magnétique : $\mathcal{G}^{\mathcal{SC}}(\varepsilon, -\mathbf{B}) = \mathcal{G}^{\mathcal{SC}}(\varepsilon, \mathbf{B})$ (annexe F).

3.7.3 Limite $\mathbf{B} = \mathbf{0}$

A la limite où le champ magnétique est nul, on montre que seule la partie diagonale de l'opérateur densité Landauer ϱ_d^L , (3.10), est pertinente [18]²⁰. Cependant, en suivant la technique d'inversion de la matrice $\mathbf{\Gamma}$ développée ici (voir annexe C et section 3.3.1), on montre que ϱ_d^L est donné par (3.49). C'est ainsi que nous montrons après un calcul laborieux que la conductance de Landauer est donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^L(\varepsilon)|_{\mathbf{B}=\mathbf{0}} = & 2\frac{e^2}{h} \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [(\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1})_{a+|b+}^{\varepsilon} - (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1})_{a+|b-}^{\varepsilon}] + \right. \\ & \left. [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [(\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1})_{a-|b-}^{\varepsilon} - (\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1})_{a-|b+}^{\varepsilon}] \right\}. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Cette formule est identique à (3.70) retrouvée précédemment sauf que maintenant les coefficients de transmission et de réflexion sont indépendants du champ magnétique. Ceci étant, la conductance mesurée à $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ est effectivement une constante, ce qui est en accord avec les prédictions semi-classiques de la théorie de Drude (section 1.4.1, équation (1.37)).

Ainsi, nous obtenons une formule de la conductance qui généralise (3.1) puisque la notre est indépendante des vitesses. Ceci était présagé dès le début puisque la dépendance des états de diffusion dans les régions asymptotiques, l'opérateur de transition et la matrice de collisions \mathbf{S} , sont implicites en le champ magnétique.

Enfin, nous avons pu montrer en adoptant l'approximation du temps de relaxation, que la magnétoconductance dérivée est identique à la formule de la conductance (3.1) dérivée en l'absence d'un champ magnétique [64], (voir annexe F). Ceci nous permet de conclure que pour des états portés à des énergies égales, ϱ^L en présence d'un champ magnétique donne le même résultat que ϱ_d^L en l'absence de ce dernier si le champ magnétique perpendiculaire est de faible intensité.

obtenue est invariante par renversement du champ magnétique (voir annexe F).

²⁰Comme nous l'avons mentionné au préalable, l'opérateur densité diagonal solution de (3.10) a été déterminé dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation (voir annexe F).

3.8 Conclusion

Comme première application du résultat obtenu dans le chapitre 2, nous nous sommes intéressés ici au calcul de la conductance en présence d'un champ magnétique uniforme de faible intensité appliqué perpendiculairement à la structure mésoscopique. Nous avons tout d'abord obtenu une solution exacte à l'équation maîtresse pour l'opérateur densité diagonal ρ_d^{L21} . Ensuite, une formule plausible de la magnétoconductance à plusieurs canaux est dérivée dans le point de vue de Landauer. La plausibilité de notre formule est confirmée non seulement par le fait qu'elle ne souffre d'aucune inconsistance, mais aussi par le test de l'invariance par renversement du champ magnétique. En effet, nous montrons que cette formule vérifie bien les relations d'Onsager. Par conséquent, nous montrons que l'approche de Landauer est en bon accord avec le principe de microréversibilité.

Enfin, notre théorie apporte un éclaircissement à la démarche suivie ainsi qu'aux conditions de dérivation de la formule Landauer-Büttiker [12] qui tient compte de l'effet des contacts. Principalement, nous proposons dans le cadre de cette théorie, une solution quantique à l'énigme de ce qu'on appelle résistance de contact.

²¹sans faire appel à l'approximation du temps de relaxation (annexe F).

Chapitre 4

Régime de Hall quantique

4.1 Introduction

Un des plus spectaculaires phénomènes de la physique de la matière condensée est liée à l'universalité de l'effet Hall quantique. Cet effet fut observé dans une variété de systèmes bi-dimensionnels, notamment les systèmes mésoscopiques (voir chapitre 1), à différentes températures et à différentes intensités du champ magnétique.

L'effet Hall quantique a été tout au long d'une décennie l'un des domaines de recherches les plus actifs de la physique de la matière condensée. Sa théorie a pour objet, l'étude des propriétés des systèmes d'électrons bi-dimensionnels, dans un champ magnétique intense (typiquement > 1 Tesla = 10^4 Gauss) à faibles températures (typiquement $< 1K$), telle que la mixture des niveaux de Landau par le désordre (ici les impuretés) ou par l'interaction électron-électron est traité comme une très faible perturbation. Cette limite est appelée régime Hall quantique (A. H. Macdonald dans [89]).

En effet, on montre que si les collisions dues au potentiel du désordre sont plus pertinentes, le régime Hall quantique est dit *Intégral* mais si le potentiel dû à l'interaction électron-électron plus puissant, le régime Hall quantique est dit *Fractionnaire*. Par ailleurs, un échantillon peut être à la fois dans le régime intégral pour une intensité donnée du champ magnétique et fractionnaire pour une intensité supérieure.

Dans ce chapitre, nous nous limiterons à décrire les grandes lignes de l'évolution expérimentale et analytique (heuristique jusqu'ici) de l'effet Hall quantique intégral au cours des dernières

années. Nous allons formuler une idée assez précise sur le phénomène et sur les effets de quantification sur les propriétés du transport des systèmes quantiques découverts durant les dernières décennies. Les fondements de leur théorie seront résumés en commençant par le concept le plus élémentaire.

4.2 Mesure expérimentale

Lors de l'étude des propriétés électriques de ces systèmes à Grenoble, Klaus von Klitzing, G. Dorda et M. Pepper [19] découvrirent en 1980 l'effet Hall quantique intégral; une découverte récompensée en 1985 par le Prix Nobel. Dans cette expérience, von Klitzing considéra un Si-MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor field-effect transistor) bi-dimensionnel soumis à un champ magnétique de 18 Tesla à une température $T = 1.5K$, Fig. 4-1.

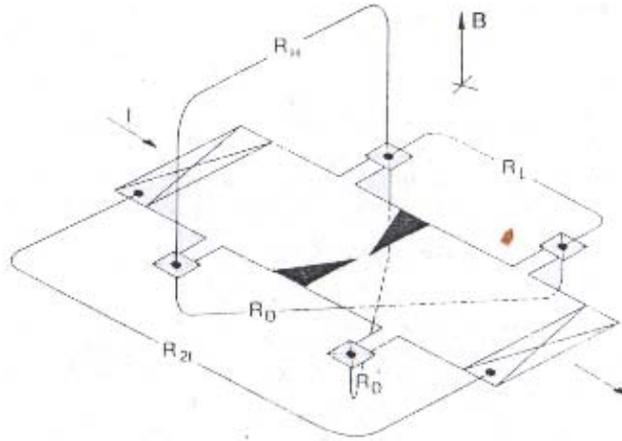


FIG. 4-1 – Barre de Hall avec la barrière potentiel représentée par le gate, en représentation 3-dimensions [23].

Le courant I s'écoule entre les réservoirs source et évier en réponse à l'excitation extérieure appliquée E_x . Les terminaux introduits de part et d'autre, perpendiculairement à la structure, servent de mesure des tensions longitudinale $V_L = \mu_{UL} - \mu_{UR}$ et Hall $V_H = \mu_{UL} - \mu_{LL}$ (où $V_H \perp B$ et $\perp E_x$ mais $V_H // E_y$), et par conséquent des résistances correspondantes $\mathcal{R}^{long} = (\mu_{UL} - \mu_{UR})/I$ et $\mathcal{R}^{Hall} = (\mu_{UL} - \mu_{LL})/I$, respectivement.

Ces mesures [19], Fig. 4-2, ont montré que $\mathcal{G}^{Hall} = (\mathcal{R}^{Hall})^{-1}$ est formée de plateaux à des

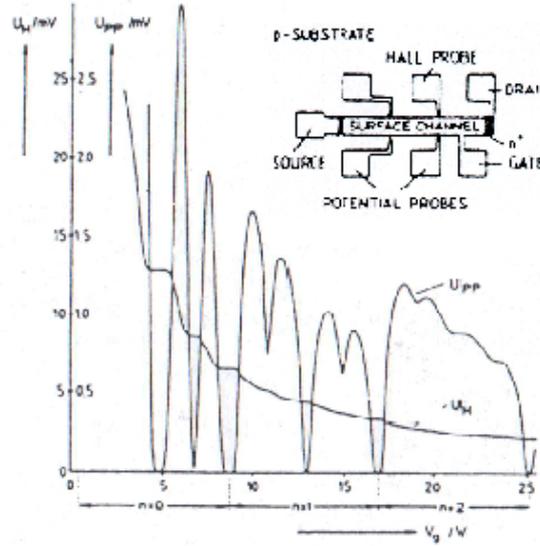


FIG. 4-2 – L’effet Hall quantique original de von Klitzing, Doroda et Pepper (1981) pour un Si-MOSFET en fonction du potentiel du gate (barrière) à $T = 1.5K$ et $B = 18$ Tesla [19].

multiples entiers de e^2/h ($\sigma^{Hall} \sim e^2/h$) séparés par des marches à chaque fois que le potentiel du gate (la barrière) varie¹, et que $\mathcal{G}^{long} = (\mathcal{R}^{long})^{-1}$ est oscillatoire mais positive. En raison de l’apparition des valeurs entières en e^2/h dans la conductance Hall, von Klitzing surnomma ce phénomène l’effet Hall quantique intégral².

Plus impressionnant dans cette mesure, le fait qu’elle soit affectée d’une précision de l’ordre de 10^{-8} . En effet, on montre que \mathcal{R}^{Hall} est indépendante de tous les détails microscopiques tels que le taux d’impuretés, la géométrie du système, et la valeur précise du champ magnétique [90]. Par ailleurs, la largeur des plateaux est liée au type de la structure et à la température à laquelle la mesure est effectuée. Dans les meilleurs échantillons et pour une température très faible, les plateaux sont de plus en plus larges et précis.

Aussi, pour la même variation du potentiel du gate et par conséquent la variation de la con-

¹Lorsqu’une tension gate est appliquée, une barrière entre les terminaux apparaît. Elle réduit la concentration en électrons dans cette région et conduit à la définition d’une nouvelle différence de potentiel.

²La constante e^2/h a été utilisée comme une résistance standard basée sur des constantes fondamentales. Ceci a été souligné par von Klitzing ce qui a permis la redéfinition du Ohm (Ω) en terme de $\mathcal{R}_k = 25812, \dots \Omega$ (SI) = e^2/h (en CGS) en 1990 [?].

centration en électrons à travers la structure, et simultanément avec la formation des plateaux, von Klitzing mesura une magnétorésistance longitudinale extrêmement petite et parfois même au dessous de la limite de détection.

4.3 Effet Hall quantique intégral : Concepts de base

Comme il a été exposé au chapitre 1, si un courant traverse un échantillon bidimensionnel dans sa direction longitudinale x , et qu'il est immergé dans un champ \mathbf{B} appliqué perpendiculairement (suivant z), un potentiel V_H , appelé Hall, est induit à travers la structure dans la direction y pour composer la force dans un champ magnétique, voir Fig. 1-15.

Classiquement, si le champ magnétique est intense ($\omega_c \tau \gtrsim 1$), la théorie de Drude assure à travers les équations (1.49) que :

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma^{long} \propto \frac{1}{\tau} \longrightarrow 0, \quad \text{et} \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{-ne}{B}, \quad (4.1)$$

en l'absence d'imperfections ($\tau \rightarrow \infty$; pas de collisions avec les impuretés)³. C'est à dire que la conductivité Hall classique $\sigma^H(\mathcal{R}^H)$ reliée à la conductivité non diagonale par $\sigma^H = -\sigma_{xy}$ ($\mathcal{R}^H = -\rho_{xy}$), est proportionnelle à la concentration en électrons alors que la conductivité longitudinale est nulle indiquant que le courant à travers la structure totale est non dissipatif⁴. Plus impressionnant est que simultanément avec cette dernière, la résistivité ρ_{xx} s'annule aussi. C'est ainsi que, paradoxalement, les systèmes de Hall quantiques sont connus par le fait d'être de bons conducteurs et de bons isolants en même temps⁵.

Par ailleurs, pour des champs magnétiques intenses et à faibles températures ($k_B T \ll \hbar \omega_c$ [91]), le phénomène de quantification devient très important [26]. Pour des électrons sans interactions (libres), les niveaux d'énergie permis sont les niveaux de Landau discrets qui croissent linéairement avec le champ magnétique (chapitre 1). Le nombre de niveaux de Landau occupés est donné par le facteur de remplissage ν (*filling factor*) défini par le rapport entre le nombre

³On minimise la collision en optimisant τ .

⁴Dans un supraconducteur, les états non dissipatifs supportent des courants persistents [13].

⁵La conductivité σ_{xx} est le rapport entre la densité de courant \mathbf{j} et le champ électrique \mathbf{E} dans la direction du flux, et la résistivité ρ_{xx} est le rapport entre le champ \mathbf{E} et la densité de courant \mathbf{j} . Dans un champ magnétique, \mathbf{E} et \mathbf{j} ne sont pas parallèles.

d'électrons N et le nombre total N_0 de quanta de flux dans un champ magnétique⁶ (i.e. $N_0 = \frac{eB}{h} S = N_B S$) :

$$\nu = \frac{N}{N_0}. \quad (4.2)$$

Sous forme plus appropriée⁷, (4.2) s'écrit

$$\nu = \frac{nh}{eB}. \quad (4.3)$$

avec n est la densité en électrons dans le système, $n = N/S$.

Ainsi, (4.3) combinée avec l'expression de la conductivité Hall dans un champ magnétique intense $\sigma^H = \frac{en}{B}$, il vient que

$$\sigma^H = \nu \frac{e^2}{h}, \quad (4.4)$$

est une combinaison de constantes fondamentales, et tout à fait indépendante des détails microscopiques tels que la valeur précise du champ magnétique.

Si le niveau de Landau est rempli, le facteur de remplissage ν est un entier $\nu = i$ avec ($i = 1, 2, 3, \dots$) tel que $N = iN_0$. En conséquence, (4.4) est alors immédiatement donnée par

$$\sigma^H = i \frac{e^2}{h}, \quad (4.5)$$

et la résistivité correspondante est donnée par $\rho_{xy} = \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \simeq -\sigma_{xy}^{-1} = \frac{h}{ie^2}$. Donc, la conductivité Hall est quantifiée lorsque la densité du flux magnétique est ajustée de sorte à avoir ν entier. En ce sens, en l'absence de collisions ($\tau \rightarrow \infty$) avec $\omega_c \tau \gtrsim 1$, σ^{long} est nulle et $\sigma^H = i \frac{e^2}{h}$ comme il a été observé expérimentalement⁸.

Cependant, bien que l'expérience de von Klitzing [19] (Fig. 4-2) a révélé que la conductivité Hall d'un MOSFET est donnée par (4.4), ce qu'on vient de discuter (définition d'une conductivité Hall quantifiée pour certaines valeurs de B) n'explique pas l'apparition des plateaux dans la résistance Hall dans la Fig. 4-2.

La déviation de ce résultat semi-classique apparaît pour des valeurs intenses du champ

⁶C'est le rapport entre flux magnétique BS et flux quantique h/e .

⁷Cette équation est une indication claire de la signification microscopique de ν . ν représente la mesure sans dimension de la concentration en électrons.

⁸Les effets classiques d'un champ magnétique sont importants seulement si $\omega_c \tau \gtrsim 1$.

magnétique (> 1 Tesla), Fig. 4-3.

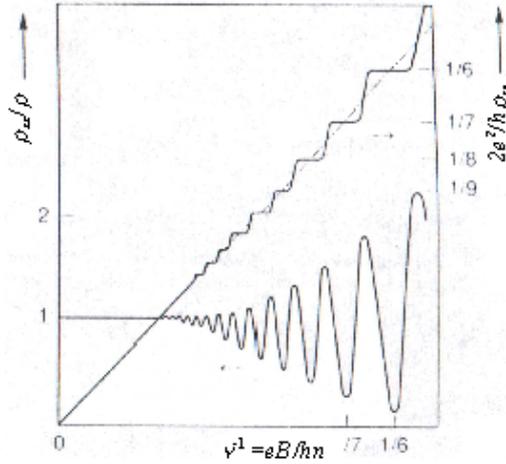


FIG. 4-3 – Variation de la résistivité longitudinale et la résistivité de Hall en fonction de la constante eB/hv . Le graphe montre une déviation du résultat semi-classique de Drude pour un champ magnétique intense en forme d'oscillations pour ρ_{xx} et plateaux pour ρ_{xy} [23].

Cette déviation prend la forme d'oscillations du type *Shubnikov-De Haas* pour la magnétorésistance et la forme de *plateaux* pour la résistance Hall. L'origine de ces deux phénomènes est en fait liée à l'existence du désordre comme on va le voir.

Mais bien avant, il est indispensable de souligner qu'alternativement, l'effet Hall quantique a été observé dans d'autres structures telles que le GaAs/AlGaAs Heterostructure⁹ pour une concentration fixe en électrons (le potentiel du gate constant) en faisant varier le champ magnétique [92], Fig. 4-4.

Cette expérience a permis de conclure que les valeurs de \mathcal{G}^{Hall} ou σ^{Hall} dans les deux expériences (Figs. 4-2 et 4-4), bien équivalentes, sont reproductibles avec grande précision¹⁰ et extrêmement robustes vis-à-vis d'un changement du matériau (pas de différence à une précision d'ordre 4×10^{-10}), la taille de l'échantillon (géométrie de la structure [19, 93]), ou l'introduction d'une petite concentration d'impuretés. Ces deux expériences sont bien résumées dans Fig. 4-5, représentant la variation de la densité

⁹Fabriqué par la méthode Molecular Beam epitaxy (MBE) ainsi que par la méthode Metal organic chemical vapor deposition (MOCVD).

¹⁰Cette mesure a un grand impact en Métrologie où R^H est utilisée depuis longtemps comme une résistance standard [91, 94].

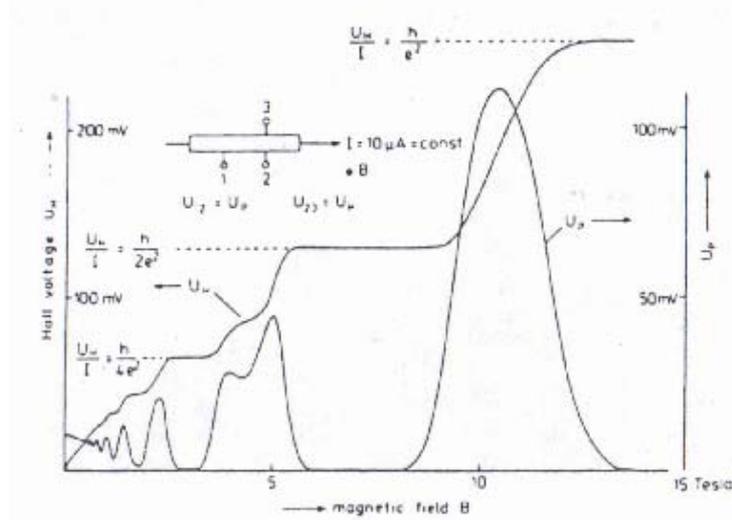


FIG. 4-4 – QHE mesuré par von Klitzing (1982), pour un GaAs/GaAlAs dans un champ magnétique variable à la température $T = 1.6 K$ [13].

d'états $D(\varepsilon)$ et les conductivités σ_{xx} et σ_{xy} en fonction du facteur de remplissage ν . Ainsi, on a conclu que la formation des plateaux et l'absence de dissipation constitue les empreintes digitales du régime Hall quantique intégral [1].

Pour mieux comprendre l'origine de ces deux phénomènes (la formation des plateaux et l'absence de dissipation), discutons l'effet du désordre [94] et l'effet de la température [95] sur l'observation de l'effet Hall quantique intégral.

4.4 Effet des impuretés (désordre)

Pour avoir l'effet Hall quantique, il est essentiel de briser l'invariance par translation. En pratique ceci est évident vu que les échantillons utilisés sont loin d'être parfaits à l'échelle microscopique. Chaque défaut ou impureté agit comme un centre diffuseur pour les électrons. A faible température à laquelle l'effet Hall quantique intégral a été observé, les collisions par les impuretés dominent.

On sait que la dégénérescence des niveaux de Landau est immédiatement levée en présence de perturbation. Le potentiel de confinement discuté au chapitre 1, constitue un exemple parti-

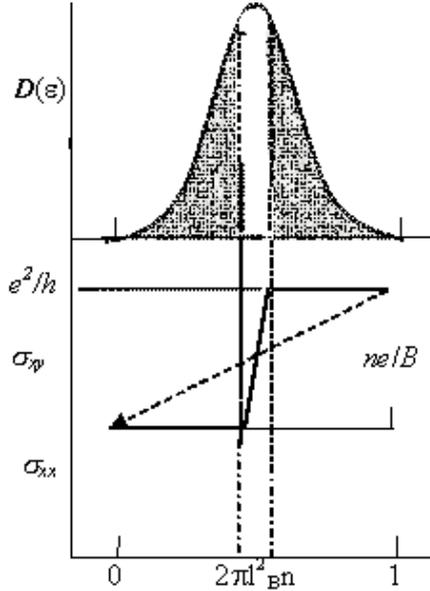


FIG. 4-5 – La conductivité diagonale σ_{xx} , la conductivité de Hall σ_{xy} et la densité d'états $\mathcal{D}(\varepsilon)$ en fonction du filling factor. La ligne pointillée diagonale correspond à la valeur ne/B .

culier. Par ailleurs, la présence des impuretés lève totalement la dégénérescence sur ces niveaux. En conséquence, ceux-là s'étalent en l'énergie (éventration des pics) formant ainsi des bandes (voir schéma de la densité d'états dans la Fig. 4-5). En outre, les collisions par les impuretés sont d'une importance suprême car ils changent *qualitativement* la nature des états quantiques, d'où la *localisation*.

4.4.1 Largeur des bandes de Landau

De prime abord, en présence de désordre, les niveaux de Landau deviennent de plus en plus larges. Pour une faible concentration des impuretés cette largeur notée est très faible devant l'espacement entre niveaux de Landau $\Upsilon \ll \hbar\omega_c$. L'expérience a prédit que la largeur de la bande de Landau croît avec la racine carrée de l'intensité du champ magnétique à chaque fois que B croît¹¹ [30] mettant ainsi en évidence les oscillations *Shubnikov-De Haas* [31]. Approximativement, Υ est donnée par $\frac{p}{\sqrt{\mu}}\sqrt{B}$ où μ est la mobilité et $p \sim 2.3 \pm 0.3 mV/\text{Tesla}$ [1, 96].

¹¹De même la limite d'un désordre faible peut être atteinte en amplifiant B .

Mais récemment, on a montré que $\Upsilon = \hbar \sqrt{\frac{2\omega_c}{\pi\tau}}$ [97].

4.4.2 Localisation et percolation

Bien avant d'aborder ce problème définissons :



FIG. 4-6 – Formation des états de bords et des états massifs.

- *Les Etats massifs* : Quantiquement ce sont les états de Landau et classiquement ce sont les orbites cyclotrons. Les états massifs sont localisés dans des régions finies plus petites que la largeur de la structure W (Fig. 4-6).
- *Les Etats de bords* : dans la même direction du confinement, ces états sont localisés proches des bords de la structure, i.e. proches de $y = \pm W/2$. Mais dans le direction de propagation, ils forment des ondes planes. Ces états ainsi que les énergies correspondantes sont supposés ne pas être affectés par le désordre [104] (Fig. 4-6). Ces approximations sont justifiées pour des énergies entre bandes de Landau, le désordre effectif suffisamment faible et le champ magnétique suffisamment élevé, $V(\mathbf{r}) \ll \hbar\omega_c$.

Partant de ces définitions, on a montré que dans un champ magnétique intense, l'existence du désordre, permet la création de deux états électroniques différents : les *états localisés* et les *états étendus*. Il s'avère que le désordre localise seulement les états massifs, en laissant les états de bords essentiellement inchangés [30].

En effet, l'universalité du transport dans le régime de Hall quantique intégral est paradoxalement liée au désordre (impuretés). La localisation faible d'Anderson en présence de désordre est fondamentalement à l'origine de la quantification [90]. Néanmoins, la localisation est fortement affectée dans un champ magnétique intense.

Rappelons, pour ceci, d'abord qu'en 1958 Anderson [54] était le premier à montrer que dans un réseau non périodique (faible désordre), la fonction d'onde de l'électron peut être

localisée dans l'espace. La théorie de localisation s'applique uniquement pour des électrons non interagissant en présence de désordre¹².

En effet, classiquement en présence de désordre (puits de potentiels), si une particule est incidente avec une énergie supérieure à l'énergie ε_s de la marche de potentiel rencontrée, son mouvement est alors illimité. Cependant, si ε est inférieure à l'énergie de cette marche, la particule rebrousse chemin. Mais, si cette particule se trouvait entre deux marches elle y restera indéfiniment et l'on dit que la particule est confinée.

Quantiquement, la situation est tout autre à cause des *interférences* et *l'effet tunnel*. Le premier permet à la particule d'énergie supérieure à l'énergie de la marche $\varepsilon > \varepsilon_s$ de subir des interférences destructives de sorte que son mouvement devient localisé, alors que le second permet à la particule d'énergie $\varepsilon < \varepsilon_s$ de franchir une marche de potentiel pour que son mouvement devienne délocalisé. Les *interférences* sont cruciallement liées à l'invariance par renversement du temps, quant au *tunneling* il se produit entre niveaux ayant des énergies très proches (ils sont alors très éloignés dans l'espace d'où leur enveloppe est exponentiellement faible)¹³.

Comme fonction de l'énergie les états changent de nature en passant de localisés à étendus et vice versa. L'énergie à la quelle la transition s'effectue définit *le mobility edge* ε_c ; ε_c marque la transition continue entre conducteurs et isolants. Entre autre, selon Anderson, les fonctions d'ondes (en échelle de longueur) en présence de désordre se présentent comme

$$\int |\Psi(\mathbf{r})| d\mathbf{r} \sim \exp\left(-\frac{L}{\xi}\right), \quad (4.6)$$

où \mathbf{r} est le vecteur position et ξ est l'échelle de longueur de la localisation. ξ définit la distance moyenne parcourue par la particule avant d'être piégée dans un puits de potentiel. En effet, en présence de puits de potentiel profonds, les orbitales ayant des énergies très proches sont très lointaines dans l'espace et leurs fonctions d'ondes ne peuvent s'envelopper considérablement. L'état est alors étendu et la longueur de localisation diverge au centre du puits. Cependant, en

¹²Les interactions conduisent à la destruction de la cohérence de phase (phénomène quantique) dans l'espace d'Hilbert à un électron dans lequel la localisation des états électroniques est définie [30].

¹³Si le désordre est suffisamment faible, la théorie cinétique constitue une bonne approximation pour dériver surtout les coefficients de transport, et les fonctions d'ondes demeurent dans ce cas étendues à longue portée. Par contre si le désordre est très fort, les fonctions d'ondes sont exponentiellement localisées.

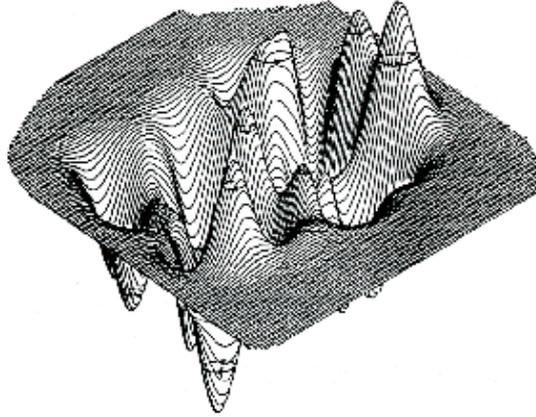


FIG. 4-7 – Orbites d'égal potentiel proches du sommet et du bas du potentiel aléatoire. Les flèches indiquent la direction du mouvement [32]. Les montagnes et les vallées sont les états localisés. La ligne de cote entre ceux-là représente les états étendus.

s'éloignant des centres, la distance parcourue par l'électron est très faible $\xi \rightarrow 0$ et la fonction d'onde localisée tend à s'annuler. L'état est alors dit localisé. Donc au centre du puits, l'état est étendu et à chaque fois que la particule s'éloigne du centre, elle devient localisée.

La localisation d'Anderson dans un régime de Hall quantique a été le sujet de recherches très actives. Tsukada [98], Ando-Aoki [99] et d'autres, ont montré qu'en présence d'un champ magnétique intense (la mixture des niveaux de Landau est négligeable), les états sont en majorité exponentiellement localisés, Fig. 4-7. En utilisant la technique diagrammatique, Ono [100] a été le premier à suggérer que seuls les états au centre de la bande de Landau sont étendus, quant aux états restant ils sont exponentiellement localisés. Ainsi, on a conclu que les états étendus n'apparaissent qu'en présence d'un champ magnétique intense.

Par ailleurs, le comportement de la longueur ξ de localisation a suscité l'intérêt de nombreux théoriciens. Ultérieurement une étude numérique pour déterminer cette longueur, proposée par Ando [101] en utilisant le nombre de Thouless (voir section suivante) [96], avait aussi confirmé ces prédictions.

Pour un système fini, la théorie de percolation assure que tous les états sont localisés avec une longueur localisation qui diverge au centre de la bande de Landau élargie par le désordre. La largeur des régions étendues est donnée par $\Delta\varepsilon = (\ell_c/L)^{1/\kappa}\Upsilon$ où Υ est la largeur de la bande de

Landau. Quant aux états localisés, on montre que l'inverse de leur longueur localisation $\alpha(\varepsilon)$ à énergie ε , se détermine à partir de la relation $g(L) = g(0) \exp(-\alpha(\varepsilon)L)$ où g est la conductance sans dimension. De là, la longueur localisation est partout finie mais présente des singularités au centre des bandes de Landau, Fig. 4-8.

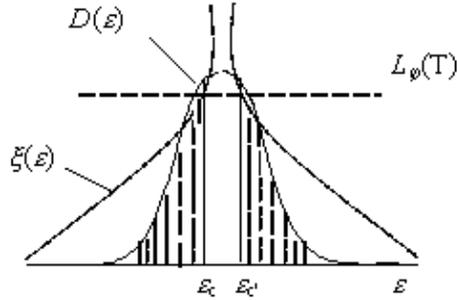


FIG. 4-8 – Densité d'états et longueur localisation d'une bande Landau désordonnée. Un état électronique est étendue dans l'intervalle $\varepsilon'_c - \varepsilon_c = \Delta\varepsilon$ avec $\xi(\varepsilon)$ est plus large que la longueur de la brisure de la phase.

D'autre part, plusieurs études numériques ont montré que les états de bords demeurent étendus même en présence de désordre et qu'ils ne se mélangent (mélangent) pas avec les états massifs exponentiellement localisés dans le système. En revanche, en se rapprochant du centre de la bande de Landau où la longueur localisation des états massifs diverge, les états de bords et les états massifs interfèrent [102] (voir Fig. 4-9).

Cette dernière remarque peut être facilement comprise. Afin de localiser les états de bords quasi-uni-dimensionnels, le processus de retour devient nécessaire [103, 30]. Mais comme les états de bords sont spatialement séparés, on montre que les collisions de retour sont approximativement supprimées par un facteur en $\exp[-(W/\ell_c)^2]$, vu que la portée des états de bords dans la direction du confinement est de l'ordre de la longueur magnétique ℓ_B (voir discussion d'après). Conséquemment, les états de bords sont essentiellement non influencés par les collisions avec les impuretés, à l'exception des régions où le processus de retour est assuré par effet tunnel via les états localisés proches des centres des bandes de Landau (Fig. 4-9). Ceci est un fait tout à fait intéressant que seule la théorie d'échelle a tenté d'expliquer (voir plus loin).

Cependant le modèle de localisation se brise à température finie. L'interaction des électrons

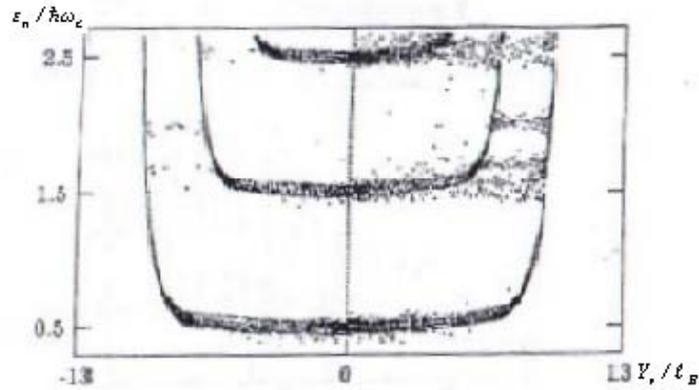


FIG. 4-9 – L’influence du désordre sur le spectre d’énergie d’un système bi-dimensionnel confiné ($W = 26l_c$) et dans un champ magnétique intense. Les coordonnées Y_ν dénotent l’emplacement des états. Pour une forte corrélation, seuls les états massifs avec $|Y_\nu| \ll W/2$ sont sensiblement influencés [30].

avec d’autres degrés de liberté tels que les vibrations du réseau conduit quantiquement à la destruction de la cohérence de la phase dans l’espace d’Hilbert à un électron dans lequel la localisation des électrons est définie.

4.4.3 Description qualitative de l’EHQI en terme de la densité d’états

En accord avec la discussion précédente, la variation de la conductivité longitudinale dans l’effet Hall quantique indique une localisation dans les régions correspondants aux plateaux de la conductivité Hall et une délocalisation¹⁴ ; dans le régime transitoire entre plateaux subséquents, située autour du centre de la bande de Landau (voir Fig. 4-5).

A température nulle, les états localisés (états massifs) ne transportent pas le courant à l’encontre des états étendus qui sont proches du niveau de Landau non perturbé $n\hbar\omega_c$. Bien que les impuretés réduisent le nombre d’états transportant le courant, ce dernier demeure le même pourvu que tous les états étendus soient occupés. Cette interprétation est due à Prange [94] qui conclut que le courant Hall quantifié est exactement le même que celui d’un système d’électrons libres. La raison est simple. Le courant Hall fourni lors de la formation d’un état

¹⁴Cette délocalisation est attribuée au champ magnétique intense.

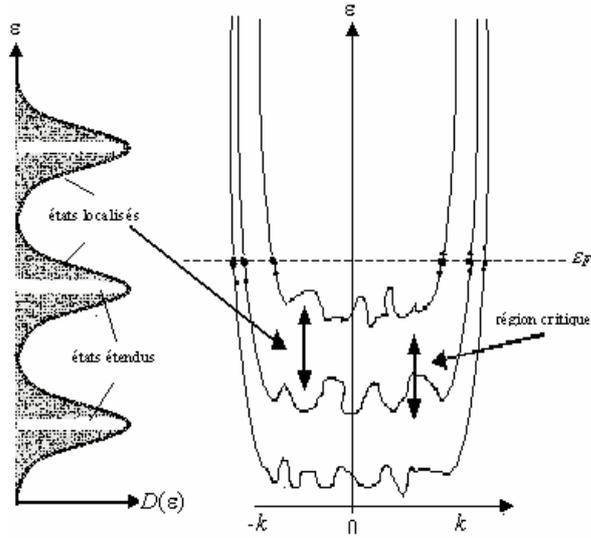


FIG. 4-10 – Densité d'états et spectre d'énergie dans un champ magnétique $B\hat{z}$ intense.

localisé, est exactement compensé par une augmentation appropriée du courant Hall déjà porté par les états étendus restants (les électrons passant par une impureté seront accélérés pour faire croître le courant afin de compenser le déficit créé par les états localisés). Cette explication fournit une description qualitative correcte de la densité d'états [1], voir Fig. 4-10.

En effet, en augmentant la densité d'électrons, les différents états électroniques seront graduellement remplis. C'est entre autre équivalent à déplacer l'énergie de Fermi à travers la densité d'états, Fig. 4-10.

Compte tenu du graphe de la variation de la densité d'états en fonction de l'énergie ε dans un champ intense, si l'énergie de Fermi est entre deux niveaux de Landau n et $n + 1$ (si les électrons occupent des états au delà du n ème niveau, alors $\nu = n$), la conductivité longitudinale est nulle et celle de Hall est constante [96] (Fig. 4-5). Mais, si le niveau de Fermi coïncide avec le niveau de Landau (en plus ou moins petites proportions ; région d'états étendus), on obtient une marche pour σ^{Hall} et un pic pour σ_{xx} . Autrement, si ε_F parcourt la région du gap (la région d'états localisés), en variant n ou B , l'occupation des états étendus ne change pas puisqu'ils sont les seuls à transporter le courant, de même que la résistance Hall, causant

la formation des plateaux Hall¹⁵ [104]. Simultanément, avec la formation des plateaux Hall, la résistance longitudinale s'annule puisque seuls les états localisés sont au voisinage de ε_F . Aussitôt que ε_F se rapproche du niveau de Landau suivant, la dissipation apparaît (formation de pics) à l'intérieur du système et la résistance Hall effectue la transition au prochain plateau. Par ailleurs, si le niveau de Landau est rempli, l'énergie de Fermi varie à l'intérieur d'un gap entre niveaux occupés.

C'est ainsi que l'effet Hall quantique intégral est considéré comme une succession de transitions *localisation-délocalisation* lorsque l'énergie de Fermi se déplace à travers la densité d'états comme il est montré sur la Fig. 4-10.

4.5 Effet de la température

Peu après la découverte de von Klitzing [19], il s'est avéré que les plateaux quantifiés peuvent être extrêmement larges et la transition entre eux extrêmement pointue si la température diminue [95]. Parallèlement, la conductivité longitudinale montre une série de pics pointus à l'endroit où s'effectue la transition entre plateaux [1, 30, 94]. La dépendance de la température des deux conductivités, surtout dans la région où s'effectue la transition, est présentée par la Fig. 4-11. Cette dépendance se manifeste même en l'absence de localisation (désordre). La dépendance de la distribution Fermi-Dirac de la température conduit à la dépendance des conductivités de cette dernière :

$$\sigma_{\mu\nu}(T) = \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \sigma_{\mu\nu}(T=0). \quad (4.7)$$

En effet, si $\sigma_{xx}(T=0)$ est finie seulement dans un intervalle de largeur Δ près du centre de chaque bande de Landau, (4.7) prédit la croissance de σ_{xx} au centre de la bande (correspondante au pic) en diminuant la température pourvu que $k_B T \succeq \Delta$.

Les théories courantes concernées par le minimum de ρ_{xx} , ont envisagé qu'à des températures élevées, la dissipation est thermiquement activée à travers le mobilité gap. Elle varie exponentiellement comme $\exp(-\varepsilon_g/2k_B T)$ où ε_g est l'énergie du gap. Cependant, à faible température,

¹⁵Même les processus inélastiques, comme l'absorption du phonon, ils n'affectent pas l'occupation des états étendus dans ce cas.

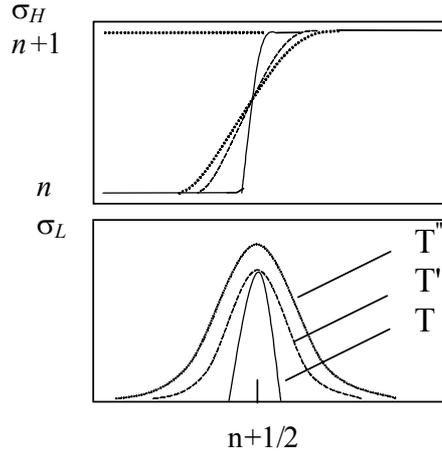


FIG. 4-11 – Comportement qualitatif de la magnetoconductivité longitudinale σ_{xx} et Hall σ_{xy} en fonction de $\varepsilon/\hbar\omega_c$ pour différentes températures T . Lorsque T croît, $T \prec T' \prec T''$, la largeur des pics de σ_{xx} croît. Le pas (step) dans σ_{xy} décroît.

i.e. lorsque la dissipation est inactivée, on montre que cette résistivité varie exponentiellement comme $[\exp(-T_0/T)]^\gamma$, avec $\gamma = 1/3$ si $B = 0$ et $\gamma = 1/2$ si B est intense [94]¹⁶.

Dans un Si-MOSFET, le minimum de ρ_{xx} stipule une dissipation entre $2 - 4K$ quand le plateau Hall commence à se former. En revanche, l'activation thermique disparaît au dessous de $2K$.

Pour un GaAs hétérostructure, la dissipation est activée à $T \in [10mK, 4K]$. Mais à faible températures ρ_{xx} est aussitôt petite (dans la région du gap) qu'il est difficile voir impossible de la mesurer (on montre que ρ_{xx} est $< 10^{-10}\Omega$ pour $T = 0.4K$). Pour ce type de structures, au dessous de $T = 0.1K$, les pics dans ρ_{xx} sont extrêmement étroits et s'annulent au delà de $B = 6$ Tesla, quant aux plateaux ils sont de plus en plus larges mais la transition entre eux est de plus en plus raide.

Des mesures typiques pour les structures citées à $T = 0.3K$ sont illustrées à la Fig. 4-12 [1], et peuvent être directement comparées avec les expériences citées antérieurement (voir Figs.

¹⁶La contribution non nulle à température faible de σ_{xx} , peut être due à des excitations actives de l'électron aux états étendus appartenant à des niveaux de Landau élevés ou due au processus de hopping entre états localisés, effectué à l'énergie de Fermi [100, 96, 94].

4-4 et 4-2).

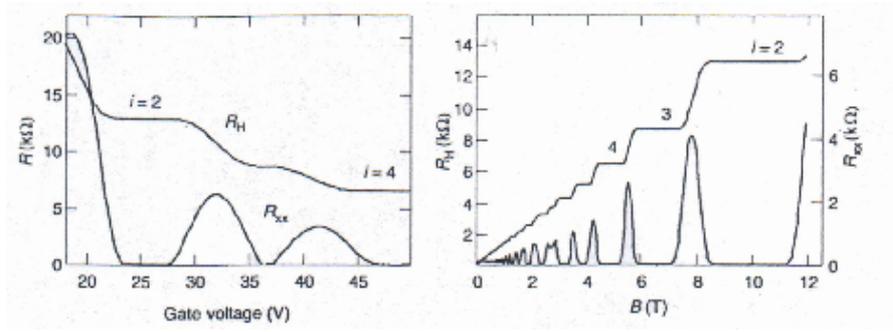


FIG. 4-12 – Mesure expérimentale des résistances longitudinale et Hall à $T = 0.3K$ (a) Si-MOSFET à $B = 13.8$ Tesla ; (b) GaAs/AlGaAs Hetrostructure [1].

Ainsi on conclut que la largeur des plateaux varie effectivement avec la température et aussi avec le type de l'échantillon. Dans des échantillons idéals et à de très faibles températures, les plateaux sont larges et précis. A température nulle l'effet Hall intégrale est représenté sur Fig. 4-13 :

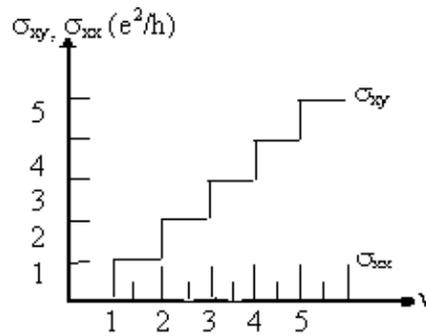


FIG. 4-13 – Effet Hall quantique en fonction du facteur de remplissage ν à température nulle.

4.5.1 Echelles de longueur en présence de localisation

Il convient maintenant de discuter les échelles de longueurs pertinentes en présence d'un champ magnétique intense \mathbf{B} , sachant que le potentiel dû au désordre, varie faiblement devant l'espacement entre niveaux de Landau, $V(\mathbf{r}) \ll \hbar\omega_c$.

On sait davantage que les impuretés sont définies par la longueur ℓ et le temps de relaxation τ , et le champ magnétique intense par la limite $\omega_c\tau \gtrsim 1$, mettant en évidence le mouvement cyclotron, où l'électron effectue plusieurs cycles avant de rencontrer une impureté.

Comme le rayon cyclotron d'un électron à l'énergie de Fermi est donné par $\ell_c = v_F/\omega_c$ ¹⁷, $\omega_c\tau \gtrsim 1$ se traduit relativement à cette longueur comme $\ell_c \leq \ell$. Cependant, sachant que ℓ_B définit la longueur magnétique et par conséquent que $\ell_c \approx \sqrt{n}\ell_B \gg \ell_B$, en présence de désordre, ℓ_B et ℓ_c vérifient $\ell_B \leq \ell_c \leq \ell$, i.e. $\ell_B \ll \ell$.

D'autre part, un système dit mésoscopique est en régime diffusif si $\ell < W, L$ (chapitre 1). Cette condition combinée avec la première permet de déduire que dans B intense, le système mésoscopique est défini par : $\ell_B \leq \ell_c \leq \ell < W$ et/ou $\ell_B \leq \ell_c \leq \ell < L$ ¹⁸.

Étant donné qu'en présence d'un champ magnétique intense, ℓ_B et $\hbar\omega_c$ sont les échelles de longueur et de l'énergie caractéristique, afin de distinguer entre les régimes localisés et étendus, faisant usage de la longueur localisation définie antérieurement. On montre que

- les états localisés avec ξ fini ($\xi \ll W$ et/ou $\xi \ll L$), sont définis par

$$\xi \leq \ell_c \leq \ell < W.$$

- les états étendus avec ξ divergeant ($\xi \gg W$ et/ou $\xi \gg L$) sont définis par

$$\ell_c \leq \ell < W < \xi.$$

Par suite, en faisant abstraction de ℓ , les états de bords (étendus) sont connus par $2\ell_c \leq W < \xi$, et les états massifs (localisés) par $\xi < 2\ell_c$.

4.6 Théorie d'échelle

Ayant mis le point sur l'effet du désordre et la température, dans l'établissement de l'effet Hall quantique intégral, le besoin à une théorie d'échelle pour expliquer notamment la transition entre plateaux Hall, s'impose.

Les idées d'une théorie d'échelle pour la localisation d'Anderson proviennent du travail de Thouless 1979 [66]. Puisqu'il s'agit là d'une transition de phase, par analogie avec la théorie

¹⁷ $v_F = \hbar k_F$ et $\ell = v_F\tau$.

¹⁸Dans un champ B faible où $\ell_B \ll \ell < \ell_c$, le régime mésoscopique diffusif est défini par $\ell_B \ll \ell < W \leq \ell_c$.

de la renormalisation élaborée par les phénomènes critiques, Thouless déduit que la conductance mesurée dans un champ magnétique nul, dépend de l'échelle de longueur de l'échantillon considéré. C'est ainsi qu'une remarquable théorie d'échelle fut construite par Abrahams, Anderson, Licciardello et Ramkrishnan en 1979 [40]. Cette théorie a pu expliquer le phénomène de la localisation faible en l'absence de B . Le point essentiel dans cette théorie est l'hypothèse qui considère que la conductance à l'échelle de longueur λL est fonction de celle à l'échelle L . Ainsi, par différentiation par rapport à λ , on obtient l'équation différentielle du groupe de renormalisation définissant la fonction d'échelle β_d dépendante d'une seule variable $g(L)$ qui définit le nombre de Thouless. Ainsi, si les états sont localisés, $g(L)$ décroît avec la croissance de la taille L du système. Mais si les états sont étendus, $g(L)$ est proportionnel à la conductivité diagonale. De considérables travaux théoriques, numériques et expérimentaux ont connu le jour afin de vérifier la fiabilité de la théorie d'échelle à un paramètre et pour faire étendre la localisation faible.

Cependant, il s'est avéré par la suite qu'il existe une divergence entre la découverte de von Klitzing et la théorie de localisation. La quantification de \mathcal{G}^{Hall} était interprétée comme étant le résultat de la localisation d'Anderson. D'autre part, c'est les états délocalisés qui assurent le transport du courant Hall, alors que l'idée d'une théorie d'échelle à un seul paramètre semble prédire l'existence de fonctions d'ondes localisés dans un système bi-dimensionnel.

Plus simplement, le problème réside dans le fait que la théorie d'échelle pour les coefficients de transport ne fait pas référence à la conductance Hall [94]. La théorie d'échelle à un seul paramètre prédit des corrections à σ_{xx} liés à la géométrie et non pas à σ_{xy} . Heureusement, il existe d'autres théories de renormalisation où l'on peut construire une fonction d'échelle dépendante de plusieurs paramètres [96, 105]. Mais, les prédictions de la théorie d'échelle à deux paramètres, testées expérimentalement [96], n'ont pas reçu, jusque là, une grande importance théorique.

4.7 Transport dans le modèle des états de bords : Approche probabiliste

Tous les modèles théoriques proposés pour l'explication de l'effet Hall quantique, incluant la théorie de localisation présentée antérieurement et l'argument topologique présenté par Laughlin [106], considèrent des systèmes idéaux avec des conditions de bords spécifiques. Bien que ces modèles fournissent un aperçu clair et détaillé, la mesure de la résistance, réalisée sur des échantillons réels, semble dépendre de la structure dans laquelle l'échantillon est inséré et de la nature des contacts avec ce dernier [1].

Aux bords de l'échantillon réel, le confinement provoque la courbure des niveaux de Landau. A chaque fois qu'un niveau de Landau intercepte l'énergie de Fermi, un état de bord se forme. Classiquement, dans un champ B , ceci correspond à des trajectoires d'électrons qui se déplacent au long des bords de la structure (Fig. 4-6). Autrement, à l'énergie de Fermi, les états étendus sont proches des bords de l'échantillon.

Peu après la découverte de l'effet Hall quantique, Halperin [104] réalisa l'importance des états de bords dans la description des propriétés de transport¹⁹. Plusieurs théories partant de cette idée et basées sur différentes approches ont été développées [107]. Même l'expérience a réussi à mettre en évidence l'idée de l'écoulement du courant Hall près des bords de la structure [108].

Intrigué par l'apparition de l'unité de mesure de la conductance e^2/h , plusieurs auteurs [107] aient opté dans leur description de l'effet Hall quantique intégral pour le formalisme de Landauer (décrivant le transport comme une probabilité de diffusion par le désordre). La résistance Hall quantifiée est alors identique à la résistance d'un conducteur balistique dans lequel les états de bords remplacent les canaux de propagation²⁰.

C'est ainsi que l'approche par les états de bords a attesté de sa fiabilité dans la compréhension des phénomènes de transport en présence d'un champ magnétique intense. Conséquemment, nous avons jugé utile d'exposer ici, mais brièvement, les démarches suivies par Büttiker [86],

¹⁹les états localisés ne jouent aucun rôle dans le transport.

²⁰Dans un champ magnétique intense, les modes de propagation consistent en des états interagissant avec les bords de la structure seulement. Les états de bords avec le même mode (niveau de Landau) sont appelés canaux de bords. Les canaux de bords parallèles se propagent dans des directions opposées [23].

Streda *et al* [109] ainsi que Jain-Kivelson [111, 110] afin de décrire l'effet Hall quantique à partir de la technique de comptage (approche probabiliste)²¹. Ces travaux ont été effectués à température nulle.

4.7.1 Approche de Büttiker

Pour retrouver analytiquement l'effet Hall quantique, nous exposerons ici l'idée suscitée par Büttiker [86] dans la description du phénomène de transport dans les systèmes mésoscopiques dans un champ magnétique intense.

Suppression du retour : description qualitative

Considérons une impureté proche du bord supérieur de la structure étudiée. Dans un champ magnétique intense, le courant porté par les états de bords est représenté par des orbites ouvertes quasi-classiques, voir Fig. 4-14.

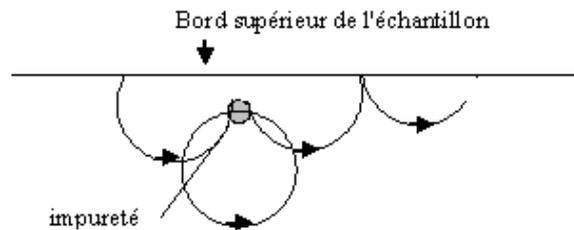


FIG. 4-14 – Orbite quasi classique ouverte se propageant au long du bord supérieur de l'échantillon. Dans un champ magnétique intense, le processus de retour après collision par l'impureté, sur des distances assez large en comparaison avec le rayon cyclotron, est supprimé.

Selon Büttiker, comme le champ magnétique est intense, l'orbite ne peut pas s'éloigner plus qu'un rayon cyclotron du bord de la structure. Après collision par l'impureté (possible à plusieurs reprises), l'orbite retourne à son état initial et continue sa propagation (écoulement) près du bord. Si la largeur de la structure W est supérieure au rayon cyclotron, l'électron entrant dans cette structure arrivant sur un bord, quittera la structure en poursuivant son chemin initial.

²¹Nous différons les calculs quantiques proposés jusque ici au chapitre suivant.

L'idée est que, dans ce cas, l'impureté ne renverse pas la direction du mouvement des électrons. Le champ magnétique intense oblige les porteurs de charge de parcourir une orbite de rayon ℓ_c et revenir au point de départ, avec néanmoins une différence de phase. Ainsi, le retour est supprimé sur des distances plus larges que le rayon cyclotron. Même en présence d'un nombre important d'impuretés, le processus de retour reste supprimé si $\ell \gg \ell_c$.

C'était ça l'idée de départ de Büttiker²². Pour lui, la suppression du retour définit un courant non dissipatif donnant raison à l'effet Hall quantique intégral. Par ailleurs, les collisions entre états de bords sont seulement permises dans des régions séparés de la structure.

Bare de Hall à quatre contacts

En l'absence de retour, la bare de Hall considérée par Büttiker est représentée par la Fig. 4-15. Le transport est cohérent tout au long de la bare. Les collisions inélastiques se produisent

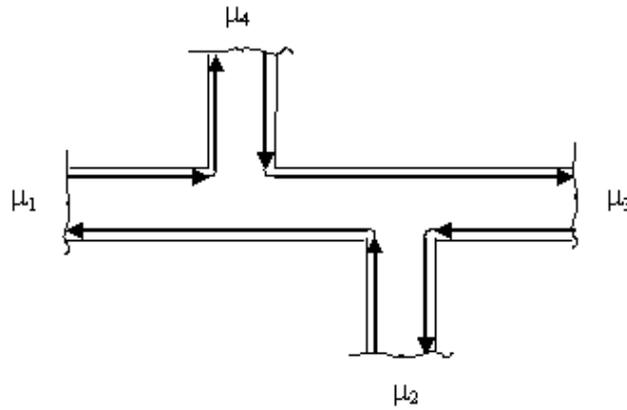


FIG. 4-15 – Structure de Büttiker à quatre contacts parfaits.

à l'intérieur des réservoirs portés aux potentiels chimiques μ_i avec $i = 1, \dots, 4$. Le courant dans chaque terminal s'écrit en terme des potentiels chimiques μ_i comme [12] :

$$I_i = \frac{e}{h} \left\{ (N_i - R_i)\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j \right\} \quad \text{avec } i, j = 1, \dots, 4, \quad (4.8)$$

²²Ce raisonnement conduit Büttiker à déduire que pour B intense, la structure de Hall est une structure balistique [86].

qui demeure valable même en présence d'un champ magnétique. Les coefficients T_{ij} et R_{ij} définissent la matrice de diffusion propre à la structure. T_{ij} et R_{ij} vérifient les relations de symétries par renversement du sens du champ magnétique : $T_{ij}(\mathbf{B}) = T_{ij}(-\mathbf{B})$ et $R_{ii}(\mathbf{B}) = R_{ii}(-\mathbf{B})$.

Comme conséquence de la conservation du courant dans le régime stationnaire, la somme des éléments de chacune des lignes et colonnes de cette matrice est nulle.

Un calcul assez laborieux permet à Büttiker [12] de montrer que la résistance due à l'écoulement du courant entre les contacts m et n avec une mesure de tension effectuée entre les contacts k et l , est donnée par

$$\mathcal{R}_{mn,kl} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{D} (T_{km} T_{ln} - T_{kn} T_{lm}), \quad (4.9)$$

où D est un sous déterminant de rang 3 de la matrice propre à la structure, invariant par renversement du champ magnétique [11]. Les relations de symétrie des coefficients de transmission et réflexion, permettent de montrer que $\mathcal{R}_{mn,kl}$ vérifie la relation de réciprocité²³ : $\mathcal{R}_{mn,kl}(\mathbf{B}) = \mathcal{R}_{kl,mn}(-\mathbf{B})$.

Donc, en admettant que les contacts sont non réflexifs [112] et tout en adoptant l'idée de la suppression du processus de retour dans la bare de Hall (Fig.4-15), tous les coefficients de transmission entre différents contacts sont nuls exceptés $T_{41} = T_{34} = T_{23} = T_{12} = N$.

Büttiker considéra le cas où le flux de courant est émis entre les contacts 1 et 3 tels que les contacts 2 et 4 assurent la mesure de la tension. Après quelques manipulations algébriques, Büttiker montra que $\mathcal{R}_{13,42}$, qui n'est autre que la résistance Hall, est donnée par

$$\mathcal{R}^{Hall} = \mathcal{R}_{13,42} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{N}. \quad (4.10)$$

Par ailleurs, si le courant s'écoule entre les contacts 1 et 4 tels que les contacts 2 et 3 mesurant la tension sont rangés du même côté, (4.9) permet de montrer que la résistance longitudinale $\mathcal{R}_{14,23}$ est identiquement nulle

$$\mathcal{R}_{14,23} = 0. \quad (4.11)$$

²³L'invariance par renversement du champ magnétique définit la relation de symétrie (relation d'Onsager) si la structure est à deux terminaux, et la relation de réciprocité si la structure est à plusieurs terminaux.

(4.10) et (4.11) définissent tous deux l'effet Hall quantique intégral (dans la région du gap).

Mais Büttiker ne s'est pas limité à l'étude de ce cas. Il discuta, de plus, la possibilité de brisure de l'effet Hall intégral en supposant l'existence d'un chemin percolatif (effet tunnel) permettant l'échange entre états de bords opposés [86, 112].

En effet, il considéra une structure avec N états de bords injectés par les réservoirs 1 dans 4 et 3 dans 2 de sorte que $N-K$ états de bords émis par le réservoir 4 (2) arrivent au terminal 3(1) et les K restants sont réfléchis dans le terminal 1(3). En admettant que $K < N$, la résistance Hall (en utilisant (4.9)) est donnée par $\mathcal{R}^{Hall} = \mathcal{R}_{13,42} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{N-K}$, c'est-à-dire quantifiée. Par ailleurs, les résistances longitudinales qui en découlent, sont données par $\mathcal{R}_1^{long} = \mathcal{R}_{12,43} = \frac{h}{e^2} \frac{K}{N(N-K)}$ et $\mathcal{R}_{14,23}^{long} = 0$, respectivement. La résistance longitudinale quantifiée, semble être en bon accord avec les mesures expérimentales réalisées par von Klitzing-Ebert [113] et Sypher-Stiles [114].

Plus important, est qu'en cas d'existence réelle de barrière, ces expressions peuvent être manipulées en admettant que la transmission est non quantifiée et que la réflexion est non nulle. En terme des coefficients de transmission et réflexion donnés par $T = \frac{N-K}{N}$ et $R = \frac{K}{N}$, respectivement, Büttiker montra que [112]

$$\mathcal{R}^{Hall} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{NT} \quad \text{et} \quad \mathcal{R}_1^{long} = \frac{h}{e^2} \frac{R}{NT}. \quad (4.12)$$

Ce résultat a été aussi dérivé dans un contexte différent par Jain-Kivelson [111] pour une structure à deux terminaux.

Les deux résistances dans (4.12) ne sont pas quantifiées et ne définissent pas l'effet Hall quantique intégral; la situation est tout autre. En revanche, l'effet Hall intégral correspond au cas particulier où $R = 0$, i.e. $K = 0$ (pas de réflexion), confirmant l'idée de Büttiker.

4.7.2 Approche de Landauer

Motivés par la mesure de von Klitzing d'une résistance longitudinale nulle (dans la région où les états sont complètement localisés) si le courant circulant est non dissipatif, ce qui est conforme avec la formule proposée par Landauer (voir détails dans chapitre 1), certains auteurs [111, 109] avaient opté pour l'approche de Landauer dans leur dérivation de l'effet Hall quantique intégral. Bien que les techniques de calculs aient été différenciées entre ces travaux, les objectifs

ont coïncidé.

- **Dérivation de Jain-Kivelson** [111] :

Ces auteurs ont étudié le transport dans une structure à deux terminaux (la même considérée par Landauer) soumise à un champ magnétique très intense, i.e. dans le cas extrême $\hbar\omega_c \rightarrow \infty$, Fig. 4-16. Par conséquent, le mouvement des électrons est limité au plus bas niveau de Landau ($n = 1$).

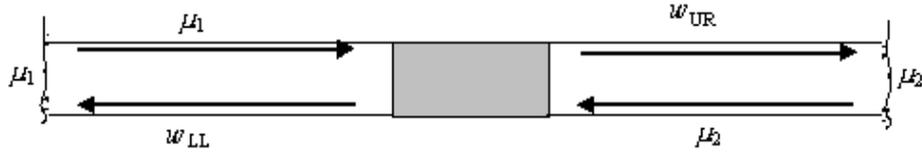


FIG. 4-16 – Structure mésoscopique à deux terminaux avec le potentiel du gate est contrôlé par une barrière potentiel.

Les réservoirs sont portés aux potentiels chimiques μ_1 et μ_2 , respectivement. Les états de bords qui se propagent de gauche à droite dans la direction positive (indexés par *up*) sont en équilibre avec le réservoir de gauche avec μ_1 , et les états de bords qui se propagent de droite à gauche (indexés par *low*) sont en équilibre avec le réservoir de droite avec μ_2 .

Dans leur description, ces auteurs considèrent qu'un électron peut être transmis à travers la barrière en empruntant soit le chemin semi-classique 1 soit par effet tunnel de 2 vers 2' (Fig. 4-17).

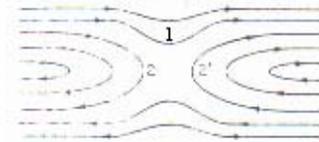


FIG. 4-17 – Contours d'égals potentiels au voisinage d'une barrière [111].

Donc en admettant qu'une fraction R du courant *up* émis dans la différence $\mu_1 - \mu_2$, soit réfléchi par la barrière dans le bord *low* du même terminal noté LL^{24} , le courant total qui

²⁴Le même processus se produit pour les états *low*.

parcours la structure une fois le régime stationnaire établi, est donné par $I = \frac{e}{h} T(\mu_1 - \mu_2)$. Jain-Kivelson montrèrent alors que les résistances longitudinales et Hall, sont données respectivement par :

$$\mathcal{R}^{Hall} = \frac{h}{e^2}, \quad \text{et} \quad \mathcal{R}^{long} = \frac{h}{e^2} \frac{R}{T}, \quad (4.13)$$

et donc coïncident avec (4.12) pour $N = 1$.

En adoptant l'approche de Landauer, ces auteurs furent les premiers à retrouver une résistance Hall quantifiée et une résistance longitudinale assez différente de zéro [115], en accord avec les prédictions expérimentales [116, 117]. Néanmoins, la dérivation d'une résistance Hall non quantifiée était bien probable dans leurs calculs.

• **Dérivation de Streda et al [109]**

La structure considérée ici est identique à celle de Jain-Kivelson mais avec maintenant plusieurs niveaux de Landau impliqués. L'objectif de ce travail, était de relier la différence de potentiel dissipative à travers la barrière à la matrice de transmission. Par ailleurs, la différence de potentiel Hall doit s'effectuer dans des régions accessibles expérimentalement.

Le système mésoscopique bi-dimensionnel de taille finie est soumis à un champ magnétique intense à température nulle²⁵. L'échantillon est en contact avec des terminaux parfaits de section finie, Fig. 4-16. La vitesse dans la direction de propagation est donnée par $v_{nk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon_{nk}}{dk}$. $v_{nk} > 0$ pour les états localisés au bord supérieur et $v_{nk} < 0$ pour ceux localisés au bord inférieur²⁶.

L'hypothèse faite par les auteurs suppose que les électrons injectés par les réservoirs adjacents à l'intérieur de l'échantillon au long des bords *up left* (UL) et *low right* (LR), sont portés aux potentiels μ_1 et μ_2 , respectivement. Ainsi, un électron dans un canal n $UL(LR)$ a une probabilité $T_{n'n} = |t_{n'n}|^2$ ($T'_{n'n}$) d'être transmis dans un canal n' du bord $UR(LL)$ et une probabilité $R_{n'n} = |r_{n'n}|^2$ ($R'_{n'n}$) d'être réfléchi dans un canal n' du bord $LL(UR)$. L'ensemble de ces coefficients vérifie la condition de conservation

$$\sum_n T_{n'n} + R'_{n'n} = \sum_n T'_{n'n} + R_{n'n} = 1, \quad (4.14)$$

²⁵pour éviter la dépendance des calculs en l'énergie.

²⁶dans un champ magnétique intense, les états de bords *up* et *low* ont la même vitesse, puisque nous supposons le potentiel de confinement symétrique.

et à l'intérieur du même terminal la condition

$$\sum_{n',n} (T_{n'n} + R_{n'n} - \delta_{n'n}) = 0. \quad (4.15)$$

Le courant à l'intérieur de la structure, transmis dans la différence de potentiel $(\mu_1 - \mu_2)$ est donné, une fois le régime stationnaire établi, par

$$\begin{aligned} I &= e(\mu_1 - \mu_2) \sum_{n,n'} v_{n'k} \mathcal{D}(E_F) T_{n'n} \\ &= \frac{e}{2\pi} \sum_{n,n'} T_{n'n} (\mu_1 - \mu_2) \frac{v_{n'k}}{d\varepsilon_{n'k}/dk} \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \sum_{n,n'} T_{n'n} \\ &= \frac{e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \text{Tr}(\mathbf{t}\mathbf{t}^+). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Afin de calculer les potentiels induits ω_{UR} et ω_{LL} , les auteurs ont emprunté le même chemin que Landauer. En admettant que les canaux s'équilibrent entre eux dans ces régions, un calcul élémentaire permet de déduire que

$$\omega_{LL} = \mu_1 + (\mu_1 - \mu_2) \frac{\sum_{n,n'} v_n^{-1} R_{nn'}}{\sum_n v_n^{-1}}, \quad (4.18a)$$

$$\omega_{UR} = \mu_1 + (\mu_1 - \mu_2) \frac{\sum_{n,n'} v_n^{-1} T_{nn'}}{\sum_n v_n^{-1}}, \quad (4.18b)$$

où l'indice du vecteur d'onde k dans la vitesse est implicite. Conséquemment, les résistances Hall $\mathcal{R}^{Hall} = (\mu_1 - \omega_{LL})/I$, et longitudinale $\mathcal{R}^{long} = (\mu_1 - \omega_{UR})/I$ sont données par

$$\mathcal{R}^{Hall} = \frac{h \sum_{n,n'} v_n^{-1} (\delta_{nn'} - R_{n'n})}{e^2 \sum_n v_n^{-1} \sum_{m,m'} T_{m'm}}, \quad (4.19a)$$

$$\mathcal{R}^{long} = \frac{h \sum_{n,n'} v_n^{-1} (\delta_{nn'} - T_{n'n})}{e^2 \sum_n v_n^{-1} \sum_{m,m'} T_{m'm}}. \quad (4.19b)$$

Comme première conséquence évidente à ce résultat, dans une structure avec n canaux de bords, on montre que

$$\mathcal{G} = (\mathcal{R}^{Hall} + \mathcal{R}^{long})^{-1} = \mathcal{G}^F = e^2/h \text{Tr}(\mathbf{t}^+\mathbf{t}). \quad (4.20)$$

Par ailleurs, dans la limite balistique avec $R_{n'n} = 0$, on montre que

$$\mathcal{R}^{Hall} = \frac{\hbar}{e^2} \frac{1}{N}, \quad \text{et} \quad \mathcal{R}^{long} = 0, \quad (4.21)$$

où N est le nombre de canaux de bords.

En outre, à la limite d'un seul niveau de Landau rempli (interceptant avec l'énergie de Fermi) correspondant à appliqué la limite $\hbar\omega_c \rightarrow \infty$, \mathcal{R}^{Hall} coïncide avec la résistance de contact (1.54) et \mathcal{R}^{long} est donnée par la formule de Landauer (1.52); coïncident avec (4.13). De plus, en tenant compte de la condition de conservation (4.15), la différence de potentiel entre réservoirs est donnée par $\mu_1 - \mu_2 = e(V_H + V_L)$ avec $V_H = \mu_1 - \omega_{LL}$ et $V_L = \mu_1 - \omega_{UR}$.

D'autant plus, la limite d'un champ magnétique nul peut être directement déduite. Dans ce cas les états de bords gauche (left) et droit (right) s'équilibrent entre eux dans chaque terminal avec les potentiels chimiques $w_L = \frac{1}{2}(\mu_1 + \omega_{LL})$ et $w_R = \frac{1}{2}(\mu_2 + \omega_{LR})$, respectivement. La conductance mesurée, $\mathcal{G} = I/(w_L - w_R)$ est alors du type Landauer, généralisée à plusieurs canaux (1.65).

4.7.3 Discussion

Ces deux travaux [111, 109] avaient fait l'objet d'une critique intensifiée par Büttiker [118]. Une critique visant surtout l'utilisation de la formule de Landauer et par conséquent la définition des potentiels induits à l'intérieur des terminaux en présence d'un champ magnétique intense. Néanmoins, en examinant de près tous ces travaux, il s'avère que la possibilité d'un tunneling entre états de bords opposés, est équivalent à considérer l'existence d'une barrière réfléchissante.

Principalement, Streda *et al* [109] ainsi que Jain-Kivelson [111, 110] considèrent séparément une structure à deux terminaux. Les terminaux (fictifs) de mesure de la tension Hall sont supposés être localisés dans des régions où la tension Hall demeure quantifiée. Expérimentalement, ceci est accessible si les probes sont dans des régions exhibant l'effet Hall quantique [119]. En revanche, Büttiker traite le cas réaliste où les probes de mesure sont réels (non fictifs) et se trouvent dans des régions pas obligatoirement quantifiées, mais, tout en insistant, que les potentiels induits de part et d'autre de l'échantillon sont identiques aux potentiels des réservoirs adjacents, i.e. les états de bords s'équilibrent avec les potentiels des réservoirs adjacents.

Alternativement, le choix artificiel de la localité des terminaux de mesure de la tension

dissipative, exceptionnellement permis dans les systèmes mésoscopiques, selon Streda *et al* [119] et Jain-Kivelson [120] n'affecte pas la dissipation à cause de leur non invasivité²⁷.

Enfin, soulignons qu'ultérieurement Haug *et al* [117] ont étudié le cas où la barrière est contrôlée par un potentiel du gate et placée entre des régions où l'équilibre dans chaque bord est indépendamment établi. Ces expériences ont mis en évidence les résultats de Streda *et al* [109] dans le cas où seul le plus bas niveau de Landau est inclus. Cependant, pour le cas réaliste avec plusieurs niveaux impliqués et donc plusieurs canaux, l'expérience a signalé de grandes divergences avec l'analytique qui propose plusieurs formules de généralisations (voir [117]).

4.8 Conclusion

En conclusion, seul le modèle par les états de bords, utilisé avec succès dans plusieurs expériences [117], permet une description réaliste du transport électronique dans un champ magnétique intense si la différence de potentiel chimique entre réservoirs $\Delta\mu$ est plus faible que l'énergie cyclotron ($\hbar\omega_c$).

Par ailleurs, l'idée prééminente adoptée dans l'explication de ce régime, considère que si l'énergie de Fermi est dans la région d'états localisés, la conductivité Hall est quantifiée en multiples entiers de e^2/h et la conductance longitudinale est nulle. Un argument qui ne demeure pas fiable au voisinage des centres des bandes de Landau où les états massifs localisés ne peuvent être spatialement séparés des états de bords [30].

Ainsi, le besoin d'une théorie capable de fournir des résultats quantitatifs pouvant décrire entièrement l'effet Hall quantique intégral et la déviation de la quantification sous des conditions non idéales, s'impose. C'est dans ce contexte que s'inscrit le travail que nous présentons dans le prochain chapitre.

²⁷Les terminaux de mesure réels introduits dans le point de vue de Landauer doivent vérifier les conditions de non invasivité [39].

Chapitre 5

Théorie de l'effet Hall quantique intégral dans l'approche de Landauer

5.1 Introduction

Depuis la découverte de l'effet Hall quantique [19], peu de travaux se sont intéressés à le dériver à partir de la théorie de la réponse linéaire. Mis à part le travail de Kucera-Streda [56] intitulé : “Relation between transport coefficient and scattering matrices in \mathbf{B} strong field” qui optait en quelque sorte pour le point de vue de Landauer [10], les autres travaux avaient adopté l'approche de Kubo [86, 121, 122].

Partant de la formule du courant dérivée de façon self-consistante à partir de la réponse linéaire par Langreth-Abrahamas [65], Kucera-Streda [56] ont pu montrer que dans une structure de Hall¹, la magnétoconductance longitudinale est donnée, dans la limite d'un canal de propagation, par la formule de Landauer [10, 41]. Quant à la dérivation de la conductance Hall, les auteurs étaient contraints d'admettre que la différence de potentiel perpendiculaire au flux de courant, établi à l'intérieur des terminaux parfaits, est dépendante de l'indice du canal : $\Delta\mu_n = \mu_n^+ - \mu_n^-$. Conséquemment, la réponse des porteurs à l'intérieur des terminaux, servant

¹Structure bi-dimensionnelle soumise à un champ magnétique perpendiculaire intense.

de transport du courant à travers la structure, se présente comme

$$I = \frac{e}{2\pi} \sum_n \int_{k_n^-}^{k_n^+} v_n(k) dk = \frac{e^2}{h} \sum_n \frac{\Delta\mu_n}{e}, \quad (5.1)$$

de sorte que dans le cas limite d'un seul canal de propagation, la conductance Hall est quantifiée :

$$\mathcal{G}^{Hall} = \frac{e^2}{h}. \quad (5.2)$$

D'autre part, en admettant que dans une structure à plusieurs terminaux l'approche de Kubo et celle de Landauer sont quantitativement équivalentes, Baranger-Stone [16] se sont basés dans la discussion de l'effet Hall quantique intégral sur la formule définissant le courant circulant dans chaque terminal en terme des potentiels chimiques des réservoirs adjacents² :

$$I_m = \frac{e}{h} [-N\mu_m + \sum_{n=1}^{N_T} T_{mn}\mu_n], \quad (5.3)$$

avec N_T est le nombre de terminaux.

En suivant une recette proposée par Büttiker [86], précisant qu'une mesure de Hall ne peut être réalisée que dans une structure à quatre terminaux et plus (voir chapitre 4), Baranger-Stone conclurent que l'effet Hall intégral correspond (selon l'équation (5.3)) à une transmission totale des électrons à travers l'échantillon. C'est à dire que sous l'effet d'un champ magnétique intense, l'échantillon désordonné aura un comportement ordonné (voir chapitre 4) et le flux de courant à travers la région mésoscopique sera défini par les états de bords. Ceci leur a permis de conclure que la résistance Hall est en fait une résistance de contact transformée, en raison de la forte intensité du champ magnétique, en cette dernière et que la résistance longitudinale est nulle.

Mais, avant l'apparition de ces travaux et toujours dans le cadre de l'approche de Kubo et la théorie de la réponse linéaire, P. Streda [123, 122] s'est préoccupé du calcul du tenseur conductivité σ_{ij} . Il sépare σ_{ij} , dans un régime de Hall, en deux parties; diagonale et non diagonale [124]. La composante diagonale est donnée par la formule de Kubo [53], alors que celle non diagonale [125], définissant la conductivité Hall, Streda [123, 122] montre qu'elle se

²Une formule dérivée au préalable heuristiquement par Büttiker [86] et demeure vérifiée même en présence d'un champ magnétique intense.

sépare en deux autres parties : La première notée σ_{ij}^I , coïncide avec la formule classique de Drude [35], alors que la seconde σ_{ij}^{II} est sans analogue classique. σ_{ij}^{II} portée à l'énergie de Fermi, est donnée par la variation du nombre d'états par rapport à la variation du champ magnétique appliqué :

$$\sigma_{ij}^{II} = e \left. \frac{\partial N(\varepsilon)}{\partial B} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F}. \quad (5.4)$$

Ainsi, Streda [123] définit qu'une conductivité Hall quantifiée correspond au cas où l'énergie de Fermi traverse un gap entre deux niveaux de Landau (plateaux, voir spectre d'énergie chapitre 4). En effet, lorsque l'énergie de Fermi traverse une région d'états localisés, la densité d'états correspondante s'annule. Dans ce cas, les éléments diagonaux du tenseur conductivité de même que le terme classique de la conductivité Hall s'annulent, et par conséquent la conductivité Hall est quantifiée, d'où le nom d'effet Hall quantique intégral :

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0 \quad \text{et} \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = ec \left. \frac{\partial N(\varepsilon)}{\partial B} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F}. \quad (5.5)$$

Si la température est non nulle,

$$\sigma_{ij} = - \int \frac{d\rho_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sigma_{ij}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (5.6)$$

où $\rho_0(\eta)$ est la fonction distribution de Fermi-Dirac.

En examinant de près ces différentes techniques, nous pouvons en déduire que :

- Bien que le travail de Kucera-Streda [56] définit une étude assez rigoureuse de l'effet Hall quantique, les conductances Hall et longitudinale ne sont explicitées que dans le cas d'un seul canal de propagation. Ceci constitue un cas très restreint, alors que celui à plusieurs canaux est une nécessité.

- Baranger-Stone partent de l'hypothèse faite par Büttiker stipulant que sous l'effet d'un champ magnétique intense, le désordre substitutionnel aura un effet négligeable sur le mouvement des électrons. Par conséquent, dans un régime de Hall $\mathcal{R}^{Hall} \sim \mathcal{R}^{contact}$ et $\mathcal{R}^{long} = 0$. Néanmoins, Büttiker prédit dans certains de ses modèles la mesure d'une résistance Hall quantifiée avec une résistance longitudinale du type Landauer³ [10, 41] (chapitre 4). Cette idée a

³Ce problème a été aussi discuté avec Büttiker lors de notre rencontre à l'école des Houches en septembre

été aussi critiquée par Macdonald *et al* [119] et aussi par Jain et Kivelson [120] en réponse à une première critique formulée par Büttiker [118] sur les travaux de ces derniers. Pour plus de détail voir chapitre 4.

- Critiqué par Baranger-Stone, il semble que le travail de P. Streda souffre de quelques inconsistances :

(a) La conductivité (quantité intrinsèque) dérivée est une quantité moyennée sur le volume total et sur le désordre. Ces moyennes qui éliminent toute empreinte du mésoscopique permettent de conclure que le traitement de Streda s'applique à des systèmes larges, i.e. macroscopiques.

(b) Aussi, les terminaux assurant le transport du courant des réservoirs vers la structure mésoscopique ont été complètement ignorés dans son traitement, d'où l'appel à la formule de Kubo qui traite les réservoirs comme l'univers.

(c) Bien que, par définition, la conductivité dépend des états au dessous de l'énergie de Fermi, Streda s'est limité à température nulle pour dériver une conductivité dépendante de l'énergie de Fermi. Ceci lui permet de faire tendre la densité d'états vers zéro quand l'énergie de Fermi traverse un gap d'énergie (entre deux niveaux de Landau), définissant ainsi les plateaux et par conséquent une conductance Hall quantifiée.

- Enfin tous ces auteurs ont considéré, dans leurs calculs, le potentiel appliqué entre les réservoirs et non pas le vrai potentiel électrostatique induit à l'intérieur de la structure, de part et d'autre de l'échantillon mésoscopique. En outre, aucune de ces formules proposées n'a pu décrire la brisure de l'effet Hall quantique.

Motivés par la mesure de von Klitzing-Doroda-Pepper mettant en évidence les idées de Landauer concernant la mesure à l'intérieur des terminaux, une des plus spectaculaires applications de la théorie de la réponse linéaire, résultat (2.59), serait le traitement de l'effet Hall quantique dans les systèmes mésoscopiques.

Evidemment, puisque nous nous intéressons au calcul de la conductance, quantité extrinsèque mesurée dans l'expérience, en l'absence d'un calcul microscopique pour décrire l'effet Hall quantique intégral, nous proposons d'étendre la théorie de la réponse linéaire élaborée au chapitre 3, sur la base des résultats du chapitre 2, à l'étude d'une structure de Hall à deux terminaux ; moins commun qu'une mesure à quatre terminaux (voir annexe H), une mesure à

2001 [47].

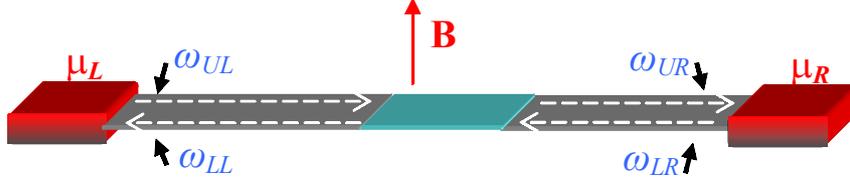


FIG. 5-1 – Structure mésoscopique bi-dimensionnelle soumise à un champ magnétique $B\hat{z}$ intense.

deux terminaux est bien réalisable [126].

5.2 Formulation du problème

Dans le régime de Hall quantique, l'électron est contraint de se mouvoir dans une structure bi-dimensionnelle. Pour ceci, nous considérons la même structure mésoscopique étudiée au chapitre 3⁴, avec maintenant Ω remplacé par $S = L \times W$, où L est la longueur de la structure et W sa largeur. La structure formée par l'échantillon désordonné et les terminaux, est soumise à l'action d'un champ magnétique intense ($\omega_c\tau \gtrsim 1$) perpendiculaire $\mathbf{B} = B\hat{z} = \text{rot}\mathbf{A}$ et considérons la jauge de Landau $\mathbf{A} = -By\hat{i}$.

Dans le cadre de l'approche de Landauer, l'Hamiltonien total qui décrit la dynamique d'un électron de conduction dans la structure sus-mentionnée s'écrit

$$h_{tot} = h^0 + V(x, y) + \omega(x, y), \quad (5.7)$$

où h^0 est l'Hamiltonien libre en présence du champ magnétique (2.6), $V(x, y)$ est le potentiel résultant de l'interaction électrons-impuretés, et $\omega(x, y)$ est le potentiel électrochimique induit à l'intérieur de la structure dépendant de x et y , Fig. 5-1.

Les états propres de h^0 sont donnés par le produit d'ondes planes se propageant dans la

⁴L'échantillon mésoscopique est en contact avec deux terminaux parfaits semi-infinis en contact à leurs tours aux réservoirs source et évier de courant.

direction x et de fonctions transverses dans la direction de confinement y :

$$\varphi_\xi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm i k_a x} \chi_\xi(y). \quad (5.8)$$

ξ dénote le vecteur d'onde longitudinale k_a , le canal de propagation a ainsi que la direction de propagation $\sigma = \pm$; $\xi \equiv (a k_a \sigma)$, et $\chi_\xi(y) \equiv \chi_{a k_a \sigma}(y)$ est solution de l'équation de Schrödinger réduite

$$\left[\frac{1}{2m^*} (\pm \hbar k_a + eBy)^2 + \frac{p_y^2}{2m^*} + V_c(y) \right] \chi_\xi(y) = \varepsilon_\xi \chi_\xi(y). \quad (5.9)$$

Physiquement en présence d'un champ $B\hat{z}$ intense, les fonctions transverses seront basculées vers les états de bords avec une vitesse $\sim k_a$ dans les directions de propagation $\sigma = \pm$; c'est pourquoi on parle de courant entraîné à l'intérieur de la structure à l'aide des états de bords.

5.3 Opérateur densité en présence d'un champ magnétique intense dans l'approche de Landauer

Pour les mêmes considérations physiques discutées dans le chapitre 2 qui tiennent compte de l'effet de la self-consistance sur la mesure effectuée à l'intérieur des terminaux et l'effet qualitatif que cause la nullité du terme en $s\rho_d$ dans le régime stationnaire, l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer demeure formellement vérifié même en présence d'un champ magnétique intense lors de la formation des états de Bords. Il s'écrit

$$\varrho^L = \varrho^1 + \sum_\xi |\Psi_\xi^+\rangle \langle \Psi_\xi^+| \varrho_{\xi\xi}^L, \quad (5.10)$$

avec dans ce cas $\rho_{\xi\xi}^L$ vérifie l'équation maîtresse

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Lambda}_{\rho_d}^L &= -\frac{1}{e}\rho_0'(h^0) \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| \oint d\ell \cdot \left(\mathbf{j}_{\xi\xi}^-(\mathbf{r})\omega(\mathbf{r}) \right) \\
&= -\frac{1}{e}\rho_0'(h^0) \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| \sum_{i=L,R} \eta_i \int d\ell_i \cdot \mathbf{j}_{\xi\xi}^{x^-}(\mathbf{r}_i)\omega_i(y) \\
&= -\frac{1}{e}\rho_0'(h^0) \sum_{i=L,R} \eta_i \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| \int dy \mathbf{j}_{\xi\xi}^{x^-}(\mathbf{r}_i)\omega_i(y). \tag{5.11}
\end{aligned}$$

Le passage de la première égalité à la seconde dans (5.11) est dû au fait que seules les lignes transversales (perpendiculaires à \hat{x}) contribuent, car le courant s'annule sur les faces latérales dans une structure de Hall confinée (voir explication chapitre 1). Par ailleurs, comme le champ électrique est supposé nul à l'extérieur de S , les lignes transversales ℓ peuvent être choisies arbitrairement en dehors de S ; dans les régions asymptotiques. $\ell_i = \ell_L, \ell_R$ sont deux lignes transverses orientées dans le sens positif avec $\eta_{L(R)} = +1, -1$.

D'autre part, puisque le champ magnétique appliqué est intense, le potentiel électrochimique $\omega(x, y)$ dans les régions asymptotiques des terminaux n'est pas constant mais dépend de la position y . $\omega(x, y)$ sera alors remplacé par $\omega_i(y)$ avec $i = L, R$ est l'indice du terminal. Mais, comme $y \in [-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$, $\omega_i(y)$ se sépare dans les régions asymptotiques ($|x| \rightarrow \infty$) en : $\omega_L(y > 0)$, $\omega_R(y > 0)$, $\omega_L(y < 0)$ et $\omega_R(y < 0)$. Par ailleurs, le cas avec $y = 0$ correspond aux états massifs non conducteurs du courant.

Cette dépendance est une conséquence de la formation des états de bords qui se séparent dans la direction y , perpendiculaire au flux de courant, en des états *up* (haut) et des états *low* (bas) (chapitre 4) et se propagent avec des vitesses positives dans les directions positive et négative, respectivement : Les états ayant $y > 0$, se propagent de gauche à droite quant aux états ayant $y < 0$, ils se propagent de droite à gauche. Pour une écriture plus compacte, posons :

$$\omega_L^+ = \lim_{\substack{x \rightarrow -\infty \\ y > 0}} \omega_L(y), \quad \omega_L^- = \lim_{\substack{x \rightarrow -\infty \\ y < 0}} \omega_L(y), \quad \omega_R^+ = \lim_{\substack{x \rightarrow \infty \\ y > 0}} \omega_R(y), \quad \omega_R^- = \lim_{\substack{x \rightarrow \infty \\ y < 0}} \omega_R(y). \tag{5.12}$$

Autrement, pour un champ $B\hat{z}$ intense, $\omega_i(y)$ induit dans les régions asymptotiques (à l'intérieur de l'intégrale) sera remplacé par ω_i^{σ} avec σ traduit la direction de propagation du courant correspondant. Mais avant tout autre développement, ce potentiel pourrait-il dépendre

de l'indice du canal de propagation ?

Physiquement, en présence d'un champ magnétique, une structure à plusieurs canaux correspond au cas où plusieurs niveaux de Landau sont occupés [109]. Les électrons émis dans chaque canal ne sont pas en équilibre thermodynamique mais en état stationnaire caractérisé par un courant constant.

Admettons, dans ce qui suit, que les niveaux de Landau dans chacune de ces régions s'équilibrent entre eux avec le même potentiel électrochimique induit ; totalement différents de ceux des réservoirs adjacents. Ceci est justifié si l'interaction interne entre états de bords dans chacune des quatre régions est assez forte pour établir un équilibre local, alors que celle entre états de bords de régions différentes est négligeable devant celle-ci (i.e. la largeur de la structure est supérieure à la longueur magnétique [127]).

Effectivement, cette idée suggérée en premier par Jain-Kivelson [110], leur permis de définir un potentiel moyen (mesuré) indépendant de l'indice du canal dans les régions sus-mentionnées. Juste après, Streda *et al* [109] ont clarifié les conditions physiques conduisant à un tel résultat. Ces auteurs ont supposé que ce sont les collisions inélastiques, existant toujours à l'intérieur des terminaux, qui sont à l'origine de l'équilibre des états de Bords dans chacune des quatre régions. Par conséquent, ils dérivent une magnétoconductance longitudinale du type Büttiker-Imry-Landauer et Pinha (1.65) [44].

En revanche, Kucera-Streda [56] ont suggéré dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire qu'une mesure ne peut avoir lieu que si chaque état est dans un équilibre local indépendamment des autres états. Autrement dit, le potentiel mesuré dans chacune des quatre régions de la structure doit dépendre de l'indice du canal⁵.

En analysant ces deux idées d'un point de vue microscopique, l'idée de Jain-Kivelson [110] nous semble être la plus réaliste. Ceci peut être vérifié si nous considérons la limite où le champ magnétique est faible ou nul. Dans ce cas, les états de bords se mélangent entre eux, de sorte que dans les régions asymptotiques les potentiels $\omega_{L(R)}^+$ et $\omega_{L(R)}^-$ seront remplacés par

$$\omega_L^+ = \omega_L^- = \omega_L \quad \text{et} \quad \omega_R^+ = \omega_R^- = \omega_R, \quad (5.13)$$

⁵indice du canal ou indice du niveau de Landau.

et le courant circulant est alors donné par la somme de (3.50) et (3.57).

Par contre, si nous considérons la même limite dans le cadre de l'idée de Kucera-Streda, on devrait alors moyenner le potentiel mesuré sur tous les canaux : $\omega = \frac{1}{N} \sum_a \omega_a$, ce qui n'est pas évident puisque dans ce cas les formules que nous retrouverons dépendront toujours des potentiels mesurés.

Donc en adoptant l'idée de Jain-Kivelson, $\omega_i(y)$ à l'intérieur de l'intégrale dans (5.11) est indépendant de l'énergie ainsi que l'indice du canal mais dépend uniquement de la direction de propagation σ . Ceci étant, (5.11) se présente comme suit

$$\mathbf{\Lambda}_{\mathcal{G}_d^L} = -\frac{1}{e} \rho'_0(h^0) \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| \sum_{i=L,R} \eta_i \omega_i^{\sigma} \int dy j_{\xi\xi}^{x^-}(\mathbf{r}_i), \quad (5.14)$$

et pourrait être simplifiée davantage en

$$\mathbf{\Lambda}_{\mathcal{G}_d^L} = -\frac{1}{e} \rho'_0(h^0) \sum_{\xi} |\varphi_{\xi}\rangle \langle \varphi_{\xi}| (\Delta\omega^{\sigma})(i^-)_{\xi\xi}, \quad (5.15)$$

à cause de la conservation du courant, avec $(\Delta\omega)^{\sigma} = (\omega_L - \omega_R)^{\sigma}$ dans (5.15) définit la différence entre les potentiels électrochimiques développés dans les régions asymptotiques de part et d'autre de l'échantillon, dépendante dans une structure de Hall du sens du courant porté par les états de bords. Les états de bords *up* seront émis dans une différence de potentiel *up*, $(\Delta\omega)^+$, et ceux *low* dans une différence de potentiel *low*, $(\Delta\omega)^-$, tels que :

$$(\Delta\omega)^+ = \omega_L^+ - \omega_R^+, \quad (\Delta\omega)^- = \omega_L^- - \omega_R^-. \quad (5.16a)$$

Pour une écriture plus simplifiée, nous dénoterons désormais ω_L^+ par ω_{UL} , ω_L^- par ω_{LL} , ω_R^+ par ω_{UR} , et enfin ω_R^- par ω_{LR} . Ainsi,

$$(\Delta\omega)^+ = \omega_{UL} - \omega_{UR}, \quad \text{et} \quad (\Delta\omega)^- = \omega_{LL} - \omega_{LR}, \quad (5.17)$$

avec les potentiels ω_{UL} et ω_{LR} différents respectivement des potentiels chimiques des réservoirs adjacents : $\omega_{UL} \neq \mu_L$ et $\omega_{LR} \neq \mu_R$ ⁶.

⁶ce qui n'a pas été admis dans le calcul probabiliste de Streda et al [109].

Ces potentiels induits vérifient, dans un régime de Hall quantique, la relation bien connue (chapitre 4) :

$$\omega_{UL} - \omega_{LL} = \omega_{UR} - \omega_{LR}, \quad (5.18)$$

qui est une conséquence du régime stationnaire [?, 110, 127] et notamment de la symétrie de cette structure. En ce sens, on déduit que

$$(\Delta\omega)^+ = (\Delta\omega)^- = \Delta\omega = \omega_{UL} - \omega_{UR}. \quad (5.19)$$

5.4 Valeur moyenne du flux de courant I dans un champ \mathbf{B} intense

Comme conséquence de l'existence des impuretés, la densité de courant à un corps en un point \mathbf{r}' appartenant à la surface totale S est donnée en présence d'un champ magnétique $B\hat{z}$ intense par (2.60) ($\mathbf{j}(\mathbf{r}') = \frac{e}{2m^*} [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + (\mathbf{p} - e\mathbf{A})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]$).

Dans le régime stationnaire la moyenne du flux de courant à travers une section arbitraire \mathbf{S} est donnée par la trace du produit de ce dernier par l'opérateur densité, (5.10) avec (5.15),

$$I = \text{Tr} \varrho^L i = \text{Tr} \left(\varrho^L \int dy j^x(\mathbf{r}) \right), \quad (5.20)$$

qui s'écrit convenablement (pour la simplification des calculs) comme la somme de I^1 du type Kubo et I^{SC} lié au traitement self-consistant. I vérifie toujours les conditions de conservation générales dérivées au chapitre 2.

Puisque, actuellement, les expressions formelles de l'opérateur densité Landauer et du flux de courant dans une structure de Hall à deux terminaux sont établies, l'étape prochaine consiste à déterminer les expressions explicites des courants I^{SC} et I^1 . Ceci nous permettra d'obtenir l'expression explicite de I ainsi que celle de l'opérateur densité Landauer ϱ^L en présence d'un champ $\mathbf{B} = B\hat{z}$ intense, en fonction des potentiels induits dans les régions asymptotiques et en terme des amplitudes de transmission et réflexion relatives à l'échantillon mésoscopique.

5.4.1 Expression de I^1 dans un champ $B\hat{z}$ intense

Exprimé en terme d'une intégrale sur l'énergie

$$I^1 = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] I^1(\varepsilon), \quad (5.21)$$

le courant $I^1(\varepsilon)$ (du type Kubo) défini par (2.111) et produit par des porteurs d'énergie ε , s'écrit en présence d'un champ $B\hat{z}$ intense comme

$$\begin{aligned} I^1(\varepsilon) &= \frac{1}{2} \sum_{\xi} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\xi}) \oint d\ell \cdot (\mathbf{j}_{\xi\xi}^+(\mathbf{r}) w(\mathbf{r})) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\xi} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\xi}) (\Delta\omega)^{\sigma} \int dy j_{\xi\xi}^{+x}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (5.22)$$

En sus, à énergie ε la sommation sur ξ dans (5.22) est équivalente à une somme sur le vecteur d'onde k_a , les canaux de transmission a , et la direction de propagation σ (voir (3.12)), $I^1(\varepsilon)$ se simplifie, après intégration sur ε_{ξ} , en

$$I^1(\varepsilon) = \frac{e}{2h} \Delta\omega \sum_{a\sigma}^{\varepsilon} \sigma (\Pi^+)_{(a\sigma)(a\sigma)}^{\varepsilon}, \quad (5.23)$$

après avoir tenu-compte de (5.19). Les $(\Pi^+)_{(a\sigma)(a\sigma)}^{\varepsilon}$ définissent les composantes du vecteur colonne $\mathbf{\Pi}^+$, (3.31), données par (3.30a-d).

Définissons par $\mathbf{1}$ le vecteur ayant pour composantes $(\mathbf{1})_{\sigma\sigma} = \sigma = \pm 1$, $I^1(\varepsilon)$ s'écrit aussi sous forme compacte comme

$$I^1(\varepsilon) = \frac{e}{2h} \Delta\omega (\mathbf{\Pi}^+ \cdot \mathbf{1}). \quad (5.24)$$

Entre autres, dans un champ magnétique intense, le courant du type Kubo, $I^1(\varepsilon)$ s'exprime en terme des coefficients de transmission comme

$$I^1(\varepsilon) = \frac{e}{2h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \sum_a^{\varepsilon} \{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} + [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} \}. \quad (5.25)$$

5.4.2 Expression de I^{SC} dans un champ $B\hat{z}$ intense

Pour ce qui est du terme résultant du traitement self-consistant et traduisant l'effet de la suppression des contacts (éliminés dans le point de vue de Landauer), dans un champ magnétique $\mathbf{B} = B\hat{z}$ intense, il s'écrit

$$I^{SC} = \text{Tr} \varrho^{SC} i = \sum_{\xi} i_{\xi\xi}^{x+} \varrho_{\xi\xi}^L, \quad (5.26)$$

avec $\varrho_{\xi\xi}^L$ est solution de (5.15).

Sachant que $\mathbf{\Lambda}$ est une matrice non inversible, en procédant de la même manière que dans le chapitre 3, on montre après quelques manipulations algébriques que ϱ_d^L à énergie ε prend la forme matricielle suivante :

$$\varrho_d^L = [-f'(\varepsilon)] \Delta\omega \tilde{\Gamma}^{-1} (\mathbf{\Pi}^-), \quad (5.27)$$

où $\tilde{\Gamma}$ est le superopérateur inversible qui remplace le superopérateur non inversible Γ défini à énergie fixée par la matrice (3.40), et $\Delta\omega = \omega_{UL} - \omega_{UR}$ est la différence de potentiel établie de part et d'autre de l'échantillon désordonné dans une structure de Hall.

Par substitution de (5.27) dans (5.26), il vient que

$$I^{SC} = \Delta\omega \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_{\xi\beta} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\xi}) [i^{x+}]_{\xi\xi} [\tilde{\Gamma}_{\xi\xi|\beta\beta}^{-1} \mathbf{\Pi}_{\beta\beta}^-]. \quad (5.28)$$

L'intégration sur l'énergie ε_{ξ} permet d'écrire formellement à énergie ε

$$I^{SC}(\varepsilon) = \frac{e}{h} \Delta\omega \left[\mathbf{\Pi}^+ \cdot (\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) \right], \quad (5.29)$$

et explicitement, en tenant compte de (5.18),

$$\begin{aligned} I^{SC}(\varepsilon) = & \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1}]_{a+|b+}^{\varepsilon} [\mathbf{t}^L(\mathbf{t}^L)^+]_{bb} - \right. \\ & [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1}]_{a+|b-}^{\varepsilon} [\mathbf{t}^R(\mathbf{t}^R)^+]_{bb} - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1}]_{a-|b+}^{\varepsilon} [\mathbf{t}^L(\mathbf{t}^L)^+]_{bb} \\ & \left. + [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1}]_{a-|b-}^{\varepsilon} [\mathbf{t}^R(\mathbf{t}^R)^+]_{bb} \right\}, \quad (5.30) \end{aligned}$$

avec $\tilde{\Gamma}^{-1}$ est défini par (3.45).

5.4.3 Valeur moyenne du flux de courant

En combinant (5.24) et (5.29), la valeur moyenne du courant dans une structure de Hall à deux terminaux et dans le point de vue de Landauer, s'écrit donc formellement à énergie fixée, comme

$$I(\varepsilon) = \frac{e}{h} \Delta\omega \left\{ \left(\mathbf{\Pi}^+ \cdot (\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) \right) + \frac{1}{2} (\mathbf{\Pi}^+ \cdot \mathbf{1}) \right\}. \quad (5.31)$$

Par ailleurs, ce courant peut être simplifié davantage, après quelques manipulations algébriques, en

$$\begin{aligned} I(\varepsilon) &= \frac{e}{h} \Delta\omega \left\{ \left(\mathbf{\Pi}^+ \cdot (\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{\Pi}^-) \right) + \frac{1}{2} \left(\mathbf{\Pi}^+ \cdot (\tilde{\Gamma}^{-1} \tilde{\Gamma} \mathbf{1}) \right) \right\} \\ &= \frac{e}{h} \Delta\omega \left[\mathbf{\Pi}^+ \cdot \left\{ \tilde{\Gamma}^{-1} \left(\mathbf{\Pi}^- + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma} \mathbf{1} \right) \right\} \right] \\ &= \frac{e}{h} \Delta\omega \left\{ \mathbf{\Pi}^+ \cdot [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}] \right\}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

sachant que $\mathbf{\Pi}^- + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma} \mathbf{1} = \mathbf{1}$. $I(\varepsilon)$ s'écrit aussi en explicitant $\mathbf{\Pi}^+$ comme

$$I(\varepsilon) = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \sum_a^\varepsilon \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.33)$$

avec $[\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon$ sont définis par (3.68).

Formellement cette expression ressemble à celle dérivée en présence d'un champ magnétique $B\hat{z}$ faible et/ou nul (voir chapitre 3), mais elle n'est pas identique puisqu'elle est exprimée en terme de la différence de potentiel $\omega_{UL} - \omega_{UR}$. Cette différence se forme entre états de bords *up* résultants de l'application du champ magnétique intense et se réduit dans le cas limite suscité aux potentiels $\omega_L - \omega_R$ (équation (5.13)).

5.5 Magnétoconductance longitudinale

Dès lors, la magnétoconductance longitudinale $\mathcal{G}^{long}(\varepsilon, B)$, définie par le rapport entre courant circulant à la différence du potentiel électrochimique induit de part et d'autre de

l'échantillon $\Delta\omega_{||} = (\omega_{UL} - \omega_{UR})/e$, résultante se met sous la forme

$$\mathcal{G}^{long}(\varepsilon, \mathbf{B}) = 2\frac{e^2}{h} \sum_a^\varepsilon \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.34)$$

où l'on a tenu compte de la dégénérescence de spin. C'est-à-dire que $\mathcal{G}^{long}(\mathbf{B}) = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \mathcal{G}^{long}(\varepsilon, \mathbf{B})$ est identique à la magnétoconductance dérivée au chapitre 2⁷, à la différence que dans ce cas les états de Landau ne se mélangent pas mais se séparent en des états de bords et des états massifs. En outre, puisque les amplitudes de transmission t et de réflexion r dépendent du champ magnétique B , i.e. la variation du potentiel désordonné, conduit à des oscillations du type *Shubnikov-De Haas* [31, 94].

Cependant, en cas de mixture des niveaux de Landau, correspondant à considérer le champ magnétique appliqué faible ou nul, l'expression de $\mathcal{G}^{long}(\varepsilon, B)$ est alors identique à (5.34) sauf que pour B faible les oscillations sont relativement faible et pour B nul, elles sont nuls et donc en accord avec l'expérience, Fig. 4-2.

En revanche, le calcul de la conductance Hall, \mathcal{G}^{Hall} , définie par le rapport entre courant circulant I , (5.33), à la différence de potentiel $\Delta\omega_{\perp} = (\omega_{LR} - \omega_{LL})/e$ n'est pas aussi simple. Pour ceci, on a besoin d'exprimer $\omega_{UL} - \omega_{LL}$ de même que $\omega_{UR} - \omega_{LR}$ en terme de $\omega_{UL} - \omega_{UR}$.

Jusque là cette expression n'a été déterminée qu'heuristiquement à partir de la relation d'Einstein généralisée à température nulle [31, 41]. Celle-là a le privilège de relier la différence de potentiel de part et d'autre de l'échantillon mésoscopique, à la différence de la densité d'états Δn établie, en admettant que les potentiels induits ω_{UL} et ω_{LR} sont identiques aux potentiels des réservoirs adjacents : $\omega_{UL} = \mu_L$ et $\omega_{LR} = \mu_R$ [109].

Avant de procéder avec le calcul quantitatif de la conductance Hall, il serait plus convenable d'établir à ce niveau une comparaison des expressions du flux de courant I dans un champ magnétique $B\hat{z}$ faible ((3.50) avec (3.56)) et un champ $B\hat{z}$ intense (5.33).

En effet, cette comparaison nous a permis de dériver l'expression formelle de l'opérateur densité ϱ^L dans un champ magnétique $B\hat{z}$ arbitraire une fois le régime stationnaire établi. ϱ^L

⁷Comme ω_{UL} et ω_{UR} sont différents des potentiels des réservoirs adjacents, la magnétoconductance longitudinale que l'on obtient est du type Landauer.

s'écrit dans l'approche de Landauer sous forme plus appropriée comme

$$\varrho^L = -\Delta\omega \sum_{\xi} |\Psi_{\xi}^+\rangle \langle \Psi_{\xi}^+| \left[f'(h^0)(\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}) \right]_{\xi\xi}, \quad (5.35)$$

avec $\Delta\omega = \omega_{UL} - \omega_{UR}$ si B est intense, et $\Delta\omega = w_L - w_R$ si B est faible. Cet opérateur sera désormais utilisé dans le calcul de toute grandeur physique si la structure mésoscopique considérée est à deux terminaux.

5.6 Densité de particules $N(\mathbf{r})$

Microscopiquement, à cause de l'existence des impuretés (non homogénéité de l'échantillon), l'opérateur densité de particules⁸ en un point \mathbf{r} appartenant au volume total est alors donné par

$$n(\mathbf{r}) = e \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (5.36)$$

(Ici \mathbf{r}' est un opérateur et \mathbf{r} est une valeur). Puisque cette densité définit un opérateur à un corps, la contribution de chaque électron à la moyenne d'ensemble en un point \mathbf{r} défini par $N(\mathbf{r})$ ⁹ est donnée dans le point de vue de Landauer par la trace du produit de cet opérateur par l'opérateur densité à un corps ϱ^L :

$$N(\mathbf{r}) = e \text{Tr} \varrho^L \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (5.37)$$

Par substitution de (5.35) dans (5.37), en présence d'un champ magnétique intense, la densité de particules s'écrit

$$\begin{aligned} N(\mathbf{r}) &= e \sum_{\xi} \langle \Psi_{\xi} | \varrho^L \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \Psi_{\xi} \rangle \\ &= -e\Delta\omega \sum_{\xi} \left| \Psi_{\xi}^+(\mathbf{r}) \right|^2 \left(f'(h^0) [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}] \right)_{\xi\xi}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

⁸pour un système d'électrons sans interactions mutuelles.

⁹décrit la déviation de la densité de charge de sa valeur à l'équilibre.

Partant de (3.12), l'intégration sur l'énergie ε_ξ permet d'écrire sous forme plus appropriée

$$\begin{aligned} N(\mathbf{r}) &= \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] N(\varepsilon, \mathbf{r}) \\ &= \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^\varepsilon \left\{ \left| \overline{\Psi}_{a^+}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) \right|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a^+)(a^+)}^\varepsilon + \left| \overline{\Psi}_{a^-}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) \right|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a^-)(a^-)}^\varepsilon \right\}, \end{aligned} \quad (5.39)$$

où $\left| \overline{\Psi}_{a\sigma}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) \right|^2$ définit la probabilité de trouver après diffusion, la particule au point \mathbf{r} . $\overline{\Psi}_{a\sigma}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{L}{v_a}} \Psi_{a\sigma}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r})$ représentent les états de diffusion sortant renormalisés au flux unité (chapitre 2).

Par ailleurs, l'équation Thomas-Fermi locale¹⁰ permet de définir, pour une énergie ε , dans le régime stationnaire et en tous points de la structure, la densité de charge induite en terme du potentiel induit (self-consistant)¹¹, à travers :

$$N^{\text{ind}}(\varepsilon, \mathbf{r}) = e \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \omega(\mathbf{r}), \quad (5.40)$$

avec $\frac{\partial n}{\partial \varepsilon}$ représente le nombre d'états par unité d'énergie se propageant de gauche à droite dans un champ magnétique et en présence du désordre : $\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = \sum_a^\varepsilon \frac{\partial n_a}{\partial \varepsilon}$ avec $\frac{\partial n_a}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{hv_a}$ (voir chapitre 1).

Cependant, on montre à partir de considérations physiques rigoureuses (voir annexe G) que

$$N(\mathbf{r}) = N^{\text{ind}}(\mathbf{r}) = e \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \omega(\mathbf{r}), \quad (5.41)$$

puisque $N(\mathbf{r})$ (en un point \mathbf{r}), calculée à partir de l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer (5.39), représente réellement la densité induite à l'intérieur de la structure.

Ainsi, la densité de particules totale, à l'intérieur de la structure, est donnée par l'intégrale de cette dernière sur le volume (ici structure bi-dimensionnelle) considéré :

$$N = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \int d\mathbf{r} N(\varepsilon, \mathbf{r}), \quad \mathbf{r} = x, y. \quad (5.42)$$

¹⁰cette équation définit la limite semi-classique de la théorie Hartree. C'est en fait un calcul Hartree de la densité de charge induite en présence d'un champ self-consistant des ions (impuretés) en plus du gaz électronique [34].

¹¹au premier ordre en le potentiel induit $\omega(\mathbf{r})$, puisque nous le supposons assez faible pour que l'hypothèse linéaire soit justifiée.

Ici x est pris dans les régions asymptotiques droite ou gauche, et y est soit $0 < y \leq \frac{w}{2}$, soit $-\frac{w}{2} \leq y < 0$.

Ayant défini au préalable (sections précédentes) les potentiels induits près des bords dans chacune des quatre régions UL , LR , LL , et UR de la structure considérée, (5.41) intégrée sur la position \mathbf{r} , permet d'associer à chacun de ces potentiels une densité de particules correspondante telles que :

$$N^{UL} = \omega_{UL} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^\varepsilon \frac{e}{hv_a}, \quad (5.43a)$$

$$N^{LR} = \omega_{LR} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^\varepsilon \frac{e}{hv_a}, \quad (5.43b)$$

$$N^{LL} = \omega_{LL} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^\varepsilon \frac{e}{hv_a}, \quad (5.43c)$$

$$N^{UR} = \omega_{UR} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^\varepsilon \frac{e}{hv_a}. \quad (5.43d)$$

De la même manière, (5.39) explicitée proche des différents bords, permet de montrer que

$$N^{UL} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \int d\mathbf{r} \sum_a^\varepsilon \frac{1}{v_a} \left\{ |\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + |\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.44a)$$

$$N^{LR} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \int d\mathbf{r} \sum_a^\varepsilon \frac{1}{v_a} \left\{ |\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon LR}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + |\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon LR}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.44b)$$

$$N^{LL} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \int d\mathbf{r} \sum_a^\varepsilon \frac{1}{v_a} \left\{ |\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon LL}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + |\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon LL}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.44c)$$

$$N^{UR} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \int d\mathbf{r} \sum_a^\varepsilon \frac{1}{v_a} \left\{ |\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon UR}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + |\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon UR}(\mathbf{r})|^2 [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}. \quad (5.44d)$$

Reste maintenant à définir les états $\Psi_{a\sigma}^{UL}(\mathbf{r})$, $\Psi_{a\sigma}^{UR}(\mathbf{r})$, $\Psi_{a\sigma}^{LL}(\mathbf{r})$, et $\Psi_{a\sigma}^{LR}(\mathbf{r})$. Pour ce faire, nous nous proposons un modèle qui néglige les interférences entre les états de bords *up* et *low* [86, 109] mais considère la diffusion par effet tunnel.

5.7 Modèle

Sous l'effet du champ $B\hat{z}$ intense, nous supposons les états de bords localisés dans des régions séparées dans l'espace de sorte que la probabilité pour qu'ils interfèrent soit nulle¹². Entre autre, les états de bords qui se propagent à droite sont localisés au long du bord supérieur et ceux qui se propagent vers la gauche sont localisés au long du bord inférieur. Par suite, et contrairement à Büttiker [86] qui suppose que sous l'effet d'un champ magnétique intense le système total aura un aspect ordonné, nous considérons qu'une fois arrivés au niveau de l'échantillon désordonné, ces états seront scindés respectivement en des états transmis et d'autres réfléchis à cause du désordre¹³. Ainsi, l'état de diffusion qui sera produit par des ondes cohérentes est égal à la somme des ondes individuelles formées par les états de bords constituant la région considérée.

Conséquemment, dans notre modèle, à énergie fixe, les fonctions d'onde $\overline{\varphi}_{a+}^{\varepsilon}(\mathbf{r})$ et $\overline{\varphi}_{a-}^{\varepsilon}(\mathbf{r})$ correspondent aux états de diffusion entrant $\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r})$ et $\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon LR}(\mathbf{r})$ qui se propagent dans le sens (+) et (-), respectivement. Conséquemment, dans les sens de propagation inverses, les états résultants seront identiquement nuls : $\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon LR}(\mathbf{r}) = 0$ et $\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r}) = 0$.

En suivant ainsi ce raisonnement tout en faisant usage des définitions (3.18a-d) dans les

¹²Par définition deux ondes originaires de la même onde incidente interfèrent. Dans notre cas les interférences entre les différentes ondes en un point sont ignorées ; i.e il n'y a pas de cohérence entre les phases des régions opposées des edges states.

¹³En présence d'impuretés, les états de bords n'interfèrent pas. Ainsi, la probabilité de diffusion par effet tunnel entre états de bords de sens inverse à l'intérieur du même terminal est non nulle de même que la probabilité de réflexion par l'échantillon désordonné.

régions asymptotiques, nous montrons alors que

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r}) = \overline{\varphi}_{a+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \ll 0, \quad y > 0, \quad (5.45a)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon LR}(\mathbf{r}) = \overline{\varphi}_{a-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L, \quad y < 0, \quad (5.45b)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r}) = 0, \quad x \ll 0, \quad y < 0, \quad (5.45c)$$

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon LR}(\mathbf{r}) = 0, \quad x \gg L, \quad y > 0, \quad (5.45d)$$

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon UR}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} t_{ba}^L \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L, \quad y > 0, \quad (5.45e)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon UR}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} r_{ba}^R \overline{\varphi}_{b+}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \gg L, \quad y > 0, \quad (5.45f)$$

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon LL}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} r_{ba}^L \overline{\varphi}_{b-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \ll 0, \quad y < 0, \quad (5.45g)$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon LL}(\mathbf{r}) = \sum_b^{\varepsilon} t_{ba}^R \overline{\varphi}_{b-}^{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad x \ll 0, \quad y < 0. \quad (5.45h)$$

où $t_{ba}^{L(R)}$ et $r_{ba}^{L(R)}$ sont les coefficients de transmission et de réflexion du canal b dans le canal a dans les terminaux gauche et droit.

Ayant tous les ingrédients, il est alors possible de déterminer la densité de particules dans chacune des quatre régions de la structure. Considérons en premier la région gauche supérieure (UL). Dans ce cas, par substitution de (5.45a) et (5.45c) dans (5.44a), N^{UL} se réduit à

$$N^{UL} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^{\varepsilon} \frac{1}{v_a} \lim_{x \rightarrow -\infty} \int_0^{W/2} dy \left| \overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon UL}(\mathbf{r}) \right|^2 [\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^{\varepsilon}. \quad (5.46)$$

En reportant la définition (5.45a) dans cette dernière et après intégration sur la position y , il vient que

$$N^{UL} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a^{\varepsilon} \frac{1}{v_a} [\tilde{\mathbf{\Gamma}}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^{\varepsilon}. \quad (5.47)$$

En suivant la même démarche, nous déduisons que

$$N^{LR} = -\frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon, \quad (5.48a)$$

$$N^{LL} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left\{ [(\mathbf{r}^L)^+ \mathbf{r}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.48b)$$

$$N^{UR} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + [(\mathbf{r}^R)^+ \mathbf{r}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}. \quad (5.48c)$$

Enfin, ces résultats combinés avec (5.43a-c), nous permettent de montrer que

$$\omega_{UL} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{e}{hv_a} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon, \quad (5.49a)$$

$$\omega_{LR} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{e}{hv_a} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon, \quad (5.49b)$$

$$\omega_{LL} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{e}{hv_a} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left\{ [(\mathbf{r}^L)^+ \mathbf{r}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.49c)$$

$$\omega_{UR} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{e}{hv_a} = \frac{e}{h} (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon + [(\mathbf{r}^R)^+ \mathbf{r}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}, \quad (5.49d)$$

C'est ainsi, que la solution de ce système d'équations, nous permet de déduire la relation désirée entre le potentiel Hall défini à l'intérieur des terminaux parfaits et le potentiel de part et d'autre de l'échantillon désordonné :

$$\omega_{UL} - \omega_{LL} = \omega_{UR} - \omega_{LR} = (\omega_{UL} - \omega_{UR}) \left\{ \left(\int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \right)^{-1} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left([(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right) \right\}$$

Ce potentiel Hall n'est pas quantifié mais dépend de la densité d'états, des coefficients de transmission et réflexion ainsi que du champ magnétique par l'intermédiaire de tous ces coefficients.

Cette expression traduit la condition de la conservation du courant électrique dans un régime de Hall. Aussi, il est possible de déduire de ces équations et en accord avec le modèle adopté une autre condition :

$$\int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left[[(\mathbf{r}^L)^+ \mathbf{r}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{r}^R)^+ \mathbf{r}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right] = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a}. \quad (5.51)$$

5.8 Conductance Hall \mathcal{G}^{Hall}

Ayant tous les ingrédients, dans une structure de Hall à deux terminaux qui ignore les interférences, la conductance Hall définie par le rapport du courant (5.33) à la différence du potentiel électrochimique $\Delta\omega_\perp$ est donnée par¹⁴

$$\mathcal{G}^{Hall}(\varepsilon, \mathbf{B}) = 2 \frac{e^2}{h} \frac{\Delta\omega_\parallel}{\Delta\omega_\perp} \sum_a \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}. \quad (5.52)$$

En utilisant la condition (5.50), la conductance Hall $\mathcal{G}^{Hall}(\mathbf{B}) = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \mathcal{G}^{Hall}(\varepsilon, \mathbf{B})$ à température non nulle, est alors donnée par

$$\mathcal{G}^{Hall}(\mathbf{B}) = \frac{2e^2}{h} \frac{\int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}}{\int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \left\{ [(\mathbf{t}^L)^+ \mathbf{t}^L]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a+)(a+)}^\varepsilon - [(\mathbf{t}^R)^+ \mathbf{t}^R]_{aa} [\tilde{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}]_{(a-)(a-)}^\varepsilon \right\}}, \quad (5.53)$$

c'est-à-dire dépend des amplitudes de transmission et de réflexion et aussi de la densité d'état (inverse de la vitesse) [128]. Cette dépendance pourrait être à l'origine de la brisure de l'effet Hall intégral qui se produit entre plateaux [23, 129].

En suivant une recette proposée par Streda *et al* [109] ainsi que Haug *et al* [117], la somme de la résistance Hall (inverse de (5.53)) et la résistance longitudinale (inverse de (5.34) sommée sur toutes les énergies) doit définir la résistance Landauer-Büttiker (inverse de (3.62) qui demeure

¹⁴La mesure de la conductance de Hall se fait à l'intérieur des terminaux, en dehors de la région désordonnée.

vérifiée si le champ magnétique appliqué est intense). Autrement,

$$\mathcal{R}^{Hall} + \mathcal{R}^{long} = \mathcal{R}^1. \quad (5.54)$$

Néanmoins, cette identité semble ne pas être vérifiée à cause du facteur $\frac{1}{v_a}$ dans la définition de la conductance Hall (5.53). En revanche, elle est vérifiée à la limite où seul le plus bas niveau de Landau est occupé.

Pour la résolution d'un problème semblable, Haug *et al* [117] avaient prédit que la formule reliant les potentiels chimiques induits à l'intérieur des terminaux, indépendante des vitesses dans les canaux (contrairement à Streda *et al* [109]), est celle en accord avec les mesures expérimentales réalisées, notamment celles de von Klitzing-Ebert [113] et de Sypher-Stiles [114].

Si c'est le cas, dans notre alternative c'est la définition de l'équation Thomas-Fermi (5.40) qui a conduit à une relation entre les potentiels induits (5.50) dépendante des vitesses dans les canaux. C'est encore cette équation qui est à l'origine de la dérivation d'une formule BILP, (1.65), dépendante des vitesses.

Cependant, si dès le départ on avait supposé que l'équation Thomas-Fermi est vérifiée pour chaque canal, ce qui correspond à admettre que l'équilibre local établit dans chacune des quatre régions est le résultat d'une forte interaction entre les états de bords de même vitesse et se propageant dans la même direction, la magnétoconductance longitudinale (5.34) reste vérifiée alors que la conductance Hall se réduit à une formule indépendante des coefficients de transmission et réflexion :

$$\mathcal{G}^{Hall} = \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \mathcal{G}^{Hall}(\varepsilon, B) = \frac{2e^2}{h} N \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)]. \quad (5.55)$$

N définit le nombre de niveaux de Landau au-dessous de l'énergie de Fermi. Mais reste que pour ceci, nous devons d'abord montrer l'étendu et la fiabilité de cette supposition.

5.9 Discussion

En ignorant les interférences, nous dérivons dans ce chapitre les expressions quantitatives de la magnétoconductance longitudinale et de la conductance Hall dans une structure à deux

terminaux. Celles-ci sont exprimées en terme des coefficients de transmission et réflexion à énergie fixe ε . Nous montrons que la possibilité de trouver une conductance Hall non quantifiée avec une magnétoconductance longitudinale non nulle est bien probable. Ceci met en question la possibilité de la brisure de l'effet Hall quantique intégral.

Ce résultat est très encourageant car nous confirmons quantitativement les suggestions de Jain-Kivelson [120] en réponse aux critiques soulignées par Büttiker [118] concernant l'application de l'approche de Landauer. En effet, Jain-Kivelson [120, 111] ont montré, dans un cadre probabiliste, que la possibilité de trouver une conductance Hall \mathcal{G}^{Hall} non quantifiée avec une conductance longitudinale \mathcal{G}^{long} non nulle ou une \mathcal{G}^{Hall} non quantifiée mais cette fois-ci mesurée à travers la région désordonnée¹⁵, n'est pas exclue puisqu'elles ont été observées expérimentalement [117, 116].

En outre, pour définir les potentiels électrochimiques dans chacune des régions concernées, nous avons supposé qu'un équilibre local y est établi. Nous nous sommes reposés sur les arguments expérimentaux suscités au préalable bien que notre formulation exclue l'existence des terminaux de mesure. Nous montrons, en accord avec les suggestions de Büttiker [86] qui optait pour l'approche de Kubo, que cette mesure peut ne pas s'effectuer dans une région quantifiée. En revanche, la quantification du potentiel de Hall définit un simple cas particulier à cette théorie (voir plus loin).

En effet, à la limite où les états de bords (canaux) sont non corrélés, $|t_{ab}^{L(R)}|^2 = T_a \delta_{ab}$ et $|r_{ab}^{L(R)}|^2 = R_a \delta_{ab}$, les conductances Hall (5.53) et longitudinale (5.34) se réduisent à

$$\mathcal{G}^{Hall} = \frac{2e^2}{h} \frac{\int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{T_a}{R_a}}{\int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{1}{v_a} \frac{T_a}{R_a}}, \quad \text{et} \quad \mathcal{G}^{long} = \frac{2e^2}{h} \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \sum_a \frac{T_a}{R_a}, \quad (5.56)$$

de sorte que :

- A la limite où $T_a = R_a$, c'est-à-dire un canal est transmis et un canal est réfléchi, nous

¹⁵de part et d'autre de l'échantillon en terme de la différence de potentiel $\omega_{UL} - \omega_{LR}$.

montrons que

$$\mathcal{G}^{Hall} = \frac{2e^2}{h} N \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)], \quad \text{et} \quad \mathcal{G}^{long} = \frac{2e^2}{h} N \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)], \quad (5.57)$$

alors que le cas avec $T_a \neq R_a$ semble apporté une correction dépendante de T_a et R_a à chacune de ces conductances.

Autrement, on obtient une résistance \mathcal{R}^{Hall} quantifiée pour une \mathcal{R}^{long} non nulle ce qui est en accord avec les prédictions de Jain-Kivelson [110] et avec l'expérience [117, 116]. Mais (voir [16]) il est important de mentionner que des échantillons de tailles supérieures notamment à ce qu'on considère en régime mésoscopique, ont été utilisés. En revanche, nous montrons analytiquement que c'est encore valide dans un régime mésoscopique.

- A la limite où $T_a = 1$ et donc $R_a = 0$, c'est-à-dire à la limite balistique, le courant entraîné par les états de bords est non dissipatif et les conductances résultantes sont données par

$$\mathcal{G}^{Hall} = \frac{2e^2}{h} N \int d\varepsilon [-f'(\varepsilon)] \quad \text{et} \quad \mathcal{G}^{long} \rightarrow \infty. \quad (5.58)$$

La nullité de \mathcal{R}^{long} et la quantification de \mathcal{R}^{Hall} à température nulle correspond au cas où l'énergie de Fermi traverse la région du gap (voir spectre d'énergie, Fig. 4-10). En régime Hall, ce gap correspond aux plateaux.

- A la limite où $T_a = 0$ et donc $R_a = 1$, la résistance longitudinale est infinie et celle Hall est quantifiée.

Il est cependant important de souligner que toutes ces limites ont été prises sur les conductances et que les résistances s'y déduisent directement après inversion. Evidemment, il est impossible de procéder ici comme en théorie classique de Drude (section (1.4.1) dans chapitre 1) pour déterminer les résistances. La raison est simple : nous ne pouvons montrer que microscopiquement (dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire) que \mathcal{G}^{long} et \mathcal{G}^{Hall} constituent respectivement les parties diagonale et non diagonale de la conductance propre à la structure totale, et on ne sait pas si une telle écriture existe ou non.

Alternativement, si nous considérons le cas extrême avec la limite quantique $\hbar\omega_c \rightarrow \infty$, seul le plus bas niveau de Landau sera occupé de sorte que notre problème se réduira, mathéma-

tiquement, à un problème unidimensionnel. Dans cette limite

$$\mathcal{G}^{Hall} = 2\frac{e^2}{h} \int d\varepsilon[-f'(\varepsilon)] \quad \text{et} \quad \mathcal{G}^{long} = 2\frac{e^2}{h} \int d\varepsilon[-f'(\varepsilon)]\frac{T}{R}, \quad (5.59)$$

la conductance Hall est quantifiée et celle longitudinale est non nulle mais finie. Les conductances dans (5.58) constituent un cas particulier de (5.59) correspondant à considérer la limite balistique. En outre, nous déduisons que $\omega_{UL} = -\omega_{LR}$ et que $\omega_{LL} = -\omega_{UR}$.

Notons qu'en considérant cette limite, Streda *et al* [109] étaient les premiers à définir rigoureusement, mais heuristiquement, l'effet Hall quantique intégral dans l'approche de Landauer. Cette idée perfectionnée ultérieurement par Büttiker [86] afin de retrouver l'effet Hall quantique, lui permis d'admettre que sous l'effet d'un champ magnétique intense, la probabilité de réflexion des porteurs de charge par l'impureté est éliminée (chapitre 4).

Limite B faible ($\omega_c\tau < 1$)

Il est très important d'examiner le cas où le champ magnétique est nul ou faible. En effet, le graphe qui illustre l'effet Hall quantique intégral, Fig. 4-2, montre qu'à $B = 0$, la résistance (résistivité) Hall est nulle. Ceci peut facilement être déduit de notre calcul quantitatif. La nullité du champ magnétique conduit à une mixture des niveaux de Landau impliquant que $\omega_{UL} = \omega_{LL} = \omega_L$ et $\omega_{LR} = \omega_{UR} = \omega_R$, équation (5.13).

En revanche, le même graphe montre que pour des champs magnétiques faibles $B < 1$ Tesla, la résistance Hall est linéaire en B . Celle-ci est en bonne conformité avec les prédictions de la théorie semi-classique de Drude contrairement à celle longitudinale qui dépend de m^* , τ et v_F et dont on a souligné l'inconsistance (voir chapitre 1). Cependant, puisque B est faible, \mathcal{R}^{Hall} , étant proportionnelle, est supposée être négligeable classiquement mais nulle quantiquement car dans ce cas un grand nombre de niveaux de Landau sera impliqué dans la conduction ce qui empêchera l'apparition des plateaux.

Parallèlement, nous avons montré que l'expression de la conductance longitudinale demeure la même en présence d'un champ magnétique nul (3.82), faible (3.70) ou intense (5.34). Néanmoins, pour $B = 0$ elle est constante, pour B faible elle est oscillatoire ainsi que pour B intense, à la différence que pour des valeurs intenses de ce dernier, le nombre de niveaux de Landau se

réduit et les pics sont de plus en plus larges (la largeur des pics est de l'ordre de la racine carrée de B). Ce qui est en bon accord avec les mesures de Klaus von Klitzing *et al*, Fig. 4-2.

Invariance par renversement du champ magnétique

Enfin, après une comparaison des formules de la magnétoconductance longitudinale dérivée ici et celle dérivée dans le chapitre 3, nous déduisons aussi que la magnétoconductance longitudinale (5.34) est invariante par renversement du champ magnétique. Par contre, il nous est difficile de montrer à ce niveau l'invariance de la conductance Hall par renversement du champ magnétique pour de tels systèmes (voir [130]); une invariance qui n'a été démontrée que dans un système non confiné [122]. Cependant, si l'égalité (5.54) est vérifiée dans notre cas (elle l'est déjà dans la limite où seul le plus bas niveau de Landau est occupé), il serait alors possible de déduire que la résistance Hall est invariante par renversement du champ magnétique¹⁶.

5.10 Conclusion

Nous proposons un calcul analytique rigoureux de l'effet Hall quantique intégral pour une structure à deux terminaux, où les terminaux de mesure non invasifs des tensions aux bords sont fictifs, en utilisant l'opérateur densité dérivé dans le point de vue de Landauer.

En admettant dans le point de vue de Landauer que les états de Bords localisés dans les différentes régions, UL , LL , LR , UR , définissent un équilibre local lors de la mesure, nous montrons quantitativement que seul le système idéal définit l'effet Hall quantique entier. En revanche, en raison de la non homogénéité de l'échantillon mésoscopique, une différence de potentiel s'établit à travers la région désordonnée, de sorte que la conductance Hall résultante (5.53) semble ne pas être quantifiée mais plutôt dissipative. Autrement, nous arrivons à déduire que ceci met en évidence la brisure de l'effet Hall intégral ce qui est un fait tout à fait remarquable. Quant à la quantification, elle exige de considérer la limite balistique.

Par suite, nous avons montré qu'en faisant varier le champ magnétique appliqué, la magnétoconductance a réellement un comportement oscillatoire. Ceci est conforme avec les résultats de

¹⁶Büttiker insiste que \mathcal{R}^{Hall} n'est pas symétrique par renversement du champ magnétique puisque la conductance longitudinale ne l'est pas [86, 112], alors que nous montrons qu'elle l'est.

Klaus von Klitzing [19] dont le graphe montre que pour un filling factor $\nu = 1$, la résistance longitudinale n'est pas nulle, mais possède un minimum à cause de la non homogénéité de l'échantillon mésoscopique [127]. Par suite, en faisant varier le potentiel désordonné (concentration en désordre) en laissant le champ magnétique constant et vice versa, nous montrons que la magnétoconductance longitudinale est oscillatoire [23, 19].

Enfin, les formules retrouvées jusqu'ici semblent aussi être encourageantes puisqu'elles dépendent de l'énergie ε , et par suite de la température. Ceci est aussi conforme avec les travaux expérimentaux témoignant de l'effet de la température sur l'élargissement des plateaux Hall, la transition entre plateaux ainsi que les pics de la conductance longitudinale (Fig. 4-11) [1, 95, 94].

Conclusion générale et perspectives

Nous avons présenté dans cette thèse une nouvelle théorie consistante pour calculer l'opérateur densité statistique relatif aux systèmes mésoscopiques dans un régime stationnaire, caractérisé par l'écoulement d'un courant constant, et dans le point de vue de Landauer en présence d'un champ magnétique uniforme. L'importance de notre résultat tient au fait que l'opérateur densité est nécessaire pour le calcul des moyennes statistiques de toutes les grandeurs physiques mesurables. C'est la première fois qu'un tel résultat dans le cadre du point de vue de Landauer est obtenu de manière exacte.

Notre théorie tient compte de l'effet intégral de l'interaction des électrons avec les défauts dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire tout en tenant compte de la self-consistance, qui caractérise le transport cohérent.

L'approche que nous avons suivie pour modéliser le point de vue de Landauer dans une théorie de réponse linéaire consiste en l'incorporation du potentiel induit dans la structure dû à l'accumulation de la charge à l'intérieur des terminaux parfaits, dans l'Hamiltonien total du système. Ces potentiels sont évidemment différents des potentiels chimiques des réservoirs adjacents à cause des contacts.

Par application de la technique de projection au niveau de l'équation Von Neumann pour l'opérateur densité, nous avons montré, qu'en présence d'un champ magnétique uniforme une fois le régime stationnaire établi, les parties diagonale et non diagonale de l'opérateur densité sont toutes deux pertinentes. La partie diagonale doit être déterminée en premier à travers la résolution de l'équation maîtresse correspondante. Le résultat sera alors utilisé pour en déduire la partie non diagonale.

Nous avons surtout montré que l'effet des contacts doit être supprimé tout à fait au début

pour obtenir l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer. Nous avons non seulement atteint ce but, mais nous avons notamment pu déterminer au niveau de l'opérateur densité la différence essentielle entre les points de vue de Landauer et de Kubo tant débattue dans la littérature. Nous avons montré qu'il existe un terme de plus dans le point de vue de Landauer qui a été identifié comme responsable de la self-consistance et traduisant l'effet de l'exclusion des contacts. Par ailleurs, nous avons déduit que l'opérateur densité dans le point de vue de Kubo tient réellement compte de l'existence des contacts indépendamment de la mesure et par conséquent indépendamment du choix du potentiel (celui induit à l'intérieur des terminaux ou celui des réservoirs).

Par suite, les calculs ont alors été faits dans le cadre de la théorie de diffusion, dans le but de faire apparaître les coefficients de transmission et de réflexion et combinaison alors avec le formalisme de Landauer. C'est ainsi que nous avons pu obtenir une solution exacte, sans recourir à aucune approximation, à l'équation maîtresse pour la partie diagonale de l'opérateur densité pour un champ magnétique perpendiculaire au flux de courant.

L'opérateur densité global dans le point de vue de Landauer est alors trouvé comme la somme d'un terme du type Kubo et d'un terme additif résultant du traitement self-consistant. Il ressort que ce dernier devient négligeable pour des transmissions faibles (désordre fort) de sorte que les opérateurs densité dans les deux points de vue coïncident. Ceci est un fait tout à fait remarquable puisque nous obtenons davantage une condition attestant de la fiabilité de notre théorie et confirmons que l'opérateur densité qui a été utilisé dans la littérature pour dériver la formule Landauer-Büttiker est en fait du type Kubo. En outre, le courant reste constant dans les deux points de vue contrairement aux potentiels mesurés.

Pour une bonne illustration de ce fameux résultat, nous avons choisie de déterminer l'expression de la conductance en présence d'un champ magnétique de faible intensité. Nous avons tout d'abord étudié le cas où le champ est suffisamment faible pour qu'on puisse considérer que les niveaux de Landau se mélangent entre eux de sorte que les potentiels induits dans les régions asymptotiques sont des quantités moyennées. Nous avons alors obtenu une formule de magnétoconductance généralisée à plusieurs canaux à partir de la théorie de la réponse linéaire, explicitement indépendante des vitesses.

La généralité de la formule obtenue est illustrée par le fait que d'une part elle ne souffre

d'aucune inconsistance et d'autre part, elle demeure vérifiée même en l'absence du champ magnétique généralisant ainsi les formules proposées dans la littérature. La formule de Landauer originale est obtenue en considérant le cas où les canaux de propagation sont non corrélés.

Enfin, nous avons considéré notre théorie vis-à-vis de l'effet Hall quantique, sachant que jusqu'ici ce phénomène n'a pas été abordé par un calcul microscopique rigoureux. En allant à la limite d'un champ intense, nous avons admis que les états de Landau sont des états de bords qui se séparent dans l'espace et se propagent dans des directions opposées. Ceci, nous a permis de définir les différents potentiels induits dans les quatre coins des terminaux au moyen d'un modèle qui concrétise les situations expérimentales réelles.

Partant du fait que les interférences entre états de bords sont négligeables, notre modèle admet l'existence du processus de retour par effet tunnel entre ceux-là, à cause du désordre. Par la suite, nous avons dérivé les expressions générales de la magnétoconductance longitudinale et de celle Hall, respectivement. L'importance des résultats obtenus réside dans le fait qu'ils dépendent des coefficients de transmission et réflexion de l'échantillon mésoscopique (régime diffusif) et décrivent la variation des deux conductances en fonction du champ magnétique appliqué ainsi que du désordre. En effet, la formule de la magnétoconductance longitudinale montre l'existence d'oscillations du type *Shubnikov-De Haas*, quant à la conductance Hall elle varie continuellement mais de façon non monotone. A température nulle la variation de cette dernière est du type marche-contre marche. A la limite d'un champ magnétique très faible, la conductance longitudinale coïncide avec la magnétoconductance calculée directement et la conductance Hall s'annule.

En particulier, nous avons retrouvé l'effet Hall quantique intégral (conductance longitudinale nulle et conductance Hall quantifiée) correspondant au cas où le transport est non dissipatif (régime balistique), et nous avons mis évidence la brisure de celui-ci.

Nos perspectives sur le sujet sont aussi nombreuses que variées. Comme premier objectif, nous estimons suivre les suggestions de Baranger¹⁷ et appliquer l'opérateur densité dans le point de vue de Landauer au calcul d'autres observables, notamment le bruit (shot noise) en raison de son importance dans l'utilisation des systèmes conçus de nos jours. Dans le même contexte,

¹⁷Lors de sa rencontre à l'école de physique mésoscopique quantique à Aussois aux Alpes de France en octobre 2005.

nous comptons généraliser la formule de l'opérateur densité au cas d'une structure mésoscopique à plusieurs terminaux. Ceci nous permettra d'étudier une structure beaucoup plus réaliste.

En second objectif, on sait que peu après la découverte de l'effet Hall quantique, des plateaux dans la résistance Hall étaient observés à des facteurs de remplissage fractionnaires. Ce phénomène est appelé effet Hall quantique Fractionnaire [106]. Une idée récente dite des *Composite Fermions* a permis de connecter l'effet Hall quantique fractionnaire à l'effet Hall quantique intégral et d'expliquer sur la base de ce dernier plusieurs de ses propriétés [131, 132]. Ainsi, en raison du développement de la théorie de l'effet Hall quantique intégral souligné dans cette thèse, nous comptons étendre le calcul pour explorer l'effet Hall fractionnaire.

Un autre sujet d'actualité que nous voudrions étudier consiste en l'introduction des effets liés au spin dans le régime Hall quantique. Ce nouveau phénomène est connu sous le nom de "*The spin quantum Hall effect*". Cet effet se manifeste par un terme décrivant l'interaction spin-orbite [57, 133], notamment le terme "*Rashba spin-split*" [134], au niveau de l'Hamiltonien total¹⁸.

¹⁸L'effet Zeemann est négligeable dans un champ magnétique intense.

Annexe A

Propriétés du superopérateur collisionnel Λ

A.1 Superopérateurs

Avant de donner les propriétés fondamentales du superopérateur collisionnel Λ il convient tout d'abord d'énoncer quelques propriétés communes des superopérateurs linéaires.

Definition 1 *Un superopérateur linéaire \mathcal{U} de \mathcal{D} vers \mathcal{D}' est par définition un objet qui agit sur une partie \mathcal{D} de l'espace de Liouville et transforme tout opérateur A de \mathcal{D} en un autre opérateur B dans \mathcal{D}' ,*

$$B = \mathcal{U}A. \quad (\text{A.1})$$

Un superopérateur peut être représenté dans une base quelconque par une représentation tétradique. Puisque les opérateurs usuels ont une représentation diadique et comme \mathcal{U} est linéaire, alors l'élément de matrice B_{ij} est relié aux éléments A_{kl} par

$$B_{ij} = \sum_{kl} \mathcal{U}_{ij|kl} A_{kl}. \quad (\text{A.2})$$

En ce qui nous concerne, des exemples concrets de superopérateurs ont été donnés dans le chapitre 2 : les superopérateurs de projection \mathcal{P} , \mathcal{Q} , et les superopérateurs de Liouville \mathcal{L}^0 , \mathcal{L}^1

et \mathcal{L} . En effet, sachant que

$$\mathcal{L}X = \frac{1}{\hbar} [h, X] = \frac{1}{\hbar} (hX - Xh), \quad (\text{A.3})$$

tel que X est un opérateur linéaire agissant sur l'espace de Hilbert, l'élément de matrice du commutateur dans la base $\{|\Psi_\alpha\rangle\}$ s'écrit :

$$(hX - Xh)_{ij} = \sum_{\alpha\beta} (h_{i\alpha}\delta_{j\beta} - h_{j\beta}\delta_{i\alpha})X_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.4})$$

Ainsi \mathcal{L} en représentation tétradique est donné par :

$$\mathcal{L}_{ij|\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar} (h_{i\alpha}\delta_{j\beta} - h_{j\beta}\delta_{i\alpha}). \quad (\text{A.5})$$

Dans la base des états propre de h , avec $h_{i\alpha} = \varepsilon_i\delta_{i\alpha}$, $\mathcal{L}_{ij|\alpha\beta}$ se met sous la forme

$$\mathcal{L}_{ij|\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)\delta_{j\beta}\delta_{i\alpha}. \quad (\text{A.6})$$

Par itération, on montre aussi [18] pour toute fonction $f(\mathcal{L})$:

$$[f(\mathcal{L})]_{ij|\alpha\beta} = f\left(\frac{1}{\hbar}(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)\right)\delta_{j\beta}\delta_{i\alpha}. \quad (\text{A.7})$$

Parmi leurs propriétés, le produit de deux superopérateurs ou plus est à nouveau un superopérateur ; exemple le superopérateur Master \mathbf{A} défini par (2.34).

Definition 2 On définit le superopérateur adjoint de \mathcal{U} et on le dénote \mathcal{U}^+ par

$$\text{Tr } C\mathcal{U}A = \text{Tr } A\mathcal{U}^+C, \quad (\text{A.8})$$

où A et C sont deux opérateurs arbitraires appartenant au domaine de définition de \mathcal{U} .

En utilisant cette définition et la propriété cyclique de la trace, on montre que les superopérateurs de projection sont auto-adjoints

$$\mathcal{P}^+ = \mathcal{P} \text{ et } \mathcal{Q}^+ = \mathcal{Q}. \quad (\text{A.9})$$

De plus, on montre à partir de leurs définitions que les Liouvilliens $\mathcal{L}^0, \mathcal{L}^1$ et par conséquent \mathcal{L} sont anti-autoadjoints, c'est-à-dire que leurs adjoints sont donnés par les mêmes superopérateurs affectés du signe $-$,

$$(\mathcal{L}^0)^+ = -\mathcal{L}^0, \quad (\mathcal{L}^1)^+ = -\mathcal{L}^1, \quad \mathcal{L}^+ = -\mathcal{L}. \quad (\text{A.10})$$

On vérifie facilement que

$$(\mathcal{U}_1 \mathcal{U}_2 \cdots \mathcal{U}_n)^+ = \mathcal{U}_n^+ \mathcal{U}_{n-1}^+ \cdots \mathcal{U}_1^+. \quad (\text{A.11})$$

A.2 Superopérateur Master

Dans cet annexe faisons le point sur quelques propriétés intéressantes du superopérateur collisionnel $\mathbf{\Lambda}$, (2.34), qui ont été admises et utilisées dans les chapitres 2 et 3.

La présence de \mathcal{P} à gauche lui confère la propriété de transformer un opérateur quelconque en un autre opérateur diagonal dans la base propre de h^0 . Par ailleurs, le \mathcal{P} à droite signifie que l'action de $\mathbf{\Lambda}$ sur n'importe quel opérateur nondiagonal dans la base de h^0 donne l'opérateur nul. Nous avons déjà montré dans le chapitre 2, que l'action de $\mathbf{\Lambda}$ sur un opérateur D donne un opérateur diagonal dont les éléments dépendent des taux de transition et des éléments diagonaux de D . En effet,

$$\mathbf{\Lambda}D = \sum_{\xi\alpha} |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi | W_{\xi\alpha} (D_{\xi\xi} - D_{\alpha\alpha}), \quad (\text{A.12})$$

où $W_{\xi\alpha}$ définit le taux exact de transition entre les états $|\varphi_\xi\rangle$ et $|\varphi_\alpha\rangle$, donné par

$$W_{\xi\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\langle \varphi_\xi | V | \Psi_\alpha^+ \rangle|^2. \quad (\text{A.13})$$

• A partir des propriétés précédentes, il en découle d'autres ayant un intérêt technique et qui sont utilisées souvent dans les calculs. En particulier, si $f(h^0)$ est une fonction quelconque de l'opérateur h^0 , et notamment la fonction de distribution, on a

$$\mathbf{\Lambda}f(h^0)D = f(h^0)\mathbf{\Lambda}D, \quad (\text{A.14})$$

où D est un opérateur arbitraire. Cette relation est facilement vérifiée en partant des relations

(A.12) et (A.13). En effet, en remplaçant dans (A.12), D par $f(h^0)D$ et compte tenu de la présence de la fonction δ de Dirac, on peut écrire

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Lambda} [f(h^0)D] &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\xi, \alpha} |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| f(\varepsilon_\xi) \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\mathbb{T}_{\xi\alpha}|^2 (D_{\xi\xi} - D_{\alpha\alpha}), \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} f(h^0) \sum_{\xi, \alpha} |\varphi_\xi\rangle \langle \varphi_\xi| \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\mathbb{T}_{\xi\alpha}|^2 (D_{\xi\xi} - D_{\alpha\alpha}) \\
&= f(h^0) \mathbf{\Lambda} D.
\end{aligned} \tag{A.15}$$

Cette propriété peut être aussi généralisée pour toute fonction $F(\mathbf{\Lambda})$, agissant sur un opérateur M particulier défini comme le produit de deux opérateurs A et C où A est un opérateur diagonal avec $A_{\xi\xi} \equiv A(\varepsilon_\xi)$ et C est un opérateur diagonal arbitraire tel que : $M_{\xi\xi} = A(\varepsilon_\xi)C_{\xi\xi}$. Dans ce cas, on écrit

$$F(\mathbf{\Lambda})AC = AF(\mathbf{\Lambda})C. \tag{A.16}$$

- *Adjoint de $\mathbf{\Lambda}$*

En se servant de la définition (2.34) et de la propriété (A.11), l'adjoint de $\mathbf{\Lambda}$ s'écrit

$$\mathbf{\Lambda}^+ = \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathcal{P} \mathcal{L}^1 \frac{1}{s - i\mathcal{L}} \mathcal{L}^1 \mathcal{P}. \tag{A.17}$$

$\mathbf{\Lambda}^+$ correspond à un temps asymptotiquement négatif. Ainsi, pour évaluer sa représentation tétradique nous avons à suivre les mêmes étapes que celles utilisées pour $\mathbf{\Lambda}$ mais en remplaçant l'état de diffusion sortant par l'état de diffusion entrant :

$$(\mathbf{\Lambda}^\dagger)_{\alpha\alpha/\zeta\zeta} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\xi} \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\langle \varphi_\xi | V | \Psi_\alpha^- \rangle|^2 [\delta_{\zeta\alpha} - \delta_{\xi\zeta}]. \tag{A.18}$$

- *$\mathbf{\Lambda}$ défini semi-positif*

Une propriété importante de $\mathbf{\Lambda}$ découle du fait qu'il est défini semi-positif. Ceci veut dire que toutes ses valeurs propres sont positives ou nulles.

En effet, à partir des relations (A.12) et (A.13), on montre en premier lieu que tout opérateur diagonal X tel que ses éléments de matrice diagonaux dans la base propre de h^0 dépendent uniquement de l'énergie de l'état, i.e. $X_{\xi\xi} = X(\varepsilon_\xi)$, est un opérateur propre de $\mathbf{\Lambda}$ avec la valeur

propre 0¹. En effet, on montre à partir de la propriété (A.16), que :

$$\text{Tr} X \mathbf{\Lambda} X = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{\xi\alpha} \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\mathbb{T}_{\xi\alpha}|^2 (X_{\xi\xi} - X_{\alpha\alpha})^2 = 0, \quad (\text{A.19})$$

si $X_{\xi\xi} = X(\varepsilon_\xi)$.

Cependant, dans le cas général cette égalité n'est pas évidente puisque l'opérateur X dépend, en plus de l'énergie, de l'indice du canal et de la direction de propagation. Sachant que l'opérateur vitesse v est positif, dire à partir de (3.41) que $\mathbf{\Lambda}$ est défini semi-positif est équivalent à dire que $\mathbf{\Gamma}$ est défini semi-positif. Ainsi, nous nous limiterons dans ce qui suit à étudier la semi-positivité de $\mathbf{\Gamma}$ pour être en bonne conformité avec les calculs et résultats présentés dans les différents chapitres 2, 3 et 5, de même que les prochains annexes.

- Si $\mathbf{\Gamma}$ est défini semi-positif (annexe B), sa forme quadratique

$$q = X^t \mathbf{\Gamma} X, \quad (\text{A.20})$$

est aussi définie semi-positive [135]. X est un vecteur quelconque et $\mathbf{\Gamma}$ est défini par sa représentation tétradratique (3.40). A énergie fixe on écrit

$$\begin{aligned} X^t \mathbf{\Gamma} X &= \sum_{ab}^\varepsilon \sum_{\sigma\sigma'} X_{(a\sigma)}^\varepsilon [\mathbf{\Gamma}]_{(a\sigma)|(b\sigma')}^\varepsilon X_{(b\sigma')}^\varepsilon \\ &= \sum_{ab}^\varepsilon \Gamma_{a+|b+}^\varepsilon x_{a+} x_{b+} + \Gamma_{a+|b-}^\varepsilon x_{a-} x_{b-} + \Gamma_{a-|b+}^\varepsilon x_{a-} x_{b+} + \Gamma_{a-|b-}^\varepsilon x_{a-} x_{b-}, \quad (\text{A.21}) \end{aligned}$$

où $|X\rangle = \begin{pmatrix} X_{(a+)} \\ X_{(a-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{1+} \\ \vdots \\ x_{n+} \\ x_{1-} \\ \vdots \\ x_{n-} \end{pmatrix}$ et a est l'indice du canal ($a = 1 - n$).

Par substitution des éléments de matrice de $\mathbf{\Gamma}$, (3.40), (A.21) s'écrit ainsi en terme des

¹Par conséquent, il est possible de définir l'inverse de $\mathbf{\Lambda}$ dans un domaine excluant tous les opérateurs correspondants à la valeur propre 0.

coefficients de transmission et de réflexion comme

$$X^t \mathbf{\Gamma} X = \sum_{ab}^{\varepsilon} (\delta_{ab} - |t_{ab}^L|^2) x_{a+} x_{b+} - |r_{ab}^R|^2 x_{a+} x_{b-} - |r_{ab}^L|^2 x_{a-} x_{b+} + (\delta_{ab} - |t_{ab}^R|^2) x_{a-} x_{b-}, \quad (\text{A.22})$$

Cependant, sous cette forme il nous est impossible de montrer la propriété de semi-positivité. Pour ce faire nous allons essayer de transformer cette équation pour l'adapter aux calculs qui suivront. En adoptant la technique de Lagrange [136] (consiste à compléter des termes carrés), (A.22) se met sous la forme

$$\begin{aligned} X^t \mathbf{\Gamma} X &= \sum_{ab}^{\varepsilon} \delta_{ab} (x_{a+} x_{b+} + x_{a-} x_{b-}) + \frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ -2 |t_{ab}^L|^2 x_{a+} x_{b+} - 2 |r_{ab}^R|^2 x_{a+} x_{b-} \right. \\ &\quad \left. - 2 |r_{ab}^L|^2 x_{a-} x_{b+} - 2 |t_{ab}^R|^2 x_{a-} x_{b-} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

En ajustant et retranchant le terme

$$K = \frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} |t_{ab}^L|^2 (x_{a+}^2 + x_{b+}^2) + |r_{ab}^R|^2 (x_{a+}^2 + x_{b-}^2) + |r_{ab}^L|^2 (x_{a-}^2 + x_{b+}^2) + |t_{ab}^R|^2 (x_{a-}^2 + x_{b-}^2), \quad (\text{A.24})$$

il vient que (A.23) s'écrit

$$\begin{aligned} X^t \mathbf{\Gamma} X &= \sum_{ab}^{\varepsilon} \delta_{ab} (x_{a+} x_{b+} + x_{a-} x_{b-}) + \frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ |t_{ab}^L|^2 (x_{a+} - x_{b+})^2 + |r_{ab}^R|^2 (x_{a+} - x_{b-})^2 \right. \\ &\quad \left. + |r_{ab}^L|^2 (x_{a-} - x_{b+})^2 + |t_{ab}^R|^2 (x_{a-} - x_{b-})^2 \right\} - K. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Par ailleurs, en sommant le premier terme dans (A.25) avec K , il en découle

$$\begin{aligned} \sum_{ab}^{\varepsilon} \delta_{ab} (x_{a+} x_{b+} + x_{a-} x_{b-}) - K &= -\frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ -\delta_{ab} (x_{a+} x_{b+} + x_{a-} x_{b-}) + x_{a+}^2 (|t_{ab}^L|^2 + |r_{ab}^R|^2) + x_{a-}^2 \right. \\ &\quad \left. (|t_{ab}^R|^2 + |r_{ab}^L|^2) + x_{b+}^2 (|t_{ab}^L|^2 + |r_{ab}^L|^2) + x_{b-}^2 (|t_{ab}^R|^2 + |r_{ab}^R|^2) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

En utilisant la propriété de la fonction de Dirac et des contraintes liées à la conservation du

courant, (3.25a-c) et (3.26a-f), on montre que

$$\begin{aligned}
\sum_{ab}^{\varepsilon} \delta_{ab}(x_{a+}x_{b+} + x_{a-}x_{b-}) - K &= -\frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} -\delta_{ab}(x_{a+}x_{b+} + x_{a-}x_{b-}) + \delta_{ab}(x_{a+}^2 + x_{a-}^2 + x_{b+}^2 + x_{b-}^2) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} \delta_{ab}[(x_{a+} - x_{b+})^2 + (x_{a-} - x_{b-})^2] \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{A.27}$$

De ce fait,

$$X^t \mathbf{\Gamma} X = \frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} |t_{ab}^L|^2 (x_{a+} - x_{b+})^2 + |r_{ab}^R|^2 (x_{a+} - x_{b-})^2 + |r_{ab}^L|^2 (x_{a-} - x_{b+})^2 + |t_{ab}^R|^2 (x_{a-} - x_{b-})^2, \tag{A.28}$$

est une quantité positive. Mais comme $\mathbf{\Gamma}$ est singulier, en faisant usage des contraintes (3.25a-c) et (3.26a-f), en relation avec (A.28) il s'en suit que $\mathbf{\Gamma}$ est défini semi-positif.

Soulignons que (A.28) peut se mettre sous une forme plus appropriée comme

$$\begin{aligned}
X^t \mathbf{\Gamma} X &= -\frac{1}{2} \sum_{ab}^{\varepsilon} \left\{ (\delta_{ab} - |t_{ab}^L|^2)(x_{a+} - x_{b+})^2 - |r_{ab}^R|^2 (x_{a+} - x_{b-})^2 - |r_{ab}^L|^2 (x_{a-} - x_{b+})^2 \right. \\
&\quad \left. + (\delta_{ab} - |t_{ab}^R|^2)(x_{a-} - x_{b-})^2 \right\} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{a\sigma}^{\varepsilon} \sum_{b\sigma'}^{\varepsilon} \Gamma_{(a\sigma)|(b\sigma')}^{\varepsilon} (X_{a\sigma}^{\varepsilon} - X_{b\sigma'}^{\varepsilon})^2,
\end{aligned} \tag{A.29}$$

quelque soit X .

Annexe B

Solutions de $\Gamma X = 0$

En raison des contraintes physiques (3.24), la matrice Γ est singulière : $\det \Gamma = 0$.

Pour déterminer les vecteurs propres de Γ correspondants à la valeur propre 0, nous avons à résoudre l'équation

$$\Gamma X = 0. \quad (\text{B.1})$$

Cependant, comme Γ est défini semi-positif (annexe A), la solution de (B.1) est équivalente à la résolution de

$$X^t \Gamma X = 0. \quad (\text{B.2})$$

Par ailleurs, nous avons à déterminer les composantes du vecteur propre $|X\rangle$ correspondant à la valeur propre zéro solution de (B.2) qui combinée avec (3.40) nous permet d'avoir

$$\sum_{ab}^{\varepsilon} |t_{ab}^L|^2 (x_{a+} - x_{b+})^2 + |r_{ab}^R|^2 (x_{a+} - x_{b-})^2 + |r_{ab}^L|^2 (x_{a-} - x_{b+})^2 + |t_{ab}^R|^2 (x_{a-} - x_{b-})^2 = 0. \quad (\text{B.3})$$

Comme les contraintes de la conservation du courant liées à l'unitarité de la matrice S assurent que les coefficients de transmission et de réflexion ne peuvent s'annuler en même temps, il conviendrait ici d'étudier surtout les cas où les canaux de conduction sont corrélés et non corrélés.

- **Canaux corrélés** : On dit que les canaux sont corrélés si la réflexion (dans des canaux différents) par l'échantillon est non nulle. En outre, du fait que le désordre est faible (régime diffusif), nous admettrons dans ce cas que même la transmission est non nulle (la nullité de

cette dernière représente un cas limite correspondant au régime isolant). Dans ce cas, tous les coefficients de transmission et réflexion sont non nuls $t_{ab}^L \neq 0$, $r_{ab}^L \neq 0$ quelque soit a et b . Conséquemment, $|X_1\rangle$ vecteur propre de $\mathbf{\Gamma}$ doit vérifier

$$x_{a+} - x_{b+} = x_{a-} - x_{b-} = x_{a+} - x_{b-} = x_{a-} - x_{b+} = 0, \quad \forall a, b \quad (\text{B.4a})$$

et donc doit vérifier

$$x_{a+} = x_{b+} = x_{a-} = x_{b-} \quad \forall a, b. \quad (\text{B.5})$$

En représentation vectorielle, $|X_1\rangle$ vecteur à $2n$ composantes s'écrit

$$|X_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ i \\ 1 \\ \vdots \\ i \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Ainsi, (B.6) est vecteur propre de $\mathbf{\Gamma}$ avec la valeur propre $\lambda = 0$; $\frac{1}{\sqrt{2n}}$ définit la constante de normalisation.

• **Canaux non-corrélés** : Dans ce cas $|t_{ab}^{L(R)}|^2 = T_a \delta_{ab}$ et $|r_{ab}^{L(R)}|^2 = R_a \delta_{ab}$. Par substitution de ces coefficients dans (B.3), sachant que $\sum_{ab}^{\varepsilon} \delta_{ab} f(b) = \sum_a^{\varepsilon} f(a)$, il vient que

$$\sum_a^{\varepsilon} R_a (x_{a+} - x_{a-})^2 = 0 \implies x_{a+} = x_{a-} \quad \forall a. \quad (\text{B.7})$$

Ainsi, $|X'\rangle$ solution de (B.1) est donné par la combinaison linéaire des vecteurs linéairement indépendants :

$$\begin{aligned} |X'_1\rangle^t &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \ 0 \ \dots \ 0 \mid 1 \ 0 \ \dots \ 0 \right), \\ |X'_2\rangle^t &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(0 \ 1 \ 0 \ \dots \mid 0 \ 1 \ 0 \ \dots \right), \\ &\vdots \\ |X'_n\rangle^t &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(0 \ \dots \ 0 \ 1 \mid 0 \ \dots \ 0 \ 1 \right), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Ces vecteurs constituent, d'autre part, des solutions propres indépendantes de (B.1) pour la

valeur propre $\lambda = 0$. Ici $m = n$, c'est à dire que $\lambda = 0$ est n -fois dégénérée.

Annexe C

Inverse de Γ

En combinant les équations (3.10), (3.31) avec (3.41), on montre qu'à énergie ε , ϱ_d^L vérifie

$$\Gamma \varrho_d^L = -\Delta w f'(\varepsilon) \Pi^-, \quad (\text{C.1})$$

puisque l'opérateur vitesse v est représenté par une matrice diagonale. En représentation vectorielle, (C.1) s'écrit dans la base canonique comme

$$\Gamma |\varrho_d^L\rangle = -\Delta w f'(\varepsilon) |\Pi^-\rangle. \quad (\text{C.2})$$

Il est évident que pour déterminer $|\varrho_d^L\rangle$ solution de (C.2), nous avons à déterminer l'inverse de la matrice Γ ($2n \times 2n$) définie par (3.40) qui est en fait non inversible. La singularité de la matrice (superopérateur) Γ dérive des contraintes de conservation du courant où la somme des éléments de matrice de chaque ligne et de chaque colonne est égale à zéro. Pour ce faire considérons tout d'abord les cas suscités dans l'annexe précédent :

- **Canaux corrélés** : Dans le cas corrélé (voir annexe B)

$$|X_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ \frac{1}{2} \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.3})$$

est vecteur propre de Γ à droite et à gauche avec la valeur propre non-dégénérée $\lambda = 0$.

Mathématiquement, ceci se traduit par

$$\mathbf{\Gamma}|X_1\rangle = 0, \quad \text{et} \quad \langle X_1|\mathbf{\Gamma} = 0. \quad (\text{C.4})$$

La première propriété explique que si $|\varrho_d^L\rangle$ est solution de (C.2), alors $(|\varrho_d^L\rangle \pm |X_1\rangle)$ est aussi solution de (C.2). Autrement dit, il y a une grande famille de solutions de (C.2) qui sont différentes de $|\varrho_d^L\rangle$ par un multiple du vecteur $|X_1\rangle$. Cependant, en multipliant à gauche (C.2) par le vecteur $\langle X_1|$, la seconde propriété de (C.4) permet de montrer que

$$-\Delta w f'(\varepsilon) \langle X_1|\mathbf{\Pi}^- \rangle = \langle X_1|\mathbf{\Gamma}|\varrho_d^L\rangle = 0, \quad (\text{C.5})$$

et par conséquent

$$\langle X_1|\mathbf{\Pi}^- \rangle = 0. \quad (\text{C.6})$$

Ainsi, on admet que $\mathbf{\Gamma}$ s'écrit en représentation spectrale comme

$$\mathbf{\Gamma} = 0 |X_1\rangle \langle X_1| + \sum_{i=2}^{2n} \gamma_i |X_{\gamma_i}\rangle \langle X_{\gamma_i}|, \quad (\text{C.7})$$

avec $|X_{\gamma_i}\rangle$ sont les vecteurs propres de $\mathbf{\Gamma}$ correspondant aux valeurs propres non nuls γ_i ($i = 1 - 2n$); ils sont supposés être orthonormés.

De là, $\mathbf{\Gamma}$ singulière dans l'espace total à $2n$ -dimensions, est inversible dans le sous espace perpendiculaire à $|X_1\rangle$ de dimension $(2n - 1)$. En sus, (C.2) qui s'écrit comme

$$\sum_{i=2}^{2n} \gamma_i |X_{\gamma_i}\rangle \langle X_{\gamma_i}| \varrho_d^L \rangle = -\Delta w f'(\varepsilon) |\mathbf{\Pi}^- \rangle, \quad (\text{C.8})$$

a pour solution

$$|\varrho_d^L\rangle = -\Delta w f'(\varepsilon) \sum_{i=2}^{2n} \frac{1}{\gamma_i} |X_{\gamma_i}\rangle \langle X_{\gamma_i}|\mathbf{\Pi}^- \rangle. \quad (\text{C.9})$$

En tenant compte de (C.6), on montre que (C.9) demeure vérifiée même si l'on ajuste un terme

en $\alpha' |X_1\rangle \langle X_1| \mathbf{\Pi}^-$ à sa droite :

$$|\varrho_d^L\rangle = -\Delta w f'(\varepsilon) \sum_{i=2}^{2n} \left[\frac{1}{\gamma_i} |X_{\gamma_i}\rangle \langle X_{\gamma_i}| - \alpha' |X_1\rangle \langle X_1| \right] |\mathbf{\Pi}^- \rangle, \quad (\text{C.10})$$

où α' est une constante non nulle. La matrice entre accolades peut être considérée comme l'inverse de la matrice $\tilde{\mathbf{\Gamma}}$ ($2n$ -dimensions), donnée par

$$\tilde{\mathbf{\Gamma}} = \sum_{i=2}^{2n} \gamma_i |X_{\gamma_i}\rangle \langle X_{\gamma_i}| - \alpha |X_1\rangle \langle X_1|. \quad (\text{C.11})$$

$\tilde{\mathbf{\Gamma}}$ peut être mis encore sous forme plus compacte, comme

$$\tilde{\mathbf{\Gamma}} = \mathbf{\Gamma} - \alpha |X_1\rangle \langle X_1| = \mathbf{\Gamma} - \alpha \mathbf{\Sigma}, \quad (\text{C.12})$$

avec $\mathbf{\Sigma}$ est la matrice ($2n \times 2n$) dont les éléments sont tous égaux à 1 ($(\mathbf{\Sigma})_{ij} = 1$) et $\tilde{\mathbf{\Gamma}}$ est défini positif. De là, on déduit que (C.10) définit la solution qu'on devrait obtenir si dès le départ on avait

$$\tilde{\mathbf{\Gamma}} |\varrho_d^L\rangle = -\Delta w f'(\varepsilon) |\mathbf{\Pi}^- \rangle, \quad (\text{C.13})$$

ou

$$\tilde{\mathbf{\Lambda}} |\varrho_d^L\rangle = -\frac{\Delta w}{e} f'(\varepsilon) |i^- \rangle. \quad (\text{C.14})$$

• **Canaux non corrélés** : En suivant la même démarche, nous montrons que dans ce cas $\tilde{\mathbf{\Gamma}}$ est donnée par

$$\tilde{\mathbf{\Gamma}} = \mathbf{\Gamma} - \alpha \sum_{m=1}^n |X'_m\rangle \langle X'_m|, \quad (\text{C.15})$$

où $|X'_m\rangle$ sont définis par (B.8). En représentation matricielle $\tilde{\mathbf{\Gamma}}$ s'écrit

$$\tilde{\mathbf{\Gamma}} = \mathbf{\Gamma} - \alpha \begin{pmatrix} [1]_{n \times n} & [1]_{n \times n} \\ & \\ & \\ [1]_{n \times n} & [1]_{n \times n} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.16})$$

avec $[1]_{n \times n}$ est la matrice unité d'ordre n .

Annexe D

Conservation du courant

Par souci de clarté du paragraphe (3.3), nous nous limiterons dans cet annexe à vérifier que le courant est conservé en régime stationnaire et déduire ainsi la condition de conservation (sur les fonctions d'ondes) correspondante.

Partant de la relation de la divergence de la densité de courant dans la base de \hbar^0 ou \hbar , pour une énergie fixe, les éléments de matrice du vecteur densité de courant vérifient

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_{\xi\alpha}(\mathbf{r})|_{\varepsilon_\xi=\varepsilon_\alpha=\varepsilon} = 0. \quad (\text{D.1})$$

Ceci-dit que l'élément de matrice du flux de courant à travers une surface quelconque est constant :

$$I_{\xi\alpha}(x) = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}_{\xi\alpha}(\mathbf{r}) \Big|_{\varepsilon_\xi=\varepsilon_\alpha=\varepsilon} = \text{cte} \quad \text{pour} \quad \varepsilon_\xi = \varepsilon_\alpha = \varepsilon, \quad (\text{D.2})$$

et donc invariant dans une translation dans la direction x . Pour ceci, en utilisant [16] l'opérateur de translation définit en terme de l'opérateur moment par $e^{-ip\Delta x/\hbar}$, il s'en suit que

$$I_{\xi\alpha}(x + \Delta x) = \int_S d\mathbf{S} \cdot \langle \varphi_\xi | \mathbf{j}(x + \Delta x, y, z) | \varphi_\alpha \rangle = \int_S d\mathbf{S} \cdot \langle \varphi_\xi | e^{-ip\Delta x/\hbar} \mathbf{j}(\mathbf{r}) e^{ip\Delta x/\hbar} | \varphi_\alpha \rangle. \quad (\text{D.3})$$

L'application de $e^{-ip\Delta x/\hbar}$ à droite et à gauche du vecteur $|\varphi_\alpha\rangle$ ou $\langle\varphi_\xi|$ génère un facteur de phase de sorte que

$$I_{\xi\alpha}(x + \Delta x) = e^{i(k_a - k_b)\Delta x} I_{\xi\alpha}(x). \quad (\text{D.4})$$

Mais pour que (D.2) et (D.4) soient vérifiées, $I_{\xi\alpha}(x)$ doit s'annuler ($I_{\xi\alpha}(x) = 0$) à chaque fois que $\varepsilon_\xi = \varepsilon_\alpha$ à moins que $\xi \equiv \alpha$. De ce fait, on déduit l'identité désirée :

$$\int_S d\mathbf{S} \cdot (\overline{\varphi}_{a\sigma}^\varepsilon(\mathbf{r}))^* (\overleftarrow{\mathbf{D}} \cdot \hat{x}) \overline{\varphi}_{b\sigma'}^\varepsilon(\mathbf{r}) = \sigma \frac{2m^*}{\hbar} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ab}, \quad (\text{D.5})$$

où l'on a utilisé la nouvelle renormalisation (3.16) et (3.17). Cette identité définit *la condition de conservation* des éléments de matrice du vecteur courant dans chaque sous espace propre de h^0 d'énergie fixée. S est une surface transversale arbitraire et le symbole $\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ab}$ définit que les états doivent avoir exactement les mêmes nombres quantiques discrets. Cependant, on a utilisé le δ -Kronecher puisque la restriction à des états d'égale énergie, stipule qu'aucun des nombres quantiques restants n'est continu [16].

Annexe E

Matrice de collisions et unitarité

Nous présentons dans cet annexe les étapes essentielles dans la définition de la matrice de collisions S en terme des coefficients de transmission et de réflexion [64]. On montre que l'unitarité de cette dernière incite à utiliser les fonctions d'ondes renormalisées (3.16) et par conséquent les états de diffusion (3.17). La technique exposée ici diffère de celle proposée par Stone and Szafer [14] et qui est une simple technique d'identification. En plus, on montre en relation avec [137], que la normalisation (3.5) choisie permet de vérifier que les états de diffusion sont bien orthogonaux.

Dans le même contexte de ce travail, nous nous limitons ici à une structure à deux terminaux. Sachant que (voir chapitre)

$$S_{\xi\eta} = \langle \Psi_{\xi}^{-} | \Psi_{\eta}^{+} \rangle, \quad (\text{E.1})$$

les états de diffusion entrant et sortant en un point \mathbf{r} en terme de S se présentent comme suit [36, 79]

$$\Psi_{\xi}^{+}(\mathbf{r}) = \sum_{\eta} S_{\xi\eta}^t \Psi_{\eta}^{-}(\mathbf{r}), \quad \text{et/ou} \quad \Psi_{\xi}^{-}(\mathbf{r}) = \sum_{\eta} S_{\xi\eta}^{*} \Psi_{\eta}^{+}(\mathbf{r}). \quad (\text{E.2})$$

avec t définit le transposé et $*$ le conjugué. Par ailleurs, à partir des équations Lippmann-Schwinger (section chapitre), on montre que les états de diffusion sortant et entrant sont reliés entre eux par

$$\langle \Psi_{\xi}^{-} | = \langle \Psi_{\xi}^{+} | - 2\pi i \langle \varphi_{\xi} | V \delta(\varepsilon_{\xi} - H). \quad (\text{E.3})$$

L'équation (E.3) combinée avec les relations d'orthonormalisation (2.8) et (3.5), permet d'obtenir

l'expression générale de $S_{\xi\eta}$ en terme des éléments de matrice de l'opérateur transition $T_{\xi\eta}$ [79]

$$\begin{aligned} S_{\xi\eta} &= \delta_{\xi\eta} - 2\pi i\delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\eta)\langle\varphi_\xi|V|\Psi_\eta^+\rangle \\ &= \delta_{\xi\eta} - 2\pi i\delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\eta)T_{\xi\eta}, \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

valide pour des collisions élastiques. Après substitution de (E.4) dans (E.2) et intégration sur l'énergie, on montre qu'à énergie fixée

$$\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \Psi_{a\pm}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) - i\frac{L}{\hbar} \sum_b^\varepsilon \frac{1}{v_b} \left\{ T_{(b+)(a\pm)}^\varepsilon \Psi_{b+}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) + T_{(b-)(a\pm)}^\varepsilon \Psi_{b-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) \right\}, \quad (\text{E.5})$$

$$\Psi_{a\pm}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) = \Psi_{a\pm}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) - i\frac{L}{\hbar} \sum_b^\varepsilon \frac{1}{v_b} \left\{ T_{(a\pm)(b+)}^{\varepsilon*} \Psi_{b+}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) + T_{(a\pm)(b-)}^{\varepsilon*} \Psi_{b-}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) \right\}, \quad (\text{E.6})$$

avec les $T_{(a\sigma)(b\sigma')}^\varepsilon$ sont définis par (2.84). D'autre part, en utilisant le développement des états de diffusion sortant $\Psi_\eta^+(\mathbf{r})$ dans les régions asymptotiques, on montre que

$$T_{(a+)(b+)}^\varepsilon = -\frac{i\hbar}{L} \sqrt{v_a v_b} (\delta_{ab} - t_{ab}^L), \quad (\text{E.7a})$$

$$T_{(a+)(b-)}^\varepsilon = \frac{i\hbar}{L} \sqrt{v_a v_b} r_{ab}^R, \quad (\text{E.7b})$$

$$T_{(a-)(b+)}^\varepsilon = \frac{i\hbar}{L} \sqrt{v_a v_b} r_{ab}^L, \quad (\text{E.7c})$$

$$T_{(a-)(b-)}^\varepsilon = -\frac{i\hbar}{L} \sqrt{v_a v_b} (\delta_{ab} - t_{ab}^R). \quad (\text{E.7d})$$

Par combinaison des relations (E.7a-d), (E.5) et (E.6), ces dernières se présenteront sous forme plus appropriée en terme des coefficients de transmission et réflexion comme

$$\overline{\Psi}_{a+}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \sum_b^\varepsilon t_{ba}^L \overline{\Psi}_{b+}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) + \sum_b^\varepsilon r_{ba}^L \overline{\Psi}_{b-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}), \quad (\text{E.8})$$

$$\overline{\Psi}_{a-}^{\varepsilon,+}(\mathbf{r}) = \sum_b^\varepsilon r_{ba}^R \overline{\Psi}_{b+}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}) + \sum_b^\varepsilon t_{ba}^R \overline{\Psi}_{b-}^{\varepsilon,-}(\mathbf{r}). \quad (\text{E.9})$$

Formellement ces équations permettent d'écrire

$$\begin{pmatrix} \overline{\Psi}_+^+ \\ \overline{\Psi}_-^+ \end{pmatrix} = S^t \begin{pmatrix} \overline{\Psi}_-^- \\ \overline{\Psi}_+^- \end{pmatrix}, \quad (\text{E.10})$$

et

$$\begin{pmatrix} \overline{\Psi}_- \\ \overline{\Psi}_+ \end{pmatrix} = S^* \begin{pmatrix} \overline{\Psi}_+ \\ \overline{\Psi}_- \end{pmatrix}, \quad (\text{E.11})$$

avec S est donnée par

$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{r}^L & \mathbf{t}^R \\ \mathbf{t}^L & \mathbf{r}^R \end{pmatrix}. \quad (\text{E.12})$$

Il est ainsi clair que (E.10) et (E.11) ensemble définissent que la matrice de collisions S , (E.12), est une matrice unitaire : $SS^\dagger = S^\dagger S$. Physiquement ceci traduit la conservation du flux de courant dans la structure considérée. C'est cette propriété de S qui permet de déterminer explicitement les contraintes qui découlent de la conservation du courant (D.5), en terme des coefficients de transmission et réflexion :

$$(\mathbf{r}^L)^\dagger \mathbf{r}^L + (\mathbf{t}^L)^\dagger \mathbf{t}^L = 1, \quad (\text{E.13})$$

$$(\mathbf{r}^R)^\dagger \mathbf{r}^R + (\mathbf{t}^R)^\dagger \mathbf{t}^R = 1, \quad (\text{E.14})$$

$$(\mathbf{t}^R)^\dagger \mathbf{r}^L + (\mathbf{r}^R)^\dagger \mathbf{t}^L = 0, \quad (\text{E.15})$$

et

$$\mathbf{r}^L (\mathbf{r}^L)^\dagger + \mathbf{t}^R (\mathbf{t}^R)^\dagger = 1, \quad (\text{E.16})$$

$$\mathbf{r}^R (\mathbf{r}^R)^\dagger + \mathbf{t}^L (\mathbf{t}^L)^\dagger = 1, \quad (\text{E.17})$$

$$\mathbf{t}^L (\mathbf{r}^L)^\dagger + \mathbf{r}^R (\mathbf{t}^R)^\dagger = 0. \quad (\text{E.18})$$

où 1 est la matrice unité. Dans ce cas elle est d'ordre n .

Annexe F

$\mathcal{G}^L(\mathbf{B})$ dans l'approximation du temps de relaxation

Nous nous intéressons dans cet annexe à la dérivation de la formule de Landauer $\mathcal{G}^L(\mathbf{B})$ dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation. Celle-ci permet de déterminer la probabilité de transition des électrons de conduction d'un état à un autre comme conséquence des interactions élastiques avec les impuretés.

Par combinaison de (2.59), (3.6) et aussi de

$$\varrho_d^L = -\frac{\Delta w}{e} \rho'_0(\varepsilon) (\mathbf{\Lambda}^{-1} i^-), \quad (\text{F.1})$$

tout en supposant que l'inverse de $\mathbf{\Lambda}$ existe seulement après soustraction de la valeur propre zéro du spectre [18], la formule de la magnétoconductance de Landauer s'écrit

$$\mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = \text{Tr} \rho'_0(H^0) i^+ (\mathbf{\Lambda}^{-1} i^-) + \frac{e}{2} \text{Tr} \rho'_0(H^0) (i^+ \cdot \mathbf{1}). \quad (\text{F.2})$$

$\mathbf{1}$ est le vecteur unité défini auparavant. Cette dernière équation peut être simplifiée davantage en

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^L(\mathbf{B}) &= \text{Tr} \rho'_0(H^0) i^+ (\mathbf{\Lambda}^{-1} \cdot (\frac{e}{L} v \mathbf{1})) \\ &= \text{Tr} \rho'_0(H^0) i^+ (\mathbf{\Lambda}^{-1} i), \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

sachant qu'à énergie fixe ε

$$\frac{1}{2}\mathbf{\Lambda} \times \mathbf{1} + i^- = \frac{e}{L}v\mathbf{1} = i, \quad (\text{F.4})$$

avec i est le vecteur courant dont les éléments sont donnés par

$$i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \sigma \frac{e}{L}v, \quad \text{avec } \sigma = \pm. \quad (\text{F.5})$$

Ainsi à énergie fixe ε , (F.3) prend la forme

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \sum_{\xi} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\xi})(i^+)_{\xi\xi} (\mathbf{\Lambda}^{-1}i)_{\xi\xi}. \quad (\text{F.6})$$

Dans l'approximation du temps de relaxation, l'évaluation de $(\mathbf{\Lambda}^{-1}i)_{\xi\xi}$ incite à définir pour chaque état $|\xi\rangle$ une fonction τ_{ξ} telle que

$$(\mathbf{\Lambda}i)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = (1/\tau_{a\sigma}^\varepsilon)i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon, \quad (\text{F.7})$$

et l'inverse de $\mathbf{\Lambda}$ satisfait

$$(\mathbf{\Lambda}^{-1}i)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \tau_{a\sigma}^\varepsilon i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon. \quad (\text{F.8})$$

Autrement, pour trouver l'inverse de $\mathbf{\Lambda}$ nous avons à déterminer $\tau_{a\sigma}^\varepsilon$. Pour ceci, l'application de la relation (3.15) à l'opérateur courant i , permet d'écrire

$$(\mathbf{\Lambda}i)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \frac{v_a}{L} \sum_b^\varepsilon |\bar{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon|^2 [i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon - i_{(b\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon] + |\bar{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon|^2 [i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon - i_{(b,-\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon]. \quad (\text{F.9})$$

Les $\bar{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma')^\varepsilon}$ sont les éléments de matrice de l'opérateur de transition réduit (3.29a-d).

Par identification des équations (F.9) et (F.7), faisant appel à (F.5), on déduit que

$$(\tau_{a\sigma}^\varepsilon)^{-1} = \frac{v_a}{L} \sum_b^\varepsilon \left\{ |\bar{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b\sigma)}^\varepsilon|^2 \left(1 - \frac{v_b}{v_a}\right) + |\bar{\mathbb{T}}_{(a\sigma)(b,-\sigma)}^\varepsilon|^2 \left(1 + \frac{v_b}{v_a}\right) \right\}. \quad (\text{F.10})$$

En utilisant maintenant les définitions (3.29a-d), $\tau_{a\sigma}^\varepsilon$ s'écrit explicitement en terme des proba-

bilités de transmission et de réflexion comme

$$(\tau_{a+}^\varepsilon)^{-1} = \frac{v_a}{L} \left\{ 1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^R|^2 - |t_{ab}^L|^2) \right\}, \quad (\text{F.11})$$

$$(\tau_{a-}^\varepsilon)^{-1} = \frac{v_a}{L} \left\{ 1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^L|^2 - |t_{ab}^R|^2) \right\}. \quad (\text{F.12})$$

Notons ici que le temps de relaxation dépend essentiellement de l'énergie. Il doit vérifier $\tau_{a+}^\varepsilon = \tau_{a-}^\varepsilon$ c'est à dire que le temps de relaxation est le même indépendamment de la direction de propagation.

Enfin, en combinant (F.3), (F.8), (F.11) and (F.12), on obtient

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{2e^2}{h} \sum_a^\varepsilon \left\{ \frac{[(\mathbf{t}^L)^\dagger \mathbf{t}^L]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^R|^2 - |t_{ab}^L|^2)} + \frac{[(\mathbf{t}^R)^\dagger \mathbf{t}^R]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^L|^2 - |t_{ab}^R|^2)} \right\}, \quad (\text{F.13})$$

une formule de la magnétoconductance du type Landauer dépendante explicitement de la vitesse [45]. Elle demeure vérifiée même en l'absence du champ magnétique. Par ailleurs, moyennant le temps de relaxation sur les canaux de propagation ainsi que la densité d'états et en tenant compte de l'identité physique $\tau_{a+}^\varepsilon = \tau_{a-}^\varepsilon$, on montre [18] que (F.13) se réduit à la formule BILP (1.65) en l'absence d'un champ magnétique.

D'autre part, utilisons la propriété du superopérateur master adjoint $\mathbf{\Lambda}^\dagger$ défini pour des opérateurs diagonaux arbitraires X et Y par

$$\text{Tr } X \mathbf{\Lambda} Y = \text{Tr } Y \mathbf{\Lambda}^\dagger X. \quad (\text{F.14})$$

En représentation tétradratique $\mathbf{\Lambda}^\dagger$ s'écrit

$$(\mathbf{\Lambda}^\dagger)_{\xi\xi|\zeta\zeta} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_\alpha \delta(\varepsilon_\xi - \varepsilon_\alpha) |\langle \varphi_\xi | \mathbf{T}^+ | \varphi_\alpha \rangle|^2 \{ \delta_{\xi\xi} - \delta_{\alpha\alpha} \}, \quad (\text{F.15})$$

avec $\mathbf{T}_{\xi\alpha}^+ = \langle \varphi_\xi | \mathbf{T}^+ | \varphi_\alpha \rangle = \langle \varphi_\xi | V | \psi_\alpha^- \rangle$. Ainsi, il est possible d'associer à $\mathbf{\Lambda}^\dagger$, pour chaque état

$|\varphi_\xi\rangle$, une fonction $\bar{\tau}_\xi$ de sorte que

$$(\mathbf{\Lambda}^\dagger i)_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = (1/\bar{\tau}_{a\sigma}^\varepsilon) i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon. \quad (\text{F.16})$$

Par itération, on écrit

$$[(\mathbf{\Lambda}^\dagger)^{-1} i]_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon = \bar{\tau}_{a\sigma}^\varepsilon i_{(a\sigma)(a\sigma)}^\varepsilon. \quad (\text{F.17})$$

Dans ce cas, en utilisant les équations (F.14), la magnétoconductance (F.3) s'écrit en terme du superopérateur adjoint comme

$$\mathcal{G}^L(\mathbf{B}) = \text{Tr} \rho'_0(H^0) i^- ((\mathbf{\Lambda}^\dagger)^{-1} i). \quad (\text{F.18})$$

En procédant de la même manière pour (F.6), les temps de relaxation résultants s'écrivent en terme des coefficients de transmission et réflexion comme

$$1/\bar{\tau}_{a+}^\varepsilon = \frac{v_a^\varepsilon}{L} \left\{ 1 + \frac{1}{v_a^\varepsilon} \sum_b^\varepsilon v_b^\varepsilon (|r_{ba}^L|^2 - |t_{ba}^L|^2) \right\}, \quad (\text{F.19})$$

$$1/\bar{\tau}_{a-}^\varepsilon = \frac{v_a^\varepsilon}{L} \left\{ 1 + \frac{1}{v_a^\varepsilon} \sum_b^\varepsilon v_b^\varepsilon (|r_{ba}^R|^2 - |t_{ba}^R|^2) \right\}. \quad (\text{F.20})$$

Ainsi, la conductance à énergie fixe $\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B})$ correspondante s'écrit sous forme symétrique comme

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{2e^2}{h} \sum_a^\varepsilon \left\{ \frac{[\mathbf{t}^L(\mathbf{t}^L)^\dagger]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ba}^L|^2 - |t_{ba}^L|^2)} + \frac{[\mathbf{t}^R(\mathbf{t}^R)^\dagger]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ba}^R|^2 - |t_{ba}^R|^2)} \right\}. \quad (\text{F.21})$$

Une des plus importantes propriétés de cette formule est liée au fait qu'elle ne change pas par permutation des superscriptes L et R . Ceci-dit que la magnétoconductance de Landauer ne dépend pas du sens de conduction du courant.

En combinant maintenant (F.13) et (F.21), $\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B})$ peut se mettre sous une forme plus

appropriée comme

$$\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \frac{e^2}{h} \sum_a^\varepsilon \left\{ \frac{[\mathbf{t}^L(\mathbf{t}^L)^\dagger]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ba}^L|^2 - |t_{ba}^L|^2)} + \frac{[\mathbf{t}^R(\mathbf{t}^R)^\dagger]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ba}^R|^2 - |t_{ba}^R|^2)} + \right. \\ \left. \frac{[(\mathbf{t}^L)^\dagger \mathbf{t}^L]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^R|^2 - |t_{ab}^L|^2)} + \frac{[(\mathbf{t}^R)^\dagger \mathbf{t}^R]_{aa}}{1 + \frac{1}{v_a} \sum_b^\varepsilon v_b (|r_{ab}^L|^2 - |t_{ab}^R|^2)} \right\}. \quad (\text{F.22})$$

Ceci permet de montrer, en tenant compte de (F.14) et (3.74), que $\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B})$ est invariante par renversement du champ magnétique : $\mathcal{G}^L(\varepsilon, \mathbf{B}) = \mathcal{G}^L(\varepsilon, -\mathbf{B})$.

Annexe G

Densité de particules induite

En présence d'un courant stationnaire, les densités de charge et les potentiels électrochimiques induits à l'intérieur de la structure mésoscopique sont reliés par l'équation de Poisson locale [34]

$$\nabla^2 \omega(\mathbf{r}) + 4\pi e \left(N^{\text{ind}}(\mathbf{r}) - N(\mathbf{r}) \right) = 0. \quad (\text{G.1})$$

$N^{\text{ind}}(\mathbf{r})$ est la densité de charge induite (par le gaz électronique à cause de l'existence des impuretés; ions positifs) par le potentiel $\omega(x, y)$ et $N(\mathbf{r})$ est la valeur moyenne de la densité de charge dans l'approche de Landauer (5.37), de sorte que $N^{\text{ind}}(\mathbf{r}) - N(\mathbf{r})$ définit la densité de particules qui demeure non écrantée (l'écart par rapport à une concentration électronique uniforme) et $\omega(\mathbf{r})$ est le potentiel physique produit par la charge positive ainsi que le nuage d'électrons écran qu'il induit.

D'autre part, l'équation Thomas-Fermi locale permet de définir, pour une énergie ε , dans le régime stationnaire et en tous points de la structure, la densité de charge induite en terme du potentiel induit :

$$N^{\text{ind}}(\varepsilon, \mathbf{r}) = e \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \omega(\mathbf{r}). \quad (\text{G.2})$$

$\frac{\partial n}{\partial \varepsilon}$ représente le nombre d'états par unité d'énergie se propageant de gauche à droite dans un champ magnétique et en présence du désordre : $\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = \sum_a^{\varepsilon} \frac{\partial n_a}{\partial \varepsilon} = \sum_a^{\varepsilon} \frac{1}{h v_a}$.

La combinaison de (G.1) et de (G.2), permet d'écrire

$$\mathcal{L}^2 \nabla^2 N^{\text{ind}}(\varepsilon, \mathbf{r}) + \left(N^{\text{ind}}(\mathbf{r}) - N(\mathbf{r}) \right) = 0, \quad (\text{G.3})$$

avec $\mathcal{L}^2 = \frac{1}{4\pi e^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \varepsilon}\right)^{-1}$ définit le rayon d'écrantage au-dessous duquel l'effet écran ne joue pas, et au dessus duquel il devient de plus en plus total. Pour un effet écran (screening) effectif, i.e. le rayon écran est très petit relativement à la variation des densités $N^{\text{ind}}(\mathbf{r})$ et $N(\mathbf{r})$ [86], le premier terme dans (G.3) peut être négligé d'où nous aboutissons à [86, 60, 12] :

$$N^{\text{ind}}(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}). \quad (\text{G.4})$$

Ceci étant, si l'effet écran est effectif, la densité de particules induite en un point \mathbf{r} , $N^{\text{ind}}(\mathbf{r})$, coïncide avec la déviation de la densité de particules de sa valeur à l'équilibre, c'est-à-dire $N(\mathbf{r})$. Ainsi de (G.4) et (G.2), il s'en suit que la densité de particules en un point \mathbf{r} dans le point de vue de Landauer à énergie ε s'écrit

$$N(\varepsilon, \mathbf{r}) = e \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \omega(\mathbf{r}). \quad (\text{G.5})$$

Annexe H

Effet Hall quantique intégral : Méthode de comptage

Nous nous intéresserons dans cet appendice à l'étude heuristique de l'effet Hall quantique intégral. Nous considérons pour ceci le cas réaliste d'une géométrie unidimensionnelle à six terminaux, deux servant pour le transport du courant et les autres sont des sondes de mesure des différentes tensions (voir Fig.H-1).

Avant d'aborder le problème de la mesure dans une structure de Hall unidimensionnelle, rappelons les traits majeurs du calcul probabiliste élaboré dans le point de vue de Landauer pour une structure à quatre terminaux [39, 138, 47, 46] et ceci afin de décrire la conductance mesurée. Considérons, de prime abord, la formule du courant définie en terme des potentiels chimiques des réservoirs adjacents comme (voir formule Büttiker)

$$\begin{aligned} I^i &= \frac{e}{L^i} v^i \left\{ \mu^i (1 - |t_{ii}|^2) - \sum_j \mu^j |t_{ij}|^2 \right\} \\ &= \frac{e}{L^i} v^i \sum_j \mu^j \{ \delta_{ij} - T_{ij} \}, \end{aligned} \quad (\text{H.1})$$

avec i et $j = 1 \dots 4$ définissent les indices des terminaux. Les coefficients de transmission et de réflexion entre les différents terminaux T_{ij} définissent la matrice \mathcal{T} relative à la structure considérée. \mathcal{T} vérifie que la somme des éléments de chaque ligne et de chaque colonne est égale à zéro : $\sum_i T_{ij} = \sum_j T_{ij} = 1$. v^i est la vitesse des porteurs à l'intérieur de chaque terminal i et

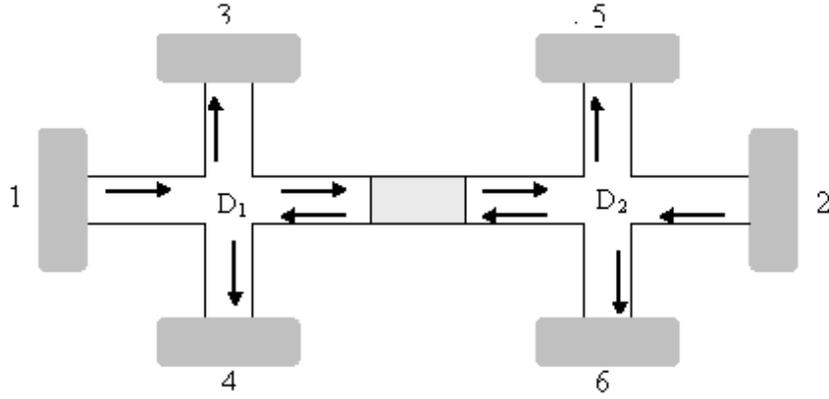


FIG. H-1 – Bare de Hall à six terminaux.

L^i représente la longueur de chaque terminal.

On montre après plusieurs manipulations algébriques que ce courant peut être exprimé en terme des potentiels induits à l'intérieur de la structure comme suit

$$I^i = \frac{2e}{h} \sum_j w_j Y_{ij}. \quad (\text{H.2})$$

Les w_j définissent les potentiels électrochimiques induits à l'intérieur des terminaux en réponse au courant qui y circule, et $Y = 2A^{-1} - 1$ où $A = 1 + \mathcal{T}$. Y vérifie les contraintes $\sum_i Y_{ij} = \sum_j Y_{ij} = 0$.

Dans ce cas, la conductance, i.e. la magnétoconductance calculée par rapport aux potentiels électrochimiques induits $w_i - w_j$ (avec $i, j = 3$ et/ou 4 or 1 et/ou 2) s'écrit

$$\mathcal{G}_{12,ij} = \frac{2e^2}{h} \left(\frac{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}}{g_{21}} \right), \quad (\text{H.3})$$

où

$$\begin{aligned} g_{11} &= \frac{1}{S} [Y_{11}S + (Y_{1i} + Y_{1j})(Y_{i1} + Y_{j1})], & g_{12} &= \frac{1}{S} [Y_{1i}Y_{2j} - Y_{2i}Y_{1j}], \\ g_{21} &= \frac{1}{S} [Y_{i1}Y_{j2} - Y_{i2}Y_{j1}], & g_{22} &= \frac{1}{S} [Y_{ii}S + (Y_{i1} + Y_{i2})(Y_{2i} + Y_{1i})]. \end{aligned} \quad (\text{H.4})$$

$$S = Y_{1i} + Y_{2i} + Y_{1j} + Y_{2j} = Y_{i1} + Y_{i2} + Y_{j1} + Y_{j2}.$$

Ayant tous les ingrédients, nous nous limiterons maintenant au calcul des conductances longitudinales et Hall dans une structure de Hall à six terminaux.

H.1 Modèle

Considérons le cas réaliste d'une structure unidimensionnelle symétrique à six terminaux. Les terminaux 1 et 2 servent pour le transport du courant et les autres sont des sondes pour mesurer les différentes tensions (voir Fig. H-1). Le courant est donné par la même formule précédente mais avec maintenant i et $j : 1 \cdots 6$. Pour définir la matrice relative à la structure \mathcal{T} nous adoptons le modèle suivant :

Dans le même esprit du calcul théorique exposé au chapitre 5, les interférences entre les états de bords sont ignorés et la probabilité de réflexion d'un état de bord dans un autre est non nulle. Nous considérons l'écoulement dans les terminaux comme un fluide classique. Les terminaux 3, 4, 5 et 6 servant pour la mesure des potentiels, sont connectés aux terminaux de transport 1 et 2 de façon symétrique. Ceci signifie que le pouvoir de transmission du terminal 1 vers le terminal 3 est le même que le pouvoir de transmission du terminal 2 vers le terminal 6. De même le pouvoir de transmission du terminal 5 vers 2 (états *up*) est le même que le pouvoir de transmission du terminal 4 vers le terminal 1.

Soit ε le coefficient de couplage entre un terminal de mesure et le terminal de transport auquel il est attaché. Les coefficients de transmission T_{ij} sont déterminés de la manière suivante : après qu'il soit injecté par le réservoir 1, un courant injecté dans un état de bord *up* arrive au niveau du diviseur D_1 et sera scindé en deux parties. Une partie $(1 - \varepsilon)x$ est transmise dans le terminal 3 et sera absorbée par le réservoir 3, et la partie restante εx est transmise de l'autre côté du terminal de transport. Une fois arrivée au niveau de l'échantillon, cette dernière sera à son tour scindée en une partie transmise dans le terminal 2, donnée par $\varepsilon T x$ et une partie réfléchiée donnée par $\varepsilon R x$. T et $R = 1 - T$ sont les coefficients de transmission et de réflexion de l'échantillon dans la direction de transport. Le courant réfléchi $\varepsilon R x$ sera par la suite transmis entièrement dans le terminal 4 et absorbé par le réservoir adjacent. C'est à dire que la partie réfléchiée dans le réservoir d'injection 1 est nulle¹. En ce qui concerne la partie $\varepsilon T x$, une fois

¹Ceci est en quelques sorte en accord avec l'idée de Büttiker [86] qui considère que le courant émis par 1 est

arrivée au niveau de D_2 elle sera à son tour entièrement injectée (pour la même raison) dans le terminal 5 et absorbée par le réservoir 5. En collectant tous les termes, les coefficients de transmission du terminal 1 vers les autres terminaux sont donnés par $T^{21} = 0$, $T^{31} = 1 - \varepsilon$, $T^{41} = \varepsilon R$, $T^{51} = \varepsilon T$, $T^{61} = 0$ et le coefficient de réflexion de l'état de bord dans le même terminal est $T^{11} = 0$. La procédure est identique lorsque l'injection se fait du réservoir 2.

Pour ce qui est maintenant des terminaux 4 de même que 5, le courant ou l'état de bord y injecté par le réservoir 4 (5) dans le terminal 4 (5), une fois arrivé au niveau du diviseur $D_1(D_2)$ sera partagé en une partie $(1 - \varepsilon)y$ transmise dans le terminal 1 (2) et donc absorbé par le réservoir 1 (2), et la partie restante εy est réabsorbée par le réservoir d'injection. Enfin pour ce qui est du courant injecté par le réservoir 3 (6) dans le terminal 3 (6) sera scindé au niveau du diviseur $D_1(D_2)$ en deux parties. Une partie $(1 - \varepsilon)z$ est transmise de l'autre côté du terminal de transport, et la partie εz sera réabsorbée par le réservoir 3 (6). Une fois arrivée au niveau de l'échantillon, la partie $(1 - \varepsilon)z$ sera à son tour scindée en une partie transmise dans le terminal 2 (1), donnée par $(1 - \varepsilon)Tz$ et une partie réfléchie donnée par $(1 - \varepsilon)Rz$. Une partie de cette dernière $(1 - \varepsilon)^2 Rz$ sera transmise dans le réservoir 4 (5), et la partie restante $\varepsilon(1 - \varepsilon)Rz$ sera absorbé par le réservoir 1(2). A l'ordre 1 en ε , $T^{13} = \varepsilon R$, $T^{23} = \varepsilon T$, $T^{33} = \varepsilon$, $T^{43} = (1 - 2\varepsilon)R$, $T^{53} = (1 - 2\varepsilon)T$, et $T^{63} = 0$

Notons que : pour que T^{33} soit positif ou nul quelle que soit la valeur de R , le paramètre ε doit vérifier la condition $0 \leq \varepsilon \leq 1$. La matrice \mathcal{T} correspondante à ce modèle, s'écrira comme

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \alpha & \varepsilon R & \varepsilon T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon T & \varepsilon R & \alpha \\ \varepsilon R & \varepsilon T & \varepsilon & (1 - 2\varepsilon)R & (1 - 2\varepsilon)T & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ \varepsilon T & \varepsilon R & 0 & (1 - 2\varepsilon)T & (1 - 2\varepsilon)R & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad (\text{H.5})$$

avec $\alpha = 1 - \varepsilon$, et les termes d'ordre supérieur à 1 sont négligés. On montre que \mathcal{T} vérifie les contraintes de la conservation du courant suscités.

Pour adapter notre modèle au calcul précédent (équation (H.1), deux des terminaux de

entièrement absorbé par 3 dans un régime de Hall.

mesure doivent être éliminés (supprimés). Donc nous ne garderons que 4 terminaux relativement au cas traité. En effet, comme la conductance longitudinale est mesurée avec les terminaux 3 et 5, et celle Hall avec les terminaux 3 et 4, commençons par l'élimination du terminal 6. Puisque ce terminal sert de mesure de tension, le courant qui le parcourt est nul. Posons $I^6 = 0$, il vient que

$$\mu_6 = \frac{1}{1 - T_{66}} (T_{61}\mu_1 + T_{62}\mu_2 + T_{63}\mu_3 + T_{64}\mu_4 + T_{65}\mu_5). \quad (\text{H.6})$$

Dans ce cas la formule du courant (H.1) réduite à une structure à 5 terminaux se présente comme suit

$$\hat{I}^\gamma = \frac{e}{L^\gamma} v^\gamma \left\{ \mu^\gamma (1 - \hat{T}_{\gamma\gamma}) - \sum_{\eta} \mu^\eta \hat{T}_{\gamma\eta} \right\}, \quad (\text{H.7})$$

où γ et $\eta : 1 - 5$, et les nouveaux coefficients \hat{T}_{ij} sont reliés aux coefficients T_{ij} à travers

$$\hat{T}_{\gamma\gamma} = T_{\gamma\gamma} + \frac{T_{\gamma 6} T_{6\gamma}}{1 - T_{66}}, \quad \hat{T}_{\gamma\eta} = T_{\gamma\eta} + \frac{T_{\gamma 6} T_{6\eta}}{1 - T_{66}}. \quad (\text{H.8})$$

Conséquemment, la matrice (H.5) se réduit à la matrice unitaire et inversible

$$\hat{\mathcal{T}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \alpha & \varepsilon R & \varepsilon T \\ \varepsilon T & \varepsilon R & 0 & \alpha T & \alpha R \\ \varepsilon R & \varepsilon T & \varepsilon & (1 - 2\varepsilon) R & (1 - 2\varepsilon) T \\ \alpha & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}. \quad (\text{H.9})$$

H.1.1 Conductance longitudinale

Soit \mathcal{G}^L la magnétoconductance longitudinale donnée par le rapport du courant circulant à la différence entre les potentiels induits dans les terminaux 3 et 5. Dans un tel cas le terminal 4 est sans importance. Ainsi, en procédant de la même manière, on montre après élimination du terminal 4 et alors $\hat{I}^4 = 0$, que \hat{I}^γ sera remplacé par

$$\bar{I}^\theta = \frac{e}{L^\theta} v^\theta \left\{ \mu^\theta (1 - \bar{T}_{\theta\theta}) - \sum_{\nu} \mu^\nu \bar{T}_{\theta\nu} \right\}, \quad (\text{H.10})$$

où θ et $\nu = 1, 2, 3, 5$ et

$$\overline{T}_{\theta\theta} = \widehat{T}_{\theta\theta} + \frac{\widehat{T}_{\theta 4}\widehat{T}_{4\theta}}{1 - \widehat{T}_{44}}, \quad \overline{T}_{\theta\nu} = \widehat{T}_{\theta\nu} + \frac{\widehat{T}_{\theta 4}\widehat{T}_{4\nu}}{1 - \widehat{T}_{44}}. \quad (\text{H.11})$$

Tirant profit de ces relations, la matrice de départ (H.5) se réduit après élimination des terminaux 4 et 6 en

$$\mathcal{T}^L = \begin{pmatrix} \varepsilon R & 0 & \alpha & \varepsilon T \\ T & \varepsilon R & 0 & \alpha R \\ \alpha R & \varepsilon T & \varepsilon & (1 - 2\varepsilon)T \\ 0 & \alpha & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}. \quad (\text{H.12})$$

\mathcal{T}^L est une matrice carrée inversible d'ordre 4, qui est ni symétrique ni antisymétrique par renversement du champ magnétique.

Le calcul de l'inverse de la matrice A , et définition alors des coefficients Y_{ij} , nous permet de montrer après plusieurs manipulations algébriques qu'à l'ordre 2 en ε :

$$S = \frac{2}{8\varepsilon T} (-8\varepsilon R) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{H.13a})$$

$$g_{12} = g_{21} = \frac{e}{h} \frac{1}{S} (8\varepsilon T R) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (\text{H.13b})$$

$$g_{11} = \frac{e}{h} \frac{1}{S} [-8\varepsilon T R - 16\varepsilon^2 R(1 - 3TR)] + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad (\text{H.13c})$$

$$g_{22} = \frac{e}{h} \frac{1}{S} [-8\varepsilon T R + 16\varepsilon^2 R(T - R)] + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \quad (\text{H.13d})$$

Par conséquent, après substitution de ces résultats dans (H.3), la magnétoconductance longitudinale mesurée s'écrit

$$\mathcal{G}^{long} = \mathcal{G}_{12,35} = \frac{e^2}{h} \left[\frac{(R - T)^2 + R^2}{TR} + \varepsilon(T - R) \left(\frac{T}{R} + \frac{R^2}{T^2} \right) \right], \quad (\text{H.14})$$

et

$$w_1 - w_2 = \left[-1 + 2\varepsilon \frac{(T - R)}{T} \right] (w_3 - w_5). \quad (\text{H.15})$$

Par ailleurs, dans la limite balistique (absence de désordre) :

$$\lim_{R \rightarrow 0} \mathcal{G}^L = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{T}{R} + \varepsilon \left(\frac{T}{R} \right)^2 \longrightarrow \infty, \quad (\text{H.16})$$

la résistance longitudinale s'annule indépendamment de la valeur de ε . Ainsi, on conclut que ce que nous obtenons ici est conforme avec les prédictions physiques et expérimentales [129].

H.1.2 Conductance Hall

En suivant les mêmes étapes développées précédemment mais en éliminant cette fois-ci les terminaux 5 et 6, \widehat{T} se réduit dans ce cas à

$$\mathcal{T}^H = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon T & \alpha & \varepsilon R \\ \varepsilon T & R & 0 & \alpha T \\ \varepsilon R & \alpha T & \varepsilon & (\alpha - \varepsilon) R \\ \alpha & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}. \quad (\text{H.17})$$

Conséquemment, on montre après quelques manipulations algébriques que

$$S = \frac{2}{\det A^H} [-4T + 8\varepsilon(1 - 2R) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)], \quad (\text{H.18})$$

$$g_{11} = \frac{e}{h} \left(\frac{2}{\det A^H} \right)^2 \frac{1}{S} [-8\varepsilon T + \mathcal{O}(\varepsilon^2)], \quad (\text{H.19})$$

$$g_{22} = \frac{e}{h} \frac{1}{S} \left(\frac{2}{\det A^H} \right)^2 4R [-R + \varepsilon(6R - 2) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)], \quad (\text{H.20})$$

$$g_{12} = -g_{21} = \frac{e}{h} \frac{1}{S} \left(\frac{2}{\det A^H} \right)^2 T [4R + 8\varepsilon(1 - 3R) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)], \quad (\text{H.21})$$

avec

$$\det A^H = 4R + 8\varepsilon(1 - 2R) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (\text{H.22})$$

Par substitution de ces résultats dans (H.3), il vient que

$$\mathcal{G}^H = \mathcal{G}_{12,34} = \frac{e^2}{h} \left[1 + \frac{2\varepsilon}{T}(3 + 4T) \right], \quad (\text{H.23})$$

et que

$$w_1 - w_2 = -R(w_3 - w_4). \quad (\text{H.24})$$

Ceci-dit qu'une conductance quantifiée correspond au cas où le couplage ε est nul ; c'est à dire les états de bords ne se départagent pas.

Bibliographie

- [1] B. Jeckelmann et B. Jeanneret, Rep. Prog. Phys. 64, 1603, (2001).
- [2] Jorgen Rammer, Quantum Transport Theory, édition Frontiers in Physics, (1998).
- [3] B. L. Altshuler, JETP lett. 41, 648, (1985) ; B. L. Altshuler, P. A. Lee et R. A. Webb, Mesoscopic Phenomena in Solids, Modern Problems in Condensed Matter Sciences, Vol. 30, Eds ; V. M. Agronovich, A. A. Maradudin, North Holland, Amsterdam, (1991).
- [4] P. A. Lee et A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. 55, 1622, (1985).
- [5] P. A. Lee, A. Douglas Stone, et H. Fukuyama, Phys. Rev. B35, 1039, (1985).
- [6] A. A. Abrikosov *et al* dans : Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, édition DOVER, Etats-Unis, (1975).
- [7] Madan Lal Mehta, Random Matrices, seconde édition, édition Academic Press, INC, (1991).
- [8] K. B. Efetov, Supersymmetry and Chaos, Cambridge University Press, Cambridge, (1997).
- [9] R. Kubo, Canad. J. Phys., 34, 1274, (1956).
- [10] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1, 223, (1957) ; R. Landauer, Philos. Mag. 21, 863, (1970).
- [11] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. 57, 1761, (1986).
- [12] M. Büttiker, IBM J. Res. Develop. 32, 317, (1988).
- [13] Y. Imry, *Perspectives on Condensed Matter Physics* , edited by G. Grinstein et E. Mazenko, (World Scientific, Singapore) 101, (1986).
- [14] A. D. Stone et A. Szafer, IBM J. Res. Develop. 32, 384, (1988).
- [15] D. S. Fisher et P. A. Lee, Phys. Rev. B 23, 6851, (1981).

- [16] H. U. Baranger et A. D. Stone, *Phys. Rev. B* 40, 8169, (1989).
- [17] Branislav K. Nicolié, Which Kubo formula gives the exact conductance of a mesoscopic disorderd system ?, arXiv : cond-mat/0103150 v4, (2001).
- [18] F. Benamira, Ph. D Thesis, Université Montréal, Cannada, (1996).
- [19] K. Von Klitzing, G. Doroda et M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 45, 494, (1980).
- [20] N. G. Van kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry*. North-Hollan, Amsterdam, (1981).
- [21] M. Mezard, G. Parisi et M. A. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond*, édité par World Scientific Lecture Notes in Physics Vol 9, (1987).
- [22] *Quantum Coherence in Mesoscopic Systems*, édité par B. Kramer, Nato ASI Series, Series B : Physics Vol 254.
- [23] C. W. J. Beenakker et H. van Houten, *Solid State Physics, Volume 44*, édité par H. Ehrenreich et D. Turnbull, (1991).
- [24] B. Jaoul, *Etude de la Plasticité et Application aux Métaux*, Paris, (1965).
- [25] C. Kittel, *Introduction à la Physique de l'Etat Solide*, édition BORDAS, Paris, (1972).
- [26] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, édité par Oxford University Press, New York, (1997).
- [27] A. Haug, *Theoretical Solid State Physics*, édition , vol 1 et 2, (1972).
- [28] A. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, édition Springer series in solid state science 2, (1978).
- [29] V. Fock, *Z. Phys.* 47, 446 (1928) ; L. Landau, *Z. Phys.* 64, 629 (1930).
- [30] T. Dittrich, P. Hainggi, G-L. Ingold, B. Kramer, G. Schon et W. Zwerger, *Quantum Transport and Dissipation*, Wiley-VCH verlag, Weinheim, (1998).
- [31] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge), (1995).
- [32] M. Janssen, O. Viehweger, U. Fastenrath et I. Hajdu, *Introduction to the Theory of the Integer Quantum Hall Effect*, édité par J. Hajdu, John Wiley & Sons, Weinheim, Allemagne, (1994).

- [33] R. Kubo, S. J. Yake, N. Hashitsme ; Solid State Phys. 17, 269, (1965).
- [34] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, New, (1976).
- [35] M. Rudden et J. Wilson, Elements of Solid State Physics, (1980).
- [36] A. Messiah, Mécanique Quantique, Tomes 1 et 2, édition Dunod, Paris, (1995).
- [37] H. B. G. Casimir, Rev. Mod. Phys. 17, 343, (1945).
- [38] L. Onsager, Phys. Rev. 38, 2265, (1931).
- [39] A. Abdellaoui, Etude Théorique des Fluctuations de la Conductance Résiduelle dans les Systèmes Mésoscoïques, Thèse de Magister, (1999).
- [40] E. Abrahamas, P. W. Anderson, D. Licciardello et T. Ramakrishnan : Phys. Rev. Lett. 42, 673, (1979).
- [41] R. Landauer, Philos. Mag. 21, 863, (1975).
- [42] E. N. Economou et C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. 46, 618, (1981).
- [43] M. Ya. Azbel, J. Phys. C 14, L225, (1981).
- [44] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer et S. Pinhas, Phys. Rev. B 31, 6207, (1985).
- [45] M. Büttiker et Y. Imry, J. Phys. C 18, L467-L472, (1985).
- [46] A. Abdellaoui et F. Benamira, Mesoscopic Transport Theory, Communication orale présentée dans le cadre du 3rd TMR Workshop of " Quantum Transport in The Frequency and Time Domains ". Proceeding du 3rd TMR Workshop for Mesoscopic Systems 01-05 Janvier 2002, Bad Kleinkirchheim, Autriche 2002.
- [47] A. Abdellaoui et F. Benamira, Conductance Mésoscopique dans une Mesure à 4 Terminaux. Poster présenté à l'école prè-Doctorale de Physique Mésoscoïques des Houches. Proceeding de l'école de physique des Houches 02-14 septembre 2001, Houches, Alpes Françaises, France, 2001.
- [48] E. Verboven, Physica 26, 1991, (1960).
- [49] A. Janner, Helv. Phys. Acta. 36, 857, (1963).
- [50] D. Loss, Physica A, 139, 505, (1986) ; D. Loss, Physica A, 139, 526, (1986)

- [51] D. Loss et A. Thellung, *Physica A*, 144, 17, (1987).
- [52] L. van Hove, *Physica*, 21, 517, (1955); *Physica*, 21, 901, (1955); *Physica*, 22, 343, (1956); *Physica*, 23, 441, (1957); *Physica*, 25, 268, (1959).
- [53] R. Kubo (1965) *et al*, *Solid State Physics*, édité par F. Seitz, et D. Turnbull, Academic New York, Vol 17, 288, (1965).
- [54] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 109, 1492, (1958).
- [55] K. Shepard, *Phys. Rev. B* 43, 11623, (1991).
- [56] J. Kucera et P. Streda, *J. Phys. C* 21, 4357, (1988).
- [57] S. Datta et B. Das, *Appl. Phys. Lett.* 56, 665, (1990).
- [58] H. Bouchiat, cours présentés à l'école de Physique Mésoscopique Quantique, organisée par le GDR physique mésoscopique du 25 septembre au 5 octobre, Aussois, France, (2005).
- [59] R. Landauer, *Proceeding of the International Conference on Localisation, Interaction and Transport Phenomana*, G. Bergmann et Y. Buynseracde dans Springer, New York, 38, (1985).
- [60] R. Landauer, *Z. Phys. B.* 68, 217, (1987).
- [61] R. Landauer, *Physica Scripta*, T42, (1992).
- [62] R. Landauer, *Phys. Rev. B* 52, 11225, (1995).
- [63] Y. Imry et R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* 71, S306, (1999).
- [64] F. Benamira, Many-channel conductance formula : Linear-response theory approach, soumis.
- [65] D. C. Langreth et E. Abrahamas, *Phys. Rev. B* 24, 2978, (1981).
- [66] D. J. Thouless, *Phys. Rev. Lett.* 47, 972 (1981).
- [67] C. M. Van. Vliet, *J. Math. Phys.* 19, 1978, (1978); *J. Math. Phys.* 20, 2573, (1979).
- [68] C. M. van Vliet, *Physique Statistique Hors Equilibre*, note de cours, partie E, 197, (1978).
- [69] W. Kohn et J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* 108, 590 (1957).
- [70] Yu. V. Sharvin. *Zh. Exp. Teor. Fiz* 48, 984, (1965).
- [71] B. J. van Wees *et al*, *Phys. Rev. Lett.* 60, 848 (1988).

- [72] D. A. Wharam *et al*, J. Phys. C 21, L209, (1988).
- [73] B. Lax, Rev. Mod. Phys. 30, 122, (1958).
- [74] R. Zwanzig, Physica 30, 1109, (1964).
- [75] R. Landauer, J. Phys. Condens. Matter 1, 8099, (1989).
- [76] M. C. Payne, J. Phys. C 1, 4931, (1989).
- [77] A. Kamenev et W. Kohn, Phys. Rev. B 63, 155304, (2001).
- [78] S. Doniach et E. M. Sondheimer, Green's Functions for Solid State Physics, Benjamin, (1974).
- [79] M. L. Goldberger et K. M. Watson, Collision Theory, John Wiley & Sons, Inc, (1964).
- [80] A. Abdellaoui et F. Benamira, Many-channel Landauer magnétoconductance formula : Linear response theory approach, soumis.
- [81] A. Abdellaoui et F. Benamira, Mesoscopic density-operator in a uniform magnetic field, Phys. Stat. Sol. C 1, 3769, (2004) ; Communication à : Second Seeheim Conference on Magnetism, 27 juin-01 Juillet 2004, Seeheim, Allemagne. Poster présenté à l'école de physique mésoscopique quantique Aussois, du 25 septembre au 05 octobre, France, (2005).
- [82] D. A. Greenwood, Proc. Phys. Soc. London 71, 585 (1958).
- [83] F. Sols, Phys. Rev. Lett. 67, 2874, (1991).
- [84] J. U. Nöckel, A. D. Stone et H. U. Baranger, Phys. Rev. B 48, 17569 (1993).
- [85] Inclue l'article [15], [14], [16], [56].
- [86] M. Büttiker, Phys. Rev. B. 38, 9375, (1988).
- [87] A. Abdellaoui et F. Benamira, The multichannel Landauer magneto-conductance formula. Poster présenté au Deutsch Physikalische Gesellschaft DPG. Proceeding du DPG Dresden 23-28 Mars 2003, Dresden, Allemagne, 2003. Poster présenté à l'école de Physique Mésoscopique Quantique, du 25 sept au 05 octobre, Aussois, Alpes, France.
- [88] R. Landauer, Z. Phys. B 21, 247-254, (1975).
- [89] Physique Quantique Mésoscopique, session les Houches LXI 1994, édité par E. Akkermans, G. Montambaux, J-L. Pichard, et Zinn Justin, Elsevier, Amsterdam, North Holland (1995).

- [90] S. M. Girvin dans *The Quantum Hall Effect : Novel Excitations and Broken Symmetries*. Proceeding école d'été les Houches, édition Springer Verlag et les Editions, (1999).
- [91] D. Weinmann dans : *The Physics of Mesoscopic Systems*, Cours présentés dans le cadre de la 7ème Ecole de Physique of New Materials, Theory and Applications. Proceeding de VII Petra School of Physics (2000).
- [92] D. C. Tsui, H. L. Stormer et A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* 48, 1559, (1982).
- [93] K. von Klitzing, *The Quantum Hall Effect*, Physik Journal, Deutsch Physikalische Gesellschaft, (2005).
- [94] R. E. Prange, S. M. Girvin, M. E. Cage, K. von Klitzing, D. Thouless, A. Pruisken, R. Laughlin, A. Chang et F. M. Haldane, *The Quantum Hall Effect*, deuxième édition, USA, (1990).
- [95] B. Huckestein, *Review of Modern Physics*, Vol. 67, 357, (1995).
- [96] T. Chakraborty et P. Pietiläinen, *The Quantum Hall Effects : Fractional and Integral*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (1995).
- [97] S. Kettemann, B. Kramer et T. Ohtsuki, arxiv : cond-mat/0307044v1, (2003).
- [98] M. Tsukada, *J. Phys. Soc. Japan*, 41, 1466, (1976).
- [99] H. Aoki et T. Ando, *Solid State Commun.* 38, 1079, (1981).
- [100] Y. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.* 51, 237, (1982).
- [101] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* 53, 3126, (1984).
- [102] Y. Ono, T. Ohtsuki et B. Kramer, *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics*, édité par G. Landwehr, Springer Ser. Sol. St. Sci. 101, 60-69, (Springer, Berlin 1992).
- [103] A. A. Abrikosov et I. A. Ryzhkin, *Adv. Phys.* 27, 147 (1978).
- [104] B. I. Halperin, *Phys. Rev. B.* 25, 2185, (1982).
- [105] A. M. M. Pruisken : *Phys. Rev.* B32, 2636, (1985).
- [106] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B.* 23, 5632, (1981).
- [107] O. Heinonen *et al*, *Phys. Rev. B* 32, 633, (1985); S. M. Apenko et al, *J. Phys. C. Solid State Phys.* 18, 1197, (1985).

- [108] E. B. Kane *et al*, Phys. Rev. Lett 59, 1353, (1987).
- [109] P. Streda, J. Kucera et A. H. Macdonald, Phys. Rev. Lett. 59, 1973 (1987).
- [110] J. K. Jain et S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. 60, 1542, (1988).
- [111] J. K. Jain et S. A. Kivelson, Phys. Rev. B. 37, 4276, (1988).
- [112] M. Büttiker, The Quantum Hall Effect in Open Conductors, IBM Research Division, Thomas Watson Research Center, New York, 191, (1992).
- [113] K. von Klitzing et G. Ebert, Two-dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices, édité par G. Bauer, F. Kuchar, et H. Heinrich (Springer-Verlag, Heidelberg), (1984).
- [114] D. A. Sypher et P. J. Stiles, Phys. Rev. B. 32, 6620, (1985).
- [115] M. C. Cage *et al*, Phys. Rev. Lett. 51, 1347, (1983).
- [116] S. Washburn, A. B. Fowler, H. Schmid et D. Kern, Phys. Rev. Lett. 61, 2801, (1988); H. Hirai, S. Komiyama, S. Sasa et S. Hiyamizu, non publié.
- [117] R. J. Haug, A. H. Macdonald, P. Streda et K. von Klitzing, Phys. Rev. Lett. 61, 2797, (1988).
- [118] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett 62, 229, (1989).
- [119] P. Streda *et al*, Phys. Rev. Lett 62, 230, (1989).
- [120] J. K. Jain et S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett 62, 231, (1989).
- [121] F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett 61, 589, (1988).
- [122] P. Streda, J. Phys. C, L1300, (1982).
- [123] P. Streda, J. Phys. C15, L717, (1982).
- [124] L. Smreka et P. Streda, J. Phys. C : Solid State Phys. 10 2153, (1977).
- [125] A. Bastin *et al*, J. Phys. Chem. Solids 32, 1811, (1971).
- [126] F. F. Fang et P. J. Stiles, Phys. Rev. B24, 6487 (1983); 29, 3749, (1984); B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel et C. T. Foxen, Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988).
- [127] R. J. Haug, J. Kucera, P. Streda, et K. von Klitzing, Phys. Rev. B. 39, 10892, (1989).
- [128] A. Abdellaoui et F. Benamira, en phase de rédaction.

- [129] L. P. Kouwenhoven, Master's Thesis, Delft University of Technologie, (1988).
- [130] A. D. Benoit *et al*, Phys. Rev. Lett 57, 1765, (1986).
- [131] R. J. Haug dans Quantum Transport in Semiconductor Submicron Structures, édité par B. Kramer, NATO ASI Series, Serie E : Applied sciences, Vol. 326, 3-18, (1996).
- [132] B. I. Halperin, P. A Lee et N. Read, Phys. Rev. B47, 7312, (1993). J. K. Jain, Comments Condens. Matter Phys. 16, 307, (1993).
- [133] Electron and Spin Transport dans Advances in Solid State Physics, édité par B. Kramer, Springer, Vol. 41, 173, (2001).
- [134] M. H. Larsen, A. M. Lunde et K. Flensberg, Phys. Rev. B. 66, 0333041, (2002).
- [135] Matrices, Série Schaum.
- [136] S. Lipschutz, Algèbre Linéaire, Série Schaum.
- [137] A. Kriman, A. Szafer et A. D. Stone, non publié.
- [138] A. Abdellaoui et F. Benamira, Mesoscopic conductance fluctuations in a four probe setup measurement : The Landauer approach. Séminaire présenté à la 7ème Ecole PETRA de Physique of New Materials, Theory and Applications. Proceeding de VII Petra School of Physics 17-22 septembre 2000, Jordanie, 2000.

Abstract

A self-consistent linear-response theory for a two-lead mesoscopic structure in Landauer's viewpoint for transport is developed. The Landauer approach for transport views the current as the causal agent and the induced electrochemical potential inside the two-leads Mesoscopic sample as the response. Thus, a density operator relevant in this viewpoint, in a uniform magnetic field is derived. It is shown that this operator differs from the one given in Kubo's viewpoint by a term that represents the self-consistent effects. Hence, a special emphasis is devoted to this term where an exact expression is obtained in the framework of elastic scattering theory.

As a first application, we have stressed the use of the Landauer density-operator in the calculation of the conductance. To that, a solution for the diagonal master equation without use of time relaxation approximation in case the magnetic field is perpendicular to current-flow. Hence, we have obtained a plausible magnetoconductance formula that is in agreement with the Landauer viewpoint, which neglects the effect of the contacts. Its plausibility, and consequently the usefulness of Landauer approach, was obvious once we have subjected it to magnetic field reversal test.

Finally, we have stressed the use of the obtained density operator to describe the quantum Hall effect in case the magnetic field perpendicular to the two-dimension structure is strong. Within the edge states model for transport, supposing the existence of tunneling between those states, we derive a generalized longitudinal and Hall conductance's formulas within linear response theory that for the time being, have not been derived quantitatively.

These formulas describe the regions of the breakdown and lead to the integer quantum Hall effect in case the current flux is dissipation less.

Résumé

Nous développons dans cette thèse une théorie nouvelle pour décrire le phénomène de transport électrique dans les systèmes mésoscopiques en présence d'un champ magnétique faible dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire.

Nous considérons, pour ceci, une structure mésoscopique à deux terminaux, soumise à un champ magnétique uniforme. En outre, le transport est décrit dans le cadre de l'approche de Landauer qui définit le potentiel induit à l'intérieur des terminaux comme une réponse au flux de courant.

Nous dérivons l'opérateur densité dans l'approche de Landauer, nécessaire pour le calcul de toutes les grandeurs physiques. La différence entre cette approche et celle de Kubo, adoptée dans plusieurs travaux, est alors élucidée. Celle-ci se manifeste par un terme supplémentaire au niveau de l'opérateur densité traduisant l'effet de la self consistence. Par ailleurs, une solution exacte de l'équation maîtresse de l'opérateur densité dans le cadre de la théorie de diffusion élastique est dérivée.

Comme première application à ce résultat nous nous intéressons au calcul de la conductance dans un champ magnétique de faible intensité, perpendiculaire au flux de courant. Ainsi nous obtenons une formule de la magnétoconductance excluant l'effet des contacts, ne souffrant d'aucune inconsistance et enfin vérifiant l'invariance par renversement du champ magnétique. La limite d'un champ magnétique nul est discutée. Nous montrons que la formule est bien identique à celle retrouvée dans un champ non nul. Entre autres, nous généralisons quantitativement aussi les formules retrouvées dans la littérature.

En deuxième application directe à l'opérateur densité dérivé, nous proposons un calcul microscopique de l'effet Hall quantique intégral si le champ magnétique appliqué est intense. Nous admettons que l'écoulement du courant est assuré par les états de bords et que la probabilité de réflexion par effet tunnel, si le régime est diffusif, est non nulle. Nous dérivons pour la première fois les formules de la magnétoconductance longitudinale et celle de Hall dans le cas où plusieurs canaux sont impliqués. Nous mettons ainsi en évidence la brisure de l'effet Hall quantique intégral, et montrons que seulement en l'absence de dissipation, la magnétoconductance est nulle alors que la conductance Hall est quantifiée à des entiers.

خص:

تعرض هذه الرسالة دراسة ميكروسكوبية لناقلية أجسام ميزوسكوبية تحت تأثير حقل مغناطيسي في إطار نظرية الإجابة الخطية.

نظريتنا تعتمد أساسا على طريقة لندوار في دراسة الحركة : إذا كان الجسم الميزوسكوبي متصل بناقلين مثاليين مرتبطان بدورهما بخزاننا شحن، فإن التيار المفروض من قبل فرق الكمون المطبق بين الخزانين ينتج فرق كمون بين طرفي الجسم. الناقلية إذا تعطى بالنسبة بين التيار و الكمون المحرض.

نقوم أولا في هذا العمل بإيجاد مؤثر الكثافة، الذي يمكن من حساب جميع المقادير الفيزيائية، بطريقة لندوار من أجل شدة حقل مغناطيسي لاعلى التعيين.

بالفعل عبارة المؤثر المتحصل عليها، بالإضافة إلى كونها علاقة عامة، فإنها أمكنتنا من إيجاد الفرق بين طريقة لندوار و طريقة كيبو. هذا الفرق يتجلى مليا في مؤثر كثافة ناتج من اعتماد عملية التناسق الذاتي.

كتطبيق أول لهاته النتيجة ،الجد مهمة، اعتمدنا حساب ناقلية هاته الأجسام تحت تأثير حقل مغناطيسي ذو شدة ضعيفة. لذلك تم حل و بطريقة صحيحة معادلة مؤثر الكثافة القطري في إطار نظرية التصادم المرن. كنتيجة حتمية لهذا الحل، تمكنا من إيجاد عبارة عام ة و معممة لناقلية. العبارة محققة لجميع الحالات الحديدية و صامدة بعكس إتجاه الحقل المغناطيسي المطبق.

أيضا دراسة إحتمال انعدام الحقل المغناطيسي مكنتنا من توضيح أن العلاقة العامة لناقلية المحصل عليها أنفا محققة أيضا في هات ه الحالة. النتيجة التي تضي بعدا آخر لهذا العمل والمتمثل في إيجاد علاقة معممة لكل العلاقات التي تم التوصل إليها من قبل. أخيرا و كأهم تطبيق لمؤثر الكثافة المحصل عليه، قمنا بدراسة كمية لمفعول هول الكوانتي وهذا تحت تأثير حقل مغناطيسي ذو شدة عالية.

إستنادا إلى كون التيار الساري في الناقل محمول بحالات الجوار، و بإعتبار أن مفعول النفق غير معدوم، تمكنا من إيجاد عبارات عامة لناقلية هول و الناقلية الطولية. الناقلية الطولية مطابقة لناقلية التي وجدت أنفا، أما علاقة ناقلية هول فهي جد مشجعة كونها تعرف حالات الانتقال بين قيمتين مكمتين متتاليتين لناقلية هول. في المقابل فإننا نبين بالفعل بأنه فقط في حالة غياب الانعكاس ، المقاومة الطولية تنعدم، و أما ناقلية هول فهي مكمة بقيم طبيعية.